UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

ALEXSANDER MARCIANO DA CUNHA

ESTRATÉGIAS COMPUTACIONAIS PARA DETERMINAÇÃO DA PERMEABILIDADE DE MEIOS POROSOS UTILIZANDO IMAGENS E ELEMENTOS FINITOS

NITERÓI 2023

ALEXSANDER MARCIANO DA CUNHA

ESTRATÉGIAS COMPUTACIONAIS PARA DETERMINAÇÃO DA PERMEABILIDADE DE MEIOS POROSOS UTILIZANDO IMAGENS E ELEMENTOS FINITOS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Computação da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do Grau de Mestre em Computação. Área de concentração: Ciência da Computação

Orientador: ANDRÉ MAUÉS BRABO PEREIRA

> Coorientador: RICARDO LEIDERMAN

> > NITERÓI 2023

Ficha catalográfica automática - SDC/BEE Gerada com informações fornecidas pelo autor



Bibliotecário responsável: Debora do Nascimento - CRB7/6368

ALEXSANDER MARCIANO DA CUNHA

ESTRATÉGIAS COMPUTACIONAIS PARA DETERMINAÇÃO DA PERMEABILIDADE DE MEIOS POROSOS UTILIZANDO IMAGENS E ELEMENTOS FINITOS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Computação da Universidade Federal Fluminense como requisito parcial para a obtenção do Grau de Mestre em Computação. Área de concentração: Ciência da Computação

Aprovada em Setembro de 2023.

BANCA EXAMINADORA André Maris Brabo Perena Prof. André Maués Brabo Pereira - Orientador, UFF Card a Prof. Ricardo Leiderman - Coorientador, UFF Prof. Luís Antôniø Guimarães Bitencourt Júnior, USP Prof. Marcos de Oliveira Lage Ferreira, UFF Pedro Conter F Lopes

Dr. Pedro Cortez Fetter Lopes, UFF

Niterói 2023

Agradecimentos

Não posso começar esse texto sem primeiramente agradecer aos meus pais, Sebastião Marciano e Cristina Souza, meus maiores exemplos de amor, gentileza e integridade. Obrigado por toda a amizade, carinho e suporte. Obrigado por sempre acreditarem em mim.

Agradeço ao meu namorado, Gustavo Moreira, por me fazer tão feliz. Seu amor vai além de tudo o que eu posso dizer.

Agradeço a todos os meus familiares, por todo o apoio, carinho e suporte dados em todos esses anos.

Agradeço aos professores André Pereira e Ricardo Leiderman, por todo suporte, incentivo e ensinamentos durante grande parte da minha vida acadêmica na UFF. É um prazer tê-los como professores e orientadores.

Agradeço também aos amigos do LCC, em especial ao Pedro Cortez, Pedro Vianna, Rafael Vianna e Victor Sapucaia, exemplos de profissionais nos quais também pude encontrar grandes amigos. Obrigado pela enorme contribuição na construção desse trabalho.

Agradeço aos amigos que fazem eu me sentir privilegiado por tê-los como família: Cadu Brandão, Felipe Lopes, Guilherme Andrade, Isadora Monticelli, Jhonatan Duque, Larissa Menezes, Rafael Rodrigues, Rafael Amorim, Vinicius Lavall, Vinicius Nirello e Yuri Souza. Minha vida pelas suas.

Por fim, agradeço à Universidade Federal Fluminense e a todos os professores do Instituto de Computação por todo o conhecimento, oportunidades, amizades e histórias que me proporcionaram durante esta trajetória. Estendo o agradecimento a toda a equipe de funcionários que mantém o Instituto funcionando e sua estrutura bem cuidada. Muito obrigado a todos.

Resumo

Este trabalho simula o escoamento de Stokes em meios porosos por elementos finitos. Aqui, são utilizadas as formulações Q1-Q1 com estabilização da pressão, Q2-Q1 e Q2-P1 para aproximar os campos de pressão e velocidade. As soluções são comparadas por meio de medidas de permeabilidade, baseadas nos campos de velocidade. Além disso, é analisado um método de solução iterativa, onde o complemento de Schur desempenha um papel fundamental. Nesse método, é adotada uma modificação do sistema convencional de ponto de sela para um sistema condensado, que pode ser resolvido através de dois níveis. A ideia principal é substituir o problema de ponto de sela (um sistema de equações simétricas indefinidas) pela solução de subsistemas de equações simétricas utilizando o Gradiente Conjugado. O complemento de Schur é substituído por operações subsequentes entre matrizes e vetores, eliminando a necessidade do cálculo da inversa de matrizes ou da solução de sistemas de equações com múltiplos lados direitos. É possível obter duas formulações distintas do método para a solução do problema, realizando a triangularização superior ou inferior do sistema de equações algébricas. A triangularização inferior é aplicada somente à formulação Q1-Q1 com estabilização da pressão, uma vez que a ausência da matriz de estabilização nos modelos biquadráticos não permite o cálculo das variáveis por essa estratégia. Por outro lado, a triangularização superior fornece uma estratégia que pode ser aplicada a todas as formulações abordadas neste trabalho. Diversos resultados numéricos são comparados com resultados da literatura para validar e demonstrar a aplicabilidade dos elementos finitos e do método de solução em dois níveis. O Gradiente Conjugado em dois níveis oferece padrões de convergência estáveis e rápidos, em relação ao número de iterações. Por fim, é realizada a estimativa das permeabilidades de um conjunto de meios porosos sintéticos a partir de dados de Ressonância Magnética Nuclear, utilizando algoritmos de aprendizado de máquina. Para treinar os modelos de aprendizado de máquina, as permeabilidades dos meios porosos foram determinadas com elementos finitos. Dessa forma, essa aplicação exemplifica de maneira prática e significativa a utilização da determinação computacional da permeabilidade.

Palavras-chave: elementos finitos, permeabilidade, homogeneização, gradiente conjugado, Stokes.

Abstract

This work simulates Stokes flow in porous media using finite elements. Here, Q1-Q1 formulations with pressure stabilization, Q2-Q1, and Q2-P1 are used to approximate the pressure and velocity fields. The solutions are compared through permeability measurements based on velocity fields. Furthermore, an iterative solution method is analyzed, where the Schur complement plays a fundamental role. In this method, a modification of the conventional saddle point system is adopted to create a condensed system that can be solved in two levels. The main idea is to replace the saddle point problem (an indefinite system of symmetric equations) with the solution of nearly positive definite symmetric equation systems using the Conjugate Gradient method. The Schur complement is replaced by subsequent operations between matrices and vectors that eliminate the need for calculating matrix inverses or solving systems of equations with multiple right-hand sides. Two distinct formulations of the method can be obtained for solving the problem by the upper or lower triangularization of the algebraic equation system. Lower triangularization is only applied to the code using the Q1-Q1 formulation with pressure stabilization, as the absence of the stabilization matrix in biquadratic models does not allow the variables to be computed using this strategy. On the other hand, upper triangularization provides a strategy that can be applied to all approximations addressed in this work. Various numerical results are compared with literature results to validate and demonstrate the applicability of Finite Elements and the two-level solution method. The two-level Conjugate Gradient offers stable and fast convergence patterns in terms of the number of iterations. Finally, the estimation of the permeabilities of a set of synthetic porous media from Nuclear Magnetic Resonance data is performed using machine learning algorithms. To train the machine learning models, the permeabilities of porous media were determined using finite elements. Thus, this application provides a practical and meaningful example of the computational determination of permeability.

Keywords: finite elements, permeability, homogenization, conjugate gradient, Stokes.

Lista de Figuras

1	(a) Elemento quadrilátero bilinear; (b) funções de forma bilineares. $\ . \ . \ .$	26
2	(a) Elemento quadrilateral biquadrático; (b) funções de forma biquadráticas.	27
3	Célula periódica bidimensional que ilustra a seção transversal de uma ma- triz de cilindros paralelos. Fase sólida em cinza e fase porosa (vazia) em azul	38
4	Convergência da análise numérica de permeabilidade para o modelo ilustrado na Figura 3, usando o GC em dois níveis com tolerância de 10^{-8} . O gráfico à esquerda apresenta os resultados para a permeabilidade, enquanto o da direita mostra o erro numérico em uma escala logarítmica. Aqui, κ representa a permeabilidade obtida pelas simulações, enquanto $\kappa_{DT} = 2,0444 \times 10^4$ D corresponde ao valor esperado da Equação (5.1).	39
5	Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para a amostra mostrada na Figura 3 com diferentes métodos de solução e tama- nhos de malha	40
6	Evolução da quantidade de iterações do GC no nível interno, em relação à convergência do nível externo. As contagens de iterações do nível interno são normalizadas pela média respectiva (Tabela 3), enquanto as contagens de iterações do nível externo são normalizadas para um intervalo [0,1]. Simulações com o modelo mostrado na Figura 3	42
7	Convergência do resíduo normalizado observado com o GC em dois níveis considerando uma tolerância numérica variável para o nível interno. A tolerância numérica para o nível externo foi definida como $\epsilon_{\rm externo} = 10^{-6}$. Análise da amostra sintética ilustrada na Figura 3, com a imagem de 1024×1024 pixels	43
8	Microtomografia computadorizada segmentada de um material compósito reforçado com fibras (MEHDIKHANI et al., 2021), e uma de suas fatias	
	(FERREIRA et al., 2023)	44

9	Convergência da permeabilidade obtida para o compósito reforçado com fibras mostrado na Figura 8	45
10	Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para as imagens de 364×364 e 1456×1456 do modelo mostrado na Figura 8. O lado esquerdo apresenta os resultados para a direção x , enquanto o lado direito mostra os resultados para a direção y	46
11	Microtomografia segmentada bidimensional de uma amostra de arenito for- necida por (VIANNA et al., 2020).	47
12	Convergência da análise numérica da permeabilidade para o arenito ilus- trado na Figura 11, utilizando o GC em dois níveis com uma tolerância numérica de 10^{-3} . K_{xx} representa a permeabilidade na direção x , enquanto K_{yy} representa a permeabilidade na direção y	48
13	Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para as imagens de 600×600 e 2400×2400 da amostra de arenito mostrada na Figura 11. À esquerda, métricas para a direção x , à direita, métricas para a direção y .	49
14	Convergência da análise numérica de permeabilidade para o modelo ilus- trado na Figura 3, usando a segunda abordagem do GC em dois níveis com tolerância de 10 ⁻⁸ . O gráfico à esquerda apresenta os resultados para a permeabilidade, enquanto o da direita mostra o erro numérico em uma escala logarítmica. Aqui, κ representa a permeabilidade obtida pelas si- mulações, enquanto $\kappa_{DT} = 2,0444 \times 10^4$ D corresponde ao valor esperado da Equação (5.1).	51
15	Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma $L2$ para a amostra mostrada na Figura 3 com a aproximação Q1-Q1	52
16	Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma $L2$ para a amostra mostrada na Figura 3 com a aproximação Q2-Q1	54
17	Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma $L2$ para a amostra mostrada na Figura 3 com a aproximação Q2-P1	56

18	Evolução da quantidade de iterações do GC no nível interno, em relação à convergência do nível externo. O primeiro gráfico (esquerda superior) se refere à formulação Q1-Q1, o segundo (direita superior) à Q2-Q1 e o terceiro (centro inferior) à Q2-P1. As contagens de iterações do nível in- terno são normalizadas pela média respectiva, enquanto as contagens de iterações do nível externo são normalizadas para um intervalo [0,1]	58
19	Convergência do resíduo normalizado observado com o GC em dois níveis considerando uma tolerância numérica variável para o nível interno. A tolerância numérica para o nível externo foi definida como $\epsilon_{\text{externo}} = 10^{-6}$. Análise da amostra sintética ilustrada na Figura 3, com a imagem de 512×512 pixels	59
20	Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para a imagem de 364×364 do modelo mostrado na Figura 8 usando a aproxi- mação Q1-Q1. O lado esquerdo apresenta os resultados para a direção x , enquanto o lado direito mostra os resultados para a direção y	61
21	Convergência do resíduo normalizado (norma L2) para a imagem de $364x364$ da amostra do compósito reforçado por fibras usando a formulação Q2-Q1. As métricas para a direção x estão à esquerda, enquanto as métricas para a direção y estão à direita	63
22	Convergência do resíduo normalizado (norma L2) para a imagem de 364x364 da amostra do compósito reforçado por fibras usando a formulação Q2-P1. As métricas para a direção x estão à esquerda, enquanto as métricas para a direção y estão à direita.	64
23	Convergência da análise numérica da permeabilidade para o arenito ilus- trado na Figura 11, utilizando o GC em dois níveis com uma tolerância numérica de 10^{-3} . K_{xx} representa a permeabilidade na direção x , enquanto K_{yy} representa a permeabilidade na direção y	65
24	Convergência do resíduo normalizado (norma L2) para a imagem de 600×600 da amostra de arenito usando a formulação Q1-Q1. As métricas para a di- reção x estão à esquerda, enquanto as métricas para a direção y estão à	
	direita	66

25	Convergência do resíduo normalizado (norma L2) para a imagem de 600×600	
	da amostra de arenito usando a formulação Q2-Q1. As métricas para a di-	
	reção x estão à esquerda, enquanto as métricas para a direção y estão à	
	direita	67
26	Convergência do resíduo normalizado (norma L2) para a imagem de 600×600	
	da amostra de arenito usando a formulação Q2-P1. As métricas para a di-	
	reção x estão à esquerda, enquanto as métricas para a direção y estão à	
	direita	68
27	Fatias bidimensionais de meios porosos tridimensionais gerados sintetica-	
	mente. A região branca corresponde ao componente sólido, enquanto a	
	região preta indica a região porosa	71
28	Relação entre a permeabilidade absoluta, obtida através do MEF, e a per-	
	meabilidade estimada utilizando o MLP no contexto do Caso 1. Todos os	
	valores estão representados em uma escala logarítmica	78
29	Relação entre a permeabilidade absoluta, obtida através do MEF, e a per-	
	meabilidade estimada utilizando o MLP no contexto do Caso 2. Todos os	
	valores estão representados em uma escala logarít mica	80
30	Relação entre a permeabilidade absoluta, obtida através do MEF, e a per-	
	meabilidade estimada utilizando o MLP no contexto do Caso 3. Todos os	
	valores estão representados em uma escala logarítmica	81

Lista de Tabelas

1	Subsistemas a serem resolvidos para a velocidade e pressão nodais, de acordo com a abordagem de triangularização pelo complemento de Schur adotada	32
2	Sistemas a serem resolvidos nos níveis externo e interno do método de solução em dois níveis baseado nos subespaços de Krylov, de acordo com a abordagem de triangularização baseada no complemento de Schur	36
3	Número de iterações para os níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis aplicado ao modelo de referência.	41
4	Número de iterações para os níveis internos (média \pm desvio padrão da amostra) e externos no GC em dois níveis aplicado à amostra do compósito reforçado por fibras.	47
5	Número de iterações para os níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis aplicado à amostra de arenito	50
6	Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determina- ção da velocidade por meio do GC convencional, aplicados ao modelo de validação usando a formulação Q1-Q1	53
7	Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determina- ção da velocidade por meio do GC convencional, aplicados ao modelo de validação usando a formulação Q2-Q1	55
8	Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determina- ção da velocidade por meio do GC convencional, aplicados ao modelo de validação usando a formulação Q2-P1	57

9	Valores de permeabilidade para o compósito reforçado por fibras calcula- dos pelas formulações Q1-Q1, Q2-Q1 e Q2-P1 com tolerância numérica $\epsilon_{\text{externo}} = 10^{-4}$.	60
10	Convergência do resíduo normalizado (norma L2) da amostra do compó- sito reforçado por fibras usando a formulação Q1-Q1. As métricas para a direção x estão à esquerda, enquanto as métricas para a direção y estão à direita	62
11	Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determina- ção da velocidade por meio do GC convencional, aplicados ao compósito reforçado por fibras usando a formulação Q2-Q1	63
12	Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determina- ção da velocidade por meio do GC convencional, aplicados ao compósito reforçado por fibras usando a formulação Q2-P1	64
13	Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determinação da velocidade por meio do GC convencional, aplicados à amostra de arenito usando a formulação Q1-Q1	66
14	Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média ± desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determinação da velocidade por meio do GC convencional, aplicados à amostra de arenito usando a formulação Q2-Q1	67
15	Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média ± desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determinação da velocidade por meio do GC convencional, aplicados à amostra de arenito usando a formulação Q2-P1	68
16	Métricas de avaliação das estimativas de permeabilidade no caso em que todos os exemplos possuem o mesmo ρ	78
17	Métricas de avaliação das estimativas de permeabilidade no caso em que cada exemplo possui um ρ diferente não informado ao modelo	79

18	18 Métricas de avaliação das estimativas de permeabilidade no caso em que			
	cada exemplo possui um ρ diferente, informado ao modelo por meio da			
	curva de distribuição de tamanho de poro . \ldots . \ldots . \ldots . 80			
19	Comparação entre as melhores métricas de avaliação dos três experimentos			
	realizados. Todas as métricas são correspondentes ao MLP			

Sumário

1	Intro	ntrodução			
	1.1	Contextualização	12		
	1.2	Motivação	14		
	1.3	Contribuição Principal	15		
	1.4	Estrutura do Trabalho	16		
2	Revi	são da Literatura	17		
	2.1	O Problema de Stokes com o Método dos Elementos Finitos	17		
	2.2	Solução do Problema de Ponto de Sela	19		
3	Perr	rmeabilidade com Elementos Finitos 2			
	3.1 Determinação da Permeabilidade Absoluta por Homogeneização Numério		21		
	3.2	Formulação do Problema com Elementos Finitos			
		3.2.1 Aproximação Q1-Q1 com Estabilização para a Pressão 	26		
		3.2.2 Aproximação Q2-Q1	27		
		3.2.3 Aproximação Q2-P1	28		
	3.3	Implementação de Condições de Contorno Periódicas	28		
4	Estr	atégia para Solução do Problema de Stokes em Dois Níveis	30		
	4.1	O Complemento de Schur para o Problema de Stokes	30		
	4.2	O GC em Dois Níveis	32		

	5.1	GC en	Dois Níveis a Partir da Triangularização Inferior do Sistema	37
		5.1.1	Testes de Validação	37
		5.1.2	Aplicação: Permeabilidade Absoluta de Amostras de Varreduras de μCT	43
			5.1.2.1 Material Compósito Reforçado com Fibras	44
			5.1.2.2 Arenito	47
	5.2	GC en	n Dois Níveis a Partir da Triangularização Superior do Sistema de	
		Equaçõ	ðes	50
		5.2.1	Testes de Validação	50
		5.2.2	Aplicação: Permeabilidade Absoluta de Amostras de Varreduras	
			de μCT	59
			5.2.2.1 Material Compósito Reforçado com Fibras	60
			5.2.2.2 Arenito	64
6	Apli	cação P	rática: Estimativa da Permeabilidade de Meios Porosos por Aprendi-	
	zado	o de Má	quina	69
	6.1	Meios	Porosos Sintéticos em 3D	71
	6.2	Simula	ção de Random Walk Baseada em Voxels	71
	6.3	Cálcul	o de Permeabilidade com Homogeneização Numérica	72
	6.4	Estime	tiva de Permeabilidade com SDR	72
	6.5	Estima	tiva de Permeabilidade com Inteligência Artificial	73
		6.5.1	Pré Processamento	74
		6.5.2	Seleção de Algoritmo	75
		6.5.3	Avaliação de Desempenho	76
	6.6	Result	ados e Discussão	77
		6.6.1	Caso 1 - Instâncias de Mesma Relaxatividade Superficial e Curvas T2 como Atributos	77

	6.6.2	Caso 2 - Instâncias de Relaxatividades Superficiais Variadas e Cur-	-
		vas 12 como Atributos \dots	79
	0.0.3	vas S/V como Atributos	80
7	Conclusão		83
RI	EFERÊNCIA	S	85

1 Introdução

1.1 Contextualização

O estudo da microestrutura de materiais porosos permite a determinação de propriedades características importantes para a compreensão do seu comportamento. No contexto das pesquisas relacionadas à petrofísica e ao estudo das rochas reservatório, o conhecimento das interconexões de espaços vazios dentro dos meios porosos é fundamental para definir a permeabilidade, que mensura a capacidade de um fluido escoar através do material poroso. A utilização de técnicas de imageamento na escala microscópica como a microtomografia computadorizada de raios-X (μ CT) possibilita que as simulações computacionais baseadas em imagem se beneficiem naturalmente do conhecimento da microestrutura interna do material. Por meio do uso de técnicas de homogeneização numérica, os valores de permeabilidade são obtidos calculando a média das velocidades induzidas por um gradiente de pressão imposto em um volume específico do meio poroso. O volume específico analisado deve capturar de maneira estatisticamente significativa a distribuição de vazios e sólidos dentro do meio poroso, garantindo que a propriedade derivada reflita fielmente sua contraparte no mundo real. Esse volume característico é denominado Volume Elementar Representativo (VER) (BACHMAT; BEAR, 1987).

Para obter o campo de velocidades do escoamento, é necessário resolver as equações governantes do problema: as equações de Stokes, que descrevem o escoamento lento de fluidos viscosos e incompressíveis em termos das variáveis de velocidade e pressão. Essas equações governantes são resolvidas computacionalmente por meio de métodos numéricos que aproximam a solução do problema dentro do domínio considerado. O Método dos Elementos Finitos (MEF) é uma abordagem utilizada para resolver o problema do escoamento de Stokes devido à sua flexibilidade para lidar com diferentes geometrias e à facilidade de implementação de diversas condições de contorno (ANDREASSEN; AN-DREASEN, 2014; AKANJI; MATTHAI, 2010; YANG et al., 2019; VIANNA et al., 2020).

Para resolver numericamente as equações governantes do problema de Stokes e captu-

rar o comportamento estacionário do escoamento pelo MEF, o domínio é discretizado em elementos menores e são realizadas aproximações locais da solução usando a forma fraca (integral) das equações governantes. Cada elemento possui pontos específicos, normalmente chamados de nós, que podem estar localizados nos vértices, arestas ou interior do elemento, onde os valores desconhecidos da solução são aproximados. As aproximações locais são feitas em cada elemento finito usando um conjunto de funções de interpolação, também conhecidas como funções de forma, para aproximar as variáveis nodais desconhecidas na forma fraca das equações governantes. As funções de aproximação são polinômios contínuos e diferenciáveis que, no caso do problema de Stokes, geralmente satisfazem uma crítica condição para garantir a estabilidade e convergência da solução: a condição infsup (BATHE, 2001; STRANG, 2006b; REDDY, 2005). É possível o uso de funções de aproximação que não satisfazem a condição inf-sup, entretanto é necessária a introdução de termos numéricos nas equações governantes para obter convergência e estabilidade (BATHE, 2001).

Após escolher as funções para aproximar as variáveis desconhecidas, as formulações do MEF para problemas físicos levam a um sistema de equações lineares. Os coeficientes e o lado direito do sistema de equações são determinados integrando a forma fraca das equações diferenciais sobre cada elemento. No caso do escoamento de Stokes, o sistema de equações resultante é um sistema linear grande, esparso, simétrico e indefinido, caracterizado como um problema de ponto de sela (STRANG, 2006a). O desafio associado ao problema do ponto de sela está na busca da solução, pois apresenta pontos com declividade nula não correspondem a um máximo ou mínimo local. Portanto, a solução desse problema requer a aplicação de abordagens específicas, dado que alguns métodos garantem a obtenção da solução apenas para problemas simétricos e definidos.

No contexto das aplicações da determinação da permeabilidade absoluta a partir de imagens da microestrutura interna dos meios porosos, como relatado e discutido neste trabalho, essa ferramenta possui grande importância para o estudo e compressão de rochas. Como exemplo, a construção de um conjunto de dados com imagens de rochas e suas permeabilidades calculadas computacionalmente pode ser empregada para prever a permeabilidade de novas rochas a partir dos dados de Ressonância Magnética Nuclear (RMN) extraídos dos reservatórios.

1.2 Motivação

A determinação computacional da permeabilidade de meios porosos utilizando o MEF encontra desafios relacionados à qualidade das aproximações das variáveis e à resolução dos sistemas lineares de equações. Ambos os desafios possuem múltiplas abordagens para solucionar o problema. Quanto às funções de aproximação, é possível encontrar funções de aproximação bem estabelecidas que garantem a convergência das soluções do MEF (HUGHES, 2000; REDDY, 2005). As diferentes aproximações variam no grau dos polinômios, na quantidade de nós por elemento e na continuidade do domínio das variáveis. Essas abordagens apresentam vantagens distintas: algumas utilizam menor número de nós e graus de liberdade, outras apresentam melhor taxa de convergência para malhas menos refinadas (REDDY, 2005). A seleção da implementação a ser utilizada varia de acordo com o propósito da aplicação.

No caso da solução do sistema de equações lineares, o problema do escoamento de Stokes requer a solução de um problema de ponto de sela, exigindo algoritmos especializados devido à natureza indefinida do sistema. Esses fatores podem resultar em instabilidade numérica, alta sensibilidade a erros e dificuldade de convergência de certos métodos durante os processos de solução (STRANG, 2006b).

Além dos desafios inerentes à resolução de sistemas de ponto de sela, no contexto do cálculo da permeabilidade, é essencial considerar representações detalhadas do meio poroso capazes de capturar com precisão o comportamento do fluido nos poros. Por exemplo, modelos obtidos por μ CT podem oferecer níveis elevados de detalhamento, demandando um número significativo de variáveis para descrever adequadamente a estrutura porosa. Portanto, para resolver problemas de grande porte, os métodos iterativos geralmente possuem vantagens em termos de tempo de computação e uso de memória em comparação com os métodos diretos. Entretanto, certas abordagens iterativas para resolver sistemas de ponto de sela podem exigir uma quantidade significativa de memória, especialmente quando pré-condicionadores que lidam com matrizes grandes são utilizados, e podem não convergir para o resultado esperado.

Com base no exposto, este trabalho explora diferentes aproximações para as variáveis do escoamento de Stokes no MEF e apresenta uma estratégia para resolver sistemas de ponto de sela. A solução do sistema é realizada através da aplicação de um método iterativo e manipulações algébricas, especificamente o complemento de Schur. Esse método possibilita a solução das variáveis de velocidade e pressão de forma separada e iterativa, e apresenta um bom perfil de convergência dos resíduos normalizados.

Adicionalmente, com o propósito de ilustrar a aplicação do cálculo computacional da permeabilidade a partir de imagens, este trabalho apresenta a estimativa das permeabilidades de um conjunto de rochas sintéticas por meio de algoritmos de aprendizado de máquina. O MEF desempenha um papel fundamental na formação das informações empregadas nesse processo, visto que nos modelos de aprendizado de máquina, as estimativas são construídas a partir do conhecimento adquirido de um conjunto de dados previamente existentes, conhecidos como dados de treinamento. Em outras palavras, utilizando as informações derivadas de outras amostras de rochas, neste caso os dados de RMN e as correspondentes permeabilidades, os modelos conseguem estimar a permeabilidade de uma nova amostra rochosa. As curvas T_2 dos meios porosos são simuladas por meio do método do *Random Walk* (RW, ou "Caminhantes Aleatórios"em português). Essa abordagem tem como intuito não apenas estimar a permeabilidade dos meios porosos, mas também evidenciar a relevância da relaxividade superficial (ρ) na tarefa de determinar a permeabilidade com base em dados provenientes de RMN.

1.3 Contribuição Principal

Este trabalho apresenta o uso das aproximações Q1-Q1 (aproximação bilinear tanto para a velocidade quanto para a pressão) com estabilização para a pressão, Q2-Q1 (aproximação biquadrática para a velocidade e aproximação bilinear para a pressão) e a aproximação Q2-P1 (aproximação biquadrática para a velocidade e aproximação bilinear para a pressão) sem garantia de continuidade para a pressão). Essas abordagens são implementadas com o uso de condições de contorno periódicas e são comparadas quanto às taxas de convergência conforme a malha é refinada para diferentes exemplos. As variáveis nodais do problema são calculadas por meio de uma abordagem para a solução de sistemas de ponto de sela do escoamento de Stokes que faz uso do Complemento de Schur para obter subsistemas condensados. Um método de solução em dois níveis com o GC adaptado é apresentado para lidar com o subsistema originado do complemento de Schur, o qual não requer o cálculo ou armazenamento do inverso do bloco resultante do Complemento de Schur. A ideia é incorporá-lo como uma solução de sistema única por iteração, dentro de um produto matriz-vetor.

Explorando o GC em dois níveis, observam-se padrões de convergência estáveis e relativamente rápidos em termos do número de iterações. Os resultados foram validados por meio da determinação da permeabilidade de um meio poroso que possui solução semianalítica e com respostas obtidas por outros métodos de solução aplicados ao sistema global (GC convencional e método dos Mínimos Resíduos). Além disso, foram considerados dois exemplos provenientes de varreduras de μ CT: um compósito reforçado com fibras (MEHDIKHANI et al., 2021) e um arenito (VIANNA et al., 2020).

1.4 Estrutura do Trabalho

O trabalho é organizado em 8 capítulos. O Capítulo 2 apresenta uma revisão da literatura sobre o uso do MEF para a determinação da permeabilidade absoluta e sobre a solução de problemas de ponto de sela. No Capítulo 3, é descrita a metodologia utilizada para a determinação da permeabilidade por meio do MEF. O método empregado na solução do problema de ponto de sela é discutido no Capítulo 4. Os resultados são apresentados e analisados no Capítulo 5, de acordo com a abordagem do complemento de Schur. No Capítulo 6, são introduzidos e discutidos os resultados da aplicação da estimativa da permeabilidade utilizando aprendizado de máquina. Por fim, o Capítulo 7 traz as conclusões e considerações finais.

2 Revisão da Literatura

2.1 O Problema de Stokes com o Método dos Elementos Finitos

Vários estudos, como os de Andreassen e Andreasen (ANDREASSEN; ANDREASEN, 2014), Aarnes et al. (AARNES; GIMSE; LIE, 2007), Sheng e Zhi (SHENG; ZHI, 2002), Akanji e Mattha (AKANJI; MATTHAI, 2010) e Yang et al. (YANG et al., 2019), ilustram o uso de métodos computacionais como o Método dos Elementos Finitos (MEF), volumes finitos, diferenças finitas e lattice Boltzmann para determinar a permeabilidade por homogeneização numérica (BLUNT. et al., 2013; MOSTAGHIMI; BLUNT; BIJELJIC, 2013). A determinação da permeabilidade de materiais porosos apresenta características peculiares. Encontrar na literatura documentos que abordem a programação no contexto deste tipo de problema de maneira abrangente não é uma tarefa fácil. Além disso, a maioria dos códigos disponíveis na literatura concentra esforços na eficiência computacional, o que pode levar à falta de detalhes importantes para a compreensão por parte do leitor. No entanto, os trabalho de Andreassen e Andreasen (ANDREASSEN; AN-DREASEN, 2014) e Vianna et al. (VIANNA et al., 2020) podem ser considerados bons exemplos que oferecem uma descrição educacional do problema de forma compacta, utilizando estratégias desenvolvidas em MatLab. Por essas razões, o trabalho de Vianna et al. (VIANNA et al., 2020) foi utilizado como ponto de partida e referência fundamental para os desenvolvimentos abordados neste trabalho.

Um ponto chave das formulações do MEF abordadas neste trabalho é a escolha das funções de aproximação. Para a escolha das funções de aproximação, é importante atentar-se ao fato de que a derivada do campo de velocidades deve ter um grau maior do que a derivada do campo de pressão de acordo com a equação de Stokes. Outro requisito é a satisfação da condição inf-sup, também conhecida como condição de LBB devido aos trabalhos de Ladyzhenskaya (LADYZHENSKAYA, 1969), Babuška (BABUŠKA, 1995) e Brezzi (BREZZI, 1974). Esse requisito é necessário para garantir a estabilidade e a convergência da solução pelo MEF. De acordo com (REDDY, 2005), elementos que não

satisfazem a condição inf-sup apresentam resultados geralmente bons para a velocidade, mas não para a pressão. Essa condição não é demonstrada neste trabalho, entretanto ela é apresentada e discutida de acordo com a formulação mista do MEF em (BATHE, 2001; STRANG, 2006b).

De acordo com Reddy (REDDY, 2005) elementos quadriláteros oferecem resultados melhores para a aproximação da pressão do que os triangulares. Além disso, Bathe (BATHE, 2006) e Elman et al. (ELMAN; SILVESTER; WATHEN, 2014) citam as seguintes aproximações como satisfatórias para a condição inf-sup: a aproximação Q2-Q1 (que envolve aproximação biquadrática para a velocidade e aproximação bilinear para a pressão), também conhecida como método de Taylor-Hood; a aproximação Q2-P1 (com aproximação biquadrática para a velocidade e aproximação bilinear para a pressão em cada elemento, sem garantia de continuidade); e a aproximação Q2-P0 (com aproximação biquadrática para a velocidade e pressão constante em cada elemento).

Para lidar com a questão da instabilidade e obter resultados favoráveis, algumas aproximações que não atendem à condição inf-sup incorporam constantes numéricas em suas formulações (HUGHES; FRANCA; MALLET, 1986; HUGHES; FRANCA; BALESTRA, 1986; BATHE, 2001). Essas constantes visam relaxar a restrição de compressibilidade (REDDY, 2005). Diante disso, vários autores exploraram a utilização de técnicas de estabilização em conjunto com esse método de aproximação (ANDREASSEN; ANDRE-ASEN, 2014; KARIM; KRABBENHOFT; LYAMIN, 2014; BRAACK; SCHIEWECK, 2011; CODINA; BLASCO, 1997; BECKER; HANSBO, 2008; VIANNA et al., 2020). Nesse contexto, a opção pela utilização das funções de aproximação Q1-Q1 (que incluem aproximação bilinear tanto para velocidade quanto para pressão dentro de cada elemento), juntamente com a aplicação de técnicas de estabilização, surge como uma alternativa viável.

Embora a aproximação bilinear seja vantajosa do ponto de vista computacional, a utilização de aproximações biquadráticas oferece uma vantagem adicional. Isso ocorre porque essas aproximações incorporam nós internos nas arestas e no centro do elemento, permitindo uma representação mais precisa do perfil de velocidade em imagens menos refinadas (JOHN, 2002). Esse aspecto é de particular interesse no contexto da determinação da permeabilidade a partir de malhar baseadas em imagens.

2.2 Solução do Problema de Ponto de Sela

No contexto do cálculo de permeabilidade em meios porosos, a representação precisa da microestrutura em questão é essencial, o que significa que malhas refinadas (imagens de alta resolução) são de interesse, geralmente obtidas por meio da Microtomografia Computadorizada (μ CT) (ANDRÄ et al., 2013a,b; BLUNT. et al., 2013). Para resolver problemas em grande escala, métodos iterativos geralmente são preferíveis a métodos diretos devido à alocação de memória e tempo de computação reduzidos. Os métodos de Krylov são notáveis nesse cenário, como o Método dos Mínimos Resíduos (MINRES) (PAIGE; SAUNDERS, 1975; FONG D. C.; SAUNDERS, 2012) e o método dos Gradientes Conjugados (GC) (HESTENES; STIEFEL, 1952; LANCZOS, 1952; SHEWCHUK, 1994). No caso do escoamento estacionário de Stokes, o MINRES é recomendado devido à sua capacidade de lidar eficientemente com sistemas indefinidos (FONG D. C.; SAUNDERS, 2012; PAIGE; SAUNDERS, 1975; PEARSON; PESTANA, 2020; PETERS; REICHELT; REUSKEN, 2005; STRANG, 2006b; LAI; LIN; PIERCE, 1997). Por outro lado, o GC é reconhecido como uma das técnicas iterativas mais eficazes para resolver sistemas lineares esparsos e definidos positivos simétricos (SPD) (SAAD, 2003). Entretanto, para aprimorar o desempenho de métodos iterativos em sistemas indefinidos, técnicas algébricas como o pré-condicionamento podem ser empregadas. O pré-condicionamento envolve a introdução de uma matriz que visa melhorar o condicionamento da matriz de coeficientes do sistema, facilitando a convergência iterativa mais eficiente e eficaz. Como o sistema de ponto de sela gerado pelo MEF é simétrico, se um pré-condicionador também simétrico for adotado, esse tipo de sistema é geralmente resolvido pelo MINRES. Caso contrário, é comum utilizar o método dos Mínimos Resíduos Generalizado (SAAD; SCHULTZ, 1986). Ambos são métodos iterativos de subespaço de Krylov (STRANG, 2006a). Mais informações sobre pré-condicionamento podem ser obtidas em, por exemplo, (PEARSON; PESTANA, 2020; BENZI, 2002). O GC também pode fornecer soluções. No entanto, muitas vezes é evitado porque não garante convergência para problemas indefinidos.

Também é importante mencionar que uma prática comum nas comunidades de simulação de fluxo de fluidos é o uso de solucionadores do Método Semi-Implicito para Equações de Pressão Acopladas (SIMPLE) (BLUNT. et al., 2013; FERZIGER; PERIĆ, 2002). Esse tipo de método visa resolver a pressão e a velocidade separadamente, por meio de esquemas baseados em correção da pressão seguida de atualizações da velocidade, ao invés de montar as matrizes globais e resolver o sistema acoplado de uma vez. Conforme afirmado por (FERZIGER; PERIĆ, 2002), os algoritmos SIMPLE são bastante eficientes para resolver problemas em estado estacionário. Observe que existem muitas variações desse método com nomes ligeiramente diferentes, mas as ideias por trás deles compartilham as mesmas bases.

Outra possibilidade é a utilização do complemento de Schur, que consiste em uma técnica algébrica para o rearranjo de matrizes bloco-estruturadas, como é o caso do sistema de equações que fornece a solução do problema de Stokes pelo MEF. O rearranjo das matrizes pode permitir que o sistema de equações seja resolvido em blocos, e também possibilita a criação de algumas técnicas de pré-condicionamento (CLEVENGER; HEIS-TER, 2021; MEIER; BÄNSCH; FRANK, 2022). Em resumo, a ideia é isolar os blocos por eliminação Gaussiana. Uma metodologia bem conhecida baseada no complemento de Schur para resolver o problema de Stokes é o emprego de solucionadores Uzawa (FORTIN; GLOWINSKI, 1983; GLOWINSKI, 1984, 2003; TEMAM, 1984; TUREK, 1999; CHEN, 2018), que calculam velocidade e pressão de forma aproximada por meio de soluções de subsistemas de forma iterativa. Ainda assim, os algoritmos de Uzawa não são a única possibilidade de usar o Complemento de Schur para ajudar a resolver o problema de Stokes, como será mostrado neste trabalho.

3 Permeabilidade com Elementos Finitos

3.1 Determinação da Permeabilidade Absoluta por Homogeneização Numérica

O cálculo da permeabilidade absoluta das microestruturas de meios porosos, geralmente obtidas por técnicas de imageamento como a microtomografia computadorizada (μ CT), representa um desafio de natureza multi-escala. A obtenção do parâmetro macroscópico, a permeabilidade, está diretamente vinculada à avaliação do campo microscópico de velocidade do escoamento. Dessa forma, a determinação da permeabilidade do meio requer a solução das equações que governam o comportamento do campo de velocidade em nível microscópico dentro da estrutura porosa.

Uma vez determinado o campo de velocidades do meio, a ligação entre a macroescala e a microescala é estabelecida por meio da aplicação de técnicas de homogeneização. A descrição do processo de homogeneização apresentada a seguir baseia-se em trabalhos anteriores, tais como (HASHIN; SHTRIKMAN, 1962; HILL, 1963).

A aplicação de técnicas de homogeneização numérica à microestrutura de materiais multifásicos, como os meios porosos, frequentemente utiliza uma célula unitária para representar de maneira estatisticamente significativa a estrutura sob análise. A permeabilidade efetiva de um domínio poroso $Y \subseteq \mathbb{R}^2$ na macroescala é definida como

$$\langle u \rangle_i = -\frac{1}{\mu} K_{ij} \langle \nabla p \rangle_j \quad \forall y_i \in Y,$$
(3.1)

onde $\langle u \rangle_i$ é o campo de velocidade efetivo, $\langle \nabla p \rangle_j$ é o gradiente de pressão efetivo, μ é a viscosidade dinâmica do fluido que satura os poros, e K_{ij} é o tensor de permeabilidade absoluta de segunda ordem. Na equação (3.1), conhecida como lei de Darcy, os gradientes

efetivos de velocidade e pressão são dados por

$$\begin{split} \langle u \rangle_i &= \frac{1}{|\overline{\Omega}|} \int_{\Omega} u_i \, d\overline{\Omega} \\ \langle \nabla p \rangle &= \frac{1}{|\overline{\Omega}|} \int_{\Omega} \nabla p \, d\overline{\Omega} \end{split} \qquad \forall y_i \in Y, \end{split} \tag{3.2}$$

onde $\overline{\Omega} \subset \mathbb{R}^2$ descreve uma célula unitária em microescala (uma imagem), que pode conter fases sólidas e porosas. O escoamento do fluido ocorre apenas nos poros, aqui denotados por Ω . Fica trivialmente definido então que $\Omega \subseteq \overline{\Omega}$.

Para calcular os coeficientes do tensor constitutivo de permeabilidade, a Equação (3.1) indica que é necessário conhecer dois campos médios: velocidade e pressão. Ao definir um deles, torna-se possível calcular o outro por meio da realização de simulações no domínio microscópico com o emprego das equações governantes do problema. É importante observar que, no caso bidimensional, o tensor constitutivo possui uma dimensão superior em relação aos campos aos quais está relacionado (o vetor do campo de pressão e o vetor do campo de velocidade). Portanto, duas análises devem ser conduzidas para caracterizar completamente seus coeficientes. Nesse trabalho, um gradiente unitário de pressão é aplicado na direção x primeiramente. Dessa forma, o campo de velocidades induzido na célula unitária é calculado pelas equações governantes. Em seguida, o gradiente unitário de pressão é aplicado ao volume na direção y para que o campo de velocidade do escoamento nessa direção também seja determinado. A aplicação do gradiente unitário de pressão e o vetor de velocidade média calculado em cada análise são utilizados para determinar o tensor K_{ij} .

3.2 Formulação do Problema com Elementos Finitos

A determinação do campo de velocidades a partir de métodos numéricos depende da simulação do escoamento de fluidos em poros conectados na microestrutura interna do material. No caso da avaliação da permeabilidade absoluta, é considerado o escoamento estacionário de fluidos viscosos e incompressíveis em baixa velocidade. Portanto, os efeitos convectivos do escoamento podem ser negligenciados devido ao baixo número de Reynolds, e o escoamento é descrito pelas equações de Stokes

$$\begin{aligned} -\mu \nabla^2 u_i + \nabla p &= b_i \\ \nabla \cdot u_i &= 0 \end{aligned} \quad \forall x_i \in \Omega, \end{aligned} \tag{3.3}$$

onde μ representa a viscosidade dinâmica do fluido, u_i é o vetor do campo de velocidade, p é o campo de pressão e b_i descreve um campo de força de corpo, todos os quais são funções das coordenadas espaciais x_i . Neste trabalho, são consideradas simulações bidimensionais, ou seja, admite-se um domínio contínuo limitado $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. Além disso, condições de contorno de não deslizamento são impostas nas fronteiras do domínio que representam as interfaces fluido-sólido, aqui denotadas como Γ

$$u_i = 0 \quad \forall x_i \in \Gamma. \tag{3.4}$$

Para determinar as variáveis de pressão e velocidade do problema, o Método dos Elementos Finitos (MEF) propõe a aproximação da solução por um conjunto finito de elementos conectados por um número finito de pontos (os nós). As variáveis são calculadas nos nós dos elementos por meio de funções de interpolação, conhecidas como funções de forma. Para o uso das funções de forma no cálculo das variáveis do problema, é necessário transformar a forma diferencial (forma forte) das equações governantes em equações integrais (forma fraca). Usualmente, as formas fracas das equações são obtidas pela aplicação do método dos resíduos ponderados, que permite que a solução exata do problema seja aproximada por uma com resíduos médios nulos quando integrada no domínio de interesse. Ao aplicar o método de resíduos ponderados, obtém-se

$$\int_{\Omega} w_i (-\mu \nabla^2 u_i + \nabla p - b_i) d\Omega = 0, \qquad (3.5)$$

$$\int_{\Omega} z(\nabla \cdot u_i) d\Omega = 0, \qquad (3.6)$$

onde w_i e z representam funções peso não nulas, também chamadas funções teste.

Após a aplicação do método dos resíduos ponderados nas Equações (3.3), obtém-se uma forma fraca das equações. Nessa etapa, o teorema da divergência pode ser empregado para converter a integral de volume que envolve o laplaciano do campo de velocidade em uma integral de superfície, que é calculada nas fronteiras dos elementos finitos. Assim, a ordem da derivada é reduzida e o gradiente de velocidade é externalizado

$$\int_{\Omega} \mu \nabla w_i \nabla u_i d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \cdot w_i p d\Omega - \int_{\Omega} w_i b_i d\Omega = 0.$$
(3.7)

Como citado, os campos contínuos u_i e p são aproximados por valores nodais em um elemento e através das funções de forma, representadas por **N**, e suas derivadas, representadas por **B**. Sendo E o conjunto de elementos que compõem a malha que discretiza

 Ω , essas matrizes estabelecem as seguintes relações

$$\begin{split} u_i &\approx \mathbf{N}^u \mathbf{T}_e^u \mathbf{u} = \mathbf{N}^u \mathbf{u}_e, \\ p &\approx \mathbf{N}^p \mathbf{T}_e^p \mathbf{p} = \mathbf{N}^p \mathbf{p}_e, \quad \forall x_i \in \Omega_e, \forall e \in E, \\ \mathbf{B} &= \mathbf{L} \mathbf{N}, \end{split}$$
(3.8)

onde $\mathbf{T}_{e}^{u} \in \mathbf{T}_{e}^{p}$ são as matrizes que reunem os valores nodais das variáveis discretas $\mathbf{u} \in \mathbf{p}$ em um elemento e. Os valores de \mathbf{u}_{e} representam os valores nodais de \mathbf{u} em um elemento, \mathbf{p}_{e} representam os valores nodais de $p \in \mathbf{L}$ é a matriz dos operadores de derivada. Ω_{e} é o subdomínio associado ao elemento e, que está contido em Ω . Como nenhum elemento está sobreposto a outro, a união de todos os elementos $e \in E$ resulta em Ω . Note que, com o intuito de diferenciar as variáveis nodais calculadas pelo MEF dos campos contínuos representados pelas equações governantes, as equações a seguir são apresentadas na notação vetorial.

As funções peso podem ser interpretadas com analogias ao princípio dos trabalhos virtuais. Na Equação (3.7), b_i é um vetor de forças, então w_i deve ser a velocidade para que o produto entre as variáveis seja equivalente à potência. A Equação (3.6) representa a mudança do volume no elemento, então z deve ser capaz de causar variação do volume, como a pressão hidrostática. Tendo em vista essas interpretações, w_i é aproximada com a mesma função de forma usada na aproximação de u_i , e z é aproximada com a mesma função de forma usada na aproximação de p. A atribuição das funções de forma N às funções peso restringem as formas fracas das equações aos espaços dimensionais dos elementos finitos, como estabelecido pela formulação de Galerkin (DONEA; HUERTA, 2003). Sendo assim

$$\begin{split} w_i &\approx \mathbf{N}^u \mathbf{T}_e^u \mathbf{w} = \mathbf{N}^u \mathbf{w}_e, \\ z &\approx \mathbf{N}^p \mathbf{T}_e^p \mathbf{z} = \mathbf{N}^p \mathbf{z}_e. \end{split} \qquad \qquad \forall x_i \in \Omega_e, \forall e \in E. \end{split} \tag{3.9}$$

Após a discretização do domínio, as formas fracas das equações governantes podem ser representadas em função das matrizes $\mathbf{N} \in \mathbf{B}$. As Equações (3.7) e (3.6) são reescritas como

$$(\mathbf{w})^T \left(\sum_{e \in E} (\mathbf{T}_e^u)^T \int_{\Omega_e} (\mathbf{B}^u)^T \mu \mathbf{B}^u d\Omega_e \mathbf{T}_e^u \right) \mathbf{u} - \left(\sum_{e \in E} (\mathbf{T}_e^u)^T \int_{\Omega_e} (\mathbf{B}^u)^T \mathbf{N}^p d\Omega_e \mathbf{T}_e^p \right) \mathbf{p} - \left(\sum_{e \in E} (\mathbf{T}_e^u)^T \int_{\Omega_e} (\mathbf{N}^u)^T \mathbf{b} d\Omega_e \right) = 0$$

$$(\mathbf{z})^T \left(\sum_{e \in E} (\mathbf{T}_e^p)^T \int_{\Omega_e} (\mathbf{N}^p)^T \mathbf{B}^u d\Omega_e \mathbf{T}_e^u \right) \mathbf{u} = 0.$$

$$(3.10)$$

Como os valores das variáveis nodais relacionadas às funções pes
o \mathbf{w}_e e \mathbf{z}_e são arbitrários,

as Equações (3.10) podem ser reescritas como

$$\begin{pmatrix} \sum_{e \in E} (\mathbf{T}_{e}^{u})^{T} \int_{\Omega_{e}} (\mathbf{B}^{u})^{T} \mu \mathbf{B}^{u} d\Omega_{e} \mathbf{T}_{e}^{u} \end{pmatrix} \mathbf{u} - \begin{pmatrix} \sum_{e \in E} (\mathbf{T}_{e}^{u})^{T} \int_{\Omega_{e}} (\mathbf{B}^{u})^{T} \mathbf{N}^{p} d\Omega_{e} \mathbf{T}_{e}^{p} \end{pmatrix} \mathbf{p} = \begin{pmatrix} \sum_{e \in E} (\mathbf{T}_{e}^{u})^{T} \int_{\Omega_{e}} (\mathbf{N}^{u})^{T} \mathbf{b} d\Omega_{e} \end{pmatrix}, \\ \begin{pmatrix} \sum_{e \in E} (\mathbf{T}_{e}^{p})^{T} \int_{\Omega_{e}} (\mathbf{N}^{p})^{T} \mathbf{B}^{u} d\Omega_{e} \mathbf{T}_{e}^{u} \end{pmatrix} \mathbf{u} = 0. \end{cases}$$
(3.11)

O termo no lado direito da primeira equação em (3.11) é resultado do efeito das forças de corpo em cada elemento e será chamado de **f**. A solução do escoamento de Stokes pelo MEF é simplificada pela resolução do sistema de equações algébricas lineares

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{G} \\ \mathbf{D} & \mathbf{0} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \qquad (3.12)$$

onde **K** é a matriz de viscosidade, **G** é a matriz do gradiente e **D** é a matriz do divergente da velocidade (equivalente à matriz **G** transposta). Essas matrizes são obtidas por meio do somatório dos termos de cada elemento:

$$\mathbf{K}_{e} = \int_{\Omega_{e}} (\mathbf{B}^{u})^{T} \mu \mathbf{B}^{u} d\Omega_{e}, \qquad (3.13)$$

$$\mathbf{G}_{e} = \int_{\Omega_{e}} (\mathbf{B}^{u})^{T} \mathbf{N}^{p} d\Omega_{e}, \qquad (3.14)$$

$$\mathbf{D}_{e} = \int_{\Omega_{e}} (\mathbf{N}^{p})^{T} \mathbf{B}^{u} d\Omega_{e}. \tag{3.15}$$

O somatório Este trabalho trata o campo de velocidade e pressão como variáveis desconhecidas do problema. Entretanto, o acoplamento das variáveis de velocidade e pressão traz algumas dificuldades à solução do sistema de equações algébricas. De acordo com Reddy (REDDY, 2005), uma forma de interpretar o acoplamento entre velocidade e pressão é entender a equação da continuidade como uma restrição de incompressibilidade às equações de conservação de momento. Devido ao fato que a restrição de incompressibilidade não depende das variáveis de pressão, a construção de um modelo de elementos finitos requer tratamento cuidadoso para evitar instabilidades na solução. Além disso, devido à matriz de coeficientes do sistema ter um bloco com coeficientes nulos, a matriz de coeficientes pode se tornar singular. Em vista das questões apresentadas, a escolha do modelo do elemento e as funções de aproximação das variáveis desconhecidas deve ser feita cuidadosamente.

As funções de aproximação escolhidas para esse trabalho foram a aproximação Q1-Q1 (aproximação bilinear tanto para a velocidade quanto para a pressão) com técnicas de

estabilização, Q2-Q1 (que envolve aproximação biquadrática para a velocidade e aproximação bilinear para a pressão) e a aproximação Q2-P1 (com aproximação biquadrática para a velocidade e aproximação bilinear para a pressão, sem garantia de continuidade).

3.2.1 Aproximação Q1-Q1 com Estabilização para a Pressão

Uma das abordagens mais simples para aproximar as variáveis envolve o emprego de funções de forma bilineares para os domínios de velocidade e pressão. Este tipo de aproximação, conhecida como aproximação Q1-Q1, não só oferece facilidade de implementação, mas, dada a sua estrutura de elementos de quatro nós, também traz custos computacionais reduzidos. Para construir um modelo computacional estável utilizando a aproximação Q1-Q1, este trabalho segue a estratégia de estabilização apresentada em (HUGHES; FRANCA, 1987), que introduz um termo de estabilização na equação da continuidade

$$\mathbf{P}_{e} = \int_{\Omega_{e}} \tau(\mathbf{N}^{p})^{T} \mathbf{N}^{p} d\Omega.$$
(3.16)

Aqui, τ representa o parâmetro de estabilização da pressão, que é definido como $\tau = h^2/12$ para elementos quadriláteros e h é o tamanho da maior diagonal do elemento finito.

Nesta aproximação, os elementos finitos são referidos como quadriláteros bilineares, assemelhando-se ao elemento ilustrado na Figura 1(a).



Figura 1: (a) Elemento quadrilátero bilinear; (b) funções de forma bilineares.

As variáveis de velocidade e pressão são determinadas nos quatro nós situados nos vértices do quadrilátero, utilizando as mesmas funções de aproximação bilineares. Essas funções de aproximação são representadas na Figura 1(b) em função do sistema de coordenadas naturais ($\eta \in \xi$), onde $-1 \le \eta \le 1$ e $-1 \le \xi \le 1$.

A partir da adição do termo de estabilização, o sistema de equações resolvido nesse

caso é

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^T & \mathbf{P} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \qquad (3.17)$$

3.2.2 Aproximação Q2-Q1

A aproximação Q2-Q1 usa funções de forma biquadráticas para velocidade e funções de forma bilineares contínuas para pressão. Como a aproximação Q2-Q1 usa funções de aproximação de ordem superior para calcular a velocidade, o elemento finito correspondente consiste em 9 nós, conforme ilustrado na Figura 2(a).



Figura 2: (a) Elemento quadrilateral biquadrático; (b) funções de forma biquadráticas.

No elemento de aproximação Q2-Q1, as velocidades são determinadas em todos os nós usando as funções de aproximação mostradas na Figura 2(b), enquanto a pressão é calculada nos quatro nós do vértice usando as funções de forma bilineares ilustradas na Figura 1(b).

Como observado na matriz de coeficientes da Equação (3.12), a diagonal principal da matriz apresenta um bloco de zeros devido à ausência da pressão na equação da continuidade. Além de preencher inerentemente a condição inf-sup para estabilidade, a aproximação Q2-Q1 não torna a matriz de coeficientes deficiente de posto (não afeta a dimensão do espaço gerado). Consequentemente, é uma aproximação estável que não requer a introdução de uma matriz de estabilização para substituir o bloco preenchido com zero na matriz de coeficientes.

3.2.3 Aproximação Q2-P1

A aproximação Q2-P1, que também cumpre a condição inf-sup para estabilidade, usa funções de forma biquadráticas para velocidade e funções de forma bilineares descontínuas para pressão. Nesta abordagem, as velocidades são calculadas em todos os nove nós usando as mesmas funções de aproximação usadas pelo elemento Q2-Q1, mostradas na Figura 2(b). No entanto, a aproximação da pressão é realizada usando três graus de liberdade por elemento. Para este elemento específico, as funções de forma escolhidas atribuem papéis distintos aos três graus de liberdade de pressão. O primeiro grau de liberdade, denotado como P_1 , representa o valor da pressão no centro do elemento. O segundo grau de liberdade, P_2 , corresponde à derivada da pressão na direção ξ , e o terceiro grau de liberdade, P_3 , representa a derivada da pressão na direção η . Consequentemente, a variação da pressão dentro de cada elemento pode ser expressa como $p = P_1 + P_2 \xi + P_3 \eta$, onde $P_1 = 1$, $P_2 = \frac{\partial p}{\partial \xi}$ e $P_3 = \frac{\partial p}{\partial \eta}$ são as funções de forma associadas à variável de pressão (ELMAN; SILVESTER; WATHEN, 2014).

3.3 Implementação de Condições de Contorno Periódicas

Os valores de permeabilidade são obtidos através da média das velocidades microscópicas em um volume específico do meio poroso, que adequadamente reflete a homogeneidade do sistema. Para caracterizar um meio poroso, é essencial definir um volume que capture de forma significativa a distribuição de vazios e sólidos, garantindo que a propriedade calculada represente fielmente a propriedade efetiva do meio. Este volume característico é denominado Volume Elementar Representativo (VER) (BACHMAT; BEAR, 1987).

Ao considerar um VER do meio poroso, supõe-se que o volume de interesse é homogêneo e se repete em todas as direções. Por esse motivo, são aplicadas condições de contorno periódicas no cálculo das variáveis do sistema. Dessa forma, a determinação da permeabilidade é realizada a partir de uma célula, considerando que os meios porosos são homogêneos e periódicos. A implementação computacional das condições de contorno periódicas é feita através da aplicação da mesma numeração dos graus de liberdade encontrados em bordas opostas, conforme proposto pelo trabalho de Andreassen e Andreasen (ANDREASSEN; ANDREASEN, 2014).

Após a escolha do modelo de elemento para aproximar as variáveis desconhecidas e a determinação das condições de contorno, as formulações de MEF dos problemas físicos levam a um sistema de equações lineares, como apresentado em (3.12). Os coeficientes e o termo do lado direito do sistema de equações são determinados integrando a forma fraca das equações diferenciais, mostradas nas Equações 3.11, sobre cada elemento. O sistema de equações resultante é geralmente um sistema linear grande, esparso e simétrico, conhecido como um problema de ponto de sela (STRANG, 2006a). Resolver o problema de ponto de sela traz preocupações quanto à estabilidade e possíveis problemas de convergência ao empregar métodos numéricos para aproximar a solução em domínios discretos, devido à sua indefinição e mal condicionamento.

4 Estratégia para Solução do Problema de Stokes em Dois Níveis

4.1 O Complemento de Schur para o Problema de Stokes

O complemento de Schur permite que matrizes com estrutura em blocos sejam triangularizadas, assim como feito em um processo de eliminação Gaussiana. A ideia é condensar blocos de forma que uma das linhas da matriz original possa ser vista como um subsistema desacoplado por si só. Considerando o sistema algébrico em blocos do problema de Stokes (3.12), a triangularização superior da matriz global ocorre da seguinte forma

$$\begin{cases} \mathbf{K}\mathbf{u} + \mathbf{G}\mathbf{p} = \mathbf{f} \ \Rightarrow \ \mathbf{u} = \mathbf{K}^{-1} \left(\mathbf{f} - \mathbf{G}\mathbf{p}\right) \\ \mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{u} + \mathbf{P}\mathbf{p} = \mathbf{0} \end{cases}$$

Portanto, substituindo na segunda linha a variável \mathbf{u} isolada da primeira linha, o sistema pode ser reescrito como

$$\left(\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{G}-\mathbf{P}\right)\mathbf{p}=\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{f}$$

O sistema pode ser representado por meio da multiplicação de um operador à esquerda, como em

$$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1} & -\mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^{\mathrm{T}} & \mathbf{P} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1} & -\mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

o que então resulta em

$$\begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{G} \\ \mathbf{0} & (\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{G} - \mathbf{P}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{f} \end{bmatrix}.$$
 (4.1)

Como implícito, esse desenvolvimento depende da matriz **K** ser inversível. **I** é usado para representar matrizes identidade. O termo $(\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{G} - \mathbf{P})$ é comumente representado por uma matriz **S**. Observe que, se $\mathbf{P} = \mathbf{0}$, ou seja, caso nenhuma estabilização seja necessária, essa estratégia também pode ser utilizada.

Ao invés de explorar precondicionadores baseados no complemento de Schur para mé-
todos iterativos a fim de resolver o sistema global na Equação (3.12), o objetivo deste trabalho é resolver sistemas como o mostrado na Equação (4.1). A ideia, nesse caso, é resolver o subsistema para a pressão nodal (última linha da Equação (4.1)) e depois resolver para a velocidade nodal (primeira linha), empregando um método de solução iterativo em ambas as etapas. É importante perceber que calcular e armazenar explicitamente $\mathbf{S} \equiv \mathbf{G}^{\mathrm{T}} \mathbf{K}^{-1} \mathbf{G} - \mathbf{P}$ envolveria a inversão de \mathbf{K} ou a solução de um sistema com múltiplos lados direitos para obter $\mathbf{K}^{-1}\mathbf{G}$, ambos computacionalmente desafiantes. Por outro lado, podemos incorporar a expressão de \mathbf{S} nos produtos matriz-vetor realizados pelo método iterativo adotado. Esse raciocínio será discutido mais adiante, na Seção 4.2.

Embora o sistema apresentado na Equação (4.1) seja solucionável com a abordagem considerada, ele requer que primeiro as pressões nodais sejam encontradas para depois calcular a velocidade. No escopo da análise da permeabilidade absoluta, o principal interesse é recuperar o campo de velocidade. Nesse sentido, pode ser desejável considerar uma abordagem alternativa que permita calcular a velocidade primeiro e, em seguida, a pressão, se necessário. Para isso, quando uma matriz de estabilização está presente, é possível uma triangularização inferior da matriz global, como em

$$\begin{cases} \mathbf{K}\mathbf{u} + \mathbf{G}\mathbf{p} = \mathbf{f} \\ \mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{u} + \mathbf{P}\mathbf{p} = \mathbf{0} \ \Rightarrow \ \mathbf{p} = \mathbf{P}^{-1}\left(-\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}\right) \end{cases}$$

Portanto,

$$\left(\mathbf{K} - \mathbf{G}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{G}^T\right)\mathbf{u} = \mathbf{f}$$

O sistema é equivalente a

$$\begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{G}\mathbf{P}^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{K} & \mathbf{G} \\ \mathbf{G}^{\mathrm{T}} & \mathbf{P} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{I} & -\mathbf{G}\mathbf{P}^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}$$

que então resulta em

$$\begin{bmatrix} (\mathbf{K} - \mathbf{G}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}) & \mathbf{0} \\ \mathbf{G}^{\mathrm{T}} & \mathbf{P} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{p} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{f} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix}, \qquad (4.2)$$

que agora depende de \mathbf{P} ser inversível. Um fator interessante dessa abordagem é que o vetor do lado direito permanece inalterado. A solução em duas etapas para velocidade e pressão agora se assemelha a um processo de substituição direta. Mais uma vez, é enfatizado que $\mathbf{GP}^{-1}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}$ não é calculado ou armazenado explicitamente. Em vez disso, essa expressão é calculada sob demanda como uma única solução de sistema em cada iteração do nível externo da solução em dois níveis.

4.2 O GC em Dois Níveis

A partir das Equações (4.1) e (4.2), fica evidente que, independentemente da estratégia de triangularização, dois sistemas devem ser resolvidos para o cálculo do par de velocidade e pressão nodal. Esses sistemas estão resumidos na Tabela 1. Nessa tabela, observe que apenas os sistemas na primeira linha lidam com um termo do complemento de Schur, enquanto os da segunda linha são problemas bastante diretos que podem ser resolvidos com o método dos Gradientes Conjugados (GC) convencional. Diante disso, essa seção procura descrever um método de solução adaptado para os sistemas na primeira linha.

	Triangularização inferior	Triangularização superior
1 ^a etapa	$ \begin{pmatrix} \mathbf{K} - \mathbf{G}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{G}^{\mathrm{T}} \end{pmatrix} \mathbf{u} = \mathbf{f} $ resolver para \mathbf{u}	$(\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{G} - \mathbf{P})\mathbf{p} = \mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{f}$ resolver para \mathbf{p}
2 ^a etapa	$\mathbf{P}\mathbf{p} = -\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}$ resolver para \mathbf{p}	$\mathbf{K}\mathbf{u} = \mathbf{f} - \mathbf{G}\mathbf{p}$ resolver para u

Tabela 1: Subsistemas a serem resolvidos para a velocidade e pressão nodais, de acordo com a abordagem de triangularização pelo complemento de Schur adotada.

Primeiramente, considera-se apenas a abordagem de triangularização inferior, ou seja, admite-se a presença de uma matriz de estabilização inversível. O sistema para o qual será implementado um método de solução é escrito como

$$\left(\mathbf{K} - \mathbf{G}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{u} = \mathbf{f}.$$
(4.3)

A ideia é empregar um método de solução do subespaço de Krylov para matrizes simétricas, portanto, GC e MINRES seriam opções interessantes. De forma não restritiva, este trabalho adota o GC. Uma descrição convencional do GC pode ser conferida, por exemplo, em (SHEWCHUK, 1994). Naturalmente, uma maneira simples de implementar o GC é ilustrada no Algoritmo 1, em que a matriz $\mathbf{A} \equiv (\mathbf{K} - \mathbf{GP}^{-1}\mathbf{G}^{\mathrm{T}})$ seria calculada e em seguida o sistema $\mathbf{Au} = \mathbf{f}$ seria resolvido. Algoritmo 1 Método GC para a Equação (4.3) Entrada: K, G, P, f, u₀, critérios de parada Saída: u 1: $\mathbf{u} \leftarrow \mathbf{u}_0$ 2: $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{f} - (\mathbf{K} - \mathbf{G}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{G}^{\mathrm{T}})\mathbf{u}$ \triangleright vetor resíduo 3: $\mathbf{d} \leftarrow \mathbf{0}$ ⊳ vetor de direção de busca 4: $\delta_0 \leftarrow \mathbf{r}^{\mathrm{T}} \mathbf{r}$ 5: $\beta \leftarrow 0$ 6: enquanto critérios de parada não forem atendidos faça \triangleright $k \in [1, 2, \ldots, k_{\max}]$ $\mathbf{d} \leftarrow \mathbf{r} + \beta \mathbf{d}$ 7: $\mathbf{q} \leftarrow (\mathbf{K} - \mathbf{G} \mathbf{P}^{-1} \mathbf{G}^{\mathrm{T}}) \, \mathbf{d}$ > vetor para armazenar o prod. matriz-vetor 8: $\alpha \leftarrow \delta_{k-1}/\mathbf{q}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}$ 9: $\mathbf{u} \leftarrow \mathbf{u} + \alpha \mathbf{d}$ 10: $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{r} - \alpha \mathbf{q}$ 11: $\delta_k \leftarrow \mathbf{r}^{\mathrm{T}} \mathbf{r}$ 12: $\beta \leftarrow \delta_k / \delta_{k-1}$ 13:14: fim enquanto

No entanto, isso pode ser computacionalmente desfavorável para grandes simulações, tanto em termos de tempo quanto de requisitos de memória. É importante, então, observar que essa matriz **A** não precisa estar explicitamente disponível para o processo iterativo funcionar. É necessário apenas uma função que compute produtos matriz-vetor, para lidar com as linhas 2 e 8. Nesse sentido, esses produtos matriz-vetor são calculdos distributivamente, separando **K** de $\mathbf{GP}^{-1}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}$, e tratando a inversa como uma solução de sistema. A linha 8, por exemplo, pode ser reformulada da seguinte forma

$$\mathbf{q} \leftarrow \left(\mathbf{K} - \mathbf{G}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\right)\mathbf{d} = \mathbf{K}\mathbf{d} - \mathbf{G}\underbrace{\mathbf{P}^{-1}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}}_{\mathbf{y}} = \mathbf{K}\mathbf{d} - \mathbf{G}\mathbf{y}$$

onde, como discutido em (STRANG, 2006b), o vetor y pode ser obtido resolvendo

$$\mathbf{P}\mathbf{y} = \mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}.\tag{4.4}$$

Observe que esse tipo de procedimento também aparece em técnicas de decomposição de domínio baseadas em complemento de Schur, como visto em (TUNGKAHOTARA, 2008).

A partir dessas considerações, é possível definir uma versão adaptada do GC conven-

cional que utiliza o termo do complemento de Schur no sistema de equações para resolver a velocidade nodal. O Algoritmo 2 descreve o nível externo do método em dois níveis, com o nível interno sendo caracterizado pelas chamadas ao método GC convencional para a expressão na Equação (4.4) em cada iteração.

Algoritmo 2 Método GC em dois níveis para a Equação (4.3) Entrada: K, G, P, f, u0, critério de parada Saída: u 1: $\mathbf{u} \leftarrow \mathbf{u}\mathbf{0}$ 2: Resolver $\mathbf{P}\mathbf{y} = \mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}$ para \mathbf{y} ⊳ método GC convencional 3: $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{f} - \mathbf{K}\mathbf{u} + \mathbf{G}\mathbf{y}$ 4: $\mathbf{d} \leftarrow \mathbf{0}$ 5: $\delta_0 \leftarrow \mathbf{r}^{\mathrm{T}} \mathbf{r}$ 6: $\beta \leftarrow 0$ 7: enquanto critério de parada não for atingido faça $\triangleright k \in [1, 2, \dots, k_{\max}]$ $\mathbf{d} \leftarrow \mathbf{r} + \beta \mathbf{d}$ 8: Resolver $\mathbf{P}\mathbf{y} = \mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}$ para \mathbf{v} ⊳ método GC convencional 9: $\mathbf{q} \leftarrow \mathbf{K}\mathbf{d} - \mathbf{G}\mathbf{y}$ 10: $\alpha \leftarrow \delta k - 1/\mathbf{q}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}$ 11: $\mathbf{u} \leftarrow \mathbf{u} + \alpha \mathbf{d}$ 12: $\mathbf{r} \leftarrow \mathbf{r} - \alpha \mathbf{q}$ 13: $\delta_k \leftarrow \mathbf{r}^{\mathrm{T}} \mathbf{r}$ 14: $\beta \leftarrow \delta_k / \delta_{k-1}$ 15:16: fim enquanto

No Algoritmo 2, é importante notar que os vetores \mathbf{u} , \mathbf{r} , \mathbf{d} e \mathbf{q} têm todos o tamanho do vetor de velocidade, enquanto \mathbf{y} e o resultado de $\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}$ (ou $\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{u}$) têm o tamanho do vetor de pressão. Além das matrizes esparsas \mathbf{K} , $\mathbf{G} \in \mathbf{P}$, esses são os vetores que devem ser armazenados na memória para o nível externo. Observe que \mathbf{u}_0 pode ser inicializado diretamente no espaço de memória para \mathbf{u} , e, da mesma forma, \mathbf{f} em \mathbf{r} . Além disso, o método para a solução do nível interno, chamado nas linhas 2 e 9, requer a alocação de apenas dois vetores adicionais do tamanho do vetor da pressão, pois ele pode usar \mathbf{y} e $\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}$, como seus próprios " \mathbf{u}_0 " e " \mathbf{f} ". Por fim, outro aspecto positivo interessante dessa estratégia de solução é que ela permite uma implementação sem a necessidade do uso de matrizes. Os produtos matriz-vetor com \mathbf{K} , $\mathbf{G} \in \mathbf{G}^{\mathrm{T}}$ podem ser realizados elemento a elemento ou nó a nó, e o próprio GC utilizado para o nível interno também pode ser implementado sem o uso de matrizes (LOPES; PEREIRA et al., 2022).

Quanto aos critérios de parada, além de um número máximo de iterações (por segurança), é considerada uma medida normalizada do resíduo, tanto para o nível externo quanto para o interno. Supondo que todos os sistemas nesse escopo possam ser genericamente representados por $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$, o processo iterativo encerra quando

$$\frac{\mathbf{r}^{\mathrm{T}}\mathbf{r}}{\mathbf{b}^{\mathrm{T}}\mathbf{b}} \le \epsilon^{2},\tag{4.5}$$

onde $\mathbf{r} \equiv \mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}$ é o vetor resíduo, \mathbf{b} é o vetor do lado direito, e ϵ é uma tolerância numérica. Observe que $\mathbf{r}^{\mathrm{T}}\mathbf{r}$ corresponde à norma L2 ao quadrado de \mathbf{r} .

Em relação a outras escolhas possíveis ao longo desta derivação, o MINRES poderia ter sido escolhido, tanto no nível interno quanto no externo. No nível interno, uma implementação convencional teria sido necessária, enquanto, no nível externo, uma acomodação semelhante do produto matriz-vetor teria sido exigida.

Além disso, é possível optar pela abordagem mais usual de triangularização superior, onde sistemas não estabilizados (P = 0) podem ser admitidos, tornando assim o sistema do nível externo

$$\left(\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{G}-\mathbf{P}\right)\mathbf{p}=\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{f},\tag{4.6}$$

onde o lado direito exigiria uma solução adicional do sistema antes do processo iterativo. O sistema do nível interno seria então

$$\mathbf{K}\mathbf{y} = \mathbf{G}\mathbf{d},\tag{4.7}$$

onde \mathbf{d} seria do tamanho do vetor da pressão, e \mathbf{y} seria do tamanho do vetor da velocidade.

As possíveis configurações dos níveis externo e interno da abordagem em dois níveis considerada são resumidas na Tabela 2.

	Triangularização inferior	Triangularização superior
externo	$ (\mathbf{K} - \mathbf{G}\mathbf{P}^{-1}\mathbf{G}^{\mathrm{T}}) \mathbf{u} = \mathbf{f} $ resolver para \mathbf{u}	$(\mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{G} - \mathbf{P}) \mathbf{p} = \mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{K}^{-1}\mathbf{f}$ resolver para \mathbf{p}
interno	$\mathbf{P}\mathbf{y} = \mathbf{G}^{\mathrm{T}}\mathbf{d}$	$\mathbf{K}\mathbf{y} = \mathbf{G}\mathbf{d}$
	resolver para \mathbf{y} do tamanho	resolver para \mathbf{y} do tamanho
	da pressão a cada iteração	da velocidade a cada iteração

Tabela 2: Sistemas a serem resolvidos nos níveis externo e interno do método de solução em dois níveis baseado nos subespaços de Krylov, de acordo com a abordagem de triangularização baseada no complemento de Schur.

5 Resultados

5.1 GC em Dois Níveis a Partir da Triangularização Inferior do Sistema

Primeiramente, são apresentados os resultados referentes à abordagem da triangularização inferior do problema de ponto de sela. Essa abordagem é aplicável somente à aproximação Q1-Q1 com estabilização para a pressão, uma vez que envolve a inversão do bloco \mathbf{P} do sistema, e as outras aproximações não possuem termo de estabilização da pressão ($\mathbf{P=0}$).

5.1.1 Testes de Validação

Para validar o método iterativo em dois níveis, obtido a partir da triangularização inferior do sistema, foi realizada a análise do modelo de referência ilustrado na Figura 3. Este exemplo específico foi escolhido devido à existência de uma solução semi-analítica para sua permeabilidade, conforme descrito por Drummond e Tahir (DRUMMOND; TAHIR, 1984), e também porque já foi objeto de estudo por outros métodos de solução, como apresentado em (VIANNA et al., 2020; LOPES; VIANNA et al., 2023). O objetivo dessa análise é assegurar que os valores de permeabilidade calculados coincidam com os valores previamente conhecidos e também observar os padrões de convergência em cada simulação.



Figura 3: Célula periódica bidimensional que ilustra a seção transversal de uma matriz de cilindros paralelos. Fase sólida em cinza e fase porosa (vazia) em azul.

A permeabilidade efetiva isotrópica κ_{DT} na macro escala é dada pela seguinte equação (5.1):

$$\kappa_{DT} = \frac{r^2}{8\phi_s} \left(-\ln\left(\phi_s\right) - 1,476336 + 2\phi_s - 1,744283\phi_s^2 + 4,077704\phi_s^3 - 4,842274\phi_s^4 \right),$$
(5.1)

onde r é o raio das regiões sólidas circulares e ϕ_s é a fração de volume sólido do domínio. Conforme declarado em (DRUMMOND; TAHIR, 1984), essa expressão é válida para modelos com alta porosidade. Portanto, o VER do meio foi modelado com dimensões quadradas de 1mm e cilindros com raio de 0,125mm, resultando em uma porosidade de 90,18% e, assim, uma permeabilidade de $\kappa_{DT} = 2,0444 \times 10^4$ D.

Para representar esse domínio nas simulações, foi utilizada uma série de imagens bidimensionais com resoluções variadas, desde 64×64 pixels até 1024×1024 pixels, considerando cada potência de 2 entre eles, ou seja, o tamanho do pixel variou de 15,625µm a 0,976µm. É importante ressaltar que, a cada refinamento na resolução, as interfaces sólido-fluido idealmente suaves são melhor resolvidas geometricamente na imagem rasterizada. O critério de parada para as simulações foi baseado na norma L2 dos resíduos e um número máximo de iterações.

Inicialmente, o método GC em dois níveis proposto foi submetido a uma tolerância numérica de 10^{-8} , de acordo com a Equação (4.5). Essa baixa tolerância foi adotada como um critério rigoroso de parada nesta primeira etapa de validação. Tanto os níveis interno quanto externo admitiram a mesma tolerância. No entanto, é interessante observar que outros valores de tolerância (de até 10^{-3}) também foram testados e forneceram resultados satisfatórios. O ponto de partida para todos os processos iterativos foi definido como um vetor nulo. Os valores de permeabilidade obtidos nas simulações e os respectivos erros em comparação com a solução semi-analítica são exibidos na Figura 4.



Figura 4: Convergência da análise numérica de permeabilidade para o modelo ilustrado na Figura 3, usando o GC em dois níveis com tolerância de 10^{-8} . O gráfico à esquerda apresenta os resultados para a permeabilidade, enquanto o da direita mostra o erro numérico em uma escala logarítmica. Aqui, κ representa a permeabilidade obtida pelas simulações, enquanto $\kappa_{DT} = 2,0444 \times 10^4$ D corresponde ao valor esperado da Equação (5.1).

A partir da Figura 4, fica claro que os resultados numéricos para a permeabilidade efetiva convergiram para o valor semi-analítico conhecido conforme a resolução da imagem melhorava, como esperado. A malha mais refinada, com 1024×1024 pixels, resultou em permeabilidade isotrópica de 2,0370 × 10⁴ D. Em relação à estabilidade, os gráficos dos resíduos normalizados são mostrados na Figura 5, considerando o sistema do nível externo para a velocidade nodal. Para comparação, as curvas dos resíduos do GC em dois níveis são plotadas com as curvas dos resíduos de métodos convencionais do subespaço de Krylov, ou seja, GC e MINRES, aplicados ao sistema completo. Além disso, o GC com pré-condicionamento de Jacobi (PGC) também é considerado. A ideia aqui é ilustrar o quanto o GC em dois níveis estudado é mais estável em contraste com abordagens convencionais para esse tipo de problema.



Figura 5: Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para a amostra mostrada na Figura 3 com diferentes métodos de solução e tamanhos de malha.

Na Figura 5, é evidente que o GC em dois níveis atinge a tolerância numérica de 10⁻⁸ antes dos outros métodos, que requerem significativamente mais iterações para convergir. Para todas as imagens estudadas, as curvas de resíduos observadas no GC convencional exibiram um padrão oscilatório com tendência descendente, consistentemente mantendose acima do resíduo do GC em dois níveis. O MINRES, por outro lado, não oscilou, embora tenha mostrado uma tendência descendente semelhante à observada no GC. A Tabela 3 apresenta o número médio de iterações necessárias para a convergência do GC do nível interno, em comparação com o nível externo.

	Número de Iterações do GC			
Malha	Interno	Externo		
64×64	$71,8\pm0,8$	98		
128×128	$138,6\pm2.2$	196		
$256{\times}256$	$266,8\pm 4,6$	395		
512×512	$513,9\pm11,7$	795		
1024×1024	$986, 3\pm28, 0$	1603		

Tabela 3: Número de iterações para os níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis aplicado ao modelo de referência.

Ao examinar o comportamento de convergência dos resíduos, torna-se evidente que, considerando tanto os níveis interno quanto externo do GC em dois níveis, o número total de iterações para a convergência é semelhante ao dos métodos GC ou MINRES aplicados ao sistema global, e eventualmente até maior. No entanto, deve-se ter em mente que todas as iterações em qualquer nível tratam de subsistemas menores, portanto, menos operações de ponto flutuante são realizadas em cada operação de vetor ou matriz, em comparação com operações que lidam com o sistema original completo. Além disso, um aspecto importante a ser observado é que o número de iterações nesses padrões de convergência estáveis vistos na Figura 5 parece crescer linearmente em relação ao refinamento da imagem, aproximadamente dobrando a quantidade de iterações a cada aumento de 2^2 no número de elementos (e graus de liberdade).

Para melhor representar a variabilidade do número médio de iterações internas, apresentadas na Tabela 3, a Figura 6 é fornecida. Nessa figura, são apresentados gráficos da evolução das iterações internas em relação às iterações externas para todas as malhas consideradas no modelo de referência. Ambos os eixos dizem respeito a dados normalizados, de modo a destacar o comportamento semelhante das curvas. É possível observar uma tendência descendente, inicialmente, e depois estabiliza em uma reta horizontal. Isso significa que, a partir dessas observações, a quantidade de iterações necessárias pelo nível interno diminui nos primeiros passos do nível externo e, em seguida, oscila em torno de um cenário semelhante a um platô, ligeiramente abaixo da média geral das iterações internas. Foi particularmente importante verificar que essas curvas não mostravam uma tendência ascendente.



Figura 6: Evolução da quantidade de iterações do GC no nível interno, em relação à convergência do nível externo. As contagens de iterações do nível interno são normalizadas pela média respectiva (Tabela 3), enquanto as contagens de iterações do nível externo são normalizadas para um intervalo [0,1]. Simulações com o modelo mostrado na Figura 3.

Para investigar se o GC em dois níveis poderia alcançar o mesmo resultado com menos iterações internas, outro experimento foi conduzido. A malha 1024×1024 foi novamente simulada com uma tolerância de 10^{-6} para ambos os níveis interno e externo. Em seguida, foi simulada com uma tolerância de 10^{-6} para o nível externo e 10^{-5} para o nível interno. Finalmente, foi simulada com uma tolerância de 10^{-6} para o nível externo e 10^{-4} para o nível interno. As curvas resultantes são plotadas na Figura 7.



Figura 7: Convergência do resíduo normalizado observado com o GC em dois níveis considerando uma tolerância numérica variável para o nível interno. A tolerância numérica para o nível externo foi definida como $\epsilon_{\text{externo}} = 10^{-6}$. Análise da amostra sintética ilustrada na Figura 3, com a imagem de 1024×1024 pixels.

A Figura 7 indica que relaxar a tolerância do GC do nível interno pode introduzir um erro significativo nas iterações do nível externo, resultando em um número maior de iterações no geral. Essa observação destaca a relevância de usar ordens de tolerância semelhantes para ambos os níveis do método para alcançar um perfil de convergência mais estável.

5.1.2 Aplicação: Permeabilidade Absoluta de Amostras de Varreduras de μCT

Após o primeiro experimento de validação, o GC em dois níveis foi empregado para determinar a permeabilidade absoluta de amostras bidimensionais de materiais reais imageados por µCT. As análises computacionais dessas amostras, um material fibroso e uma rocha de arenito, podem ser de interesse para várias aplicações industriais.

Essas análises têm como objetivo demonstrar que o GC em dois níveis pode ser aplicado com sucesso a estudos com geometrias mais complexas. No entanto, deve-se observar que os valores de permeabilidade calculados em duas dimensões para o arenito podem não ser totalmente representativos de uma amostra tridimensional devido às características geométricas espaciais de seus poros.

5.1.2.1 Material Compósito Reforçado com Fibras

Neste experimento, foi estudado um material poroso composto por uma matriz de fibras quase unidirecionais dispostas de maneira aproximadamente periódica. As varreduras originais de µCT foram obtidas a partir do trabalho de Mehdikhani et al. (MEHDIKHANI et al., 2021), onde, na realidade, as fibras estão embutidas em uma matriz de epóxi. Aqui, admite-se que o espaço entre as fibras é vazio, ou seja, é o espaço poroso, onde o fluido escoa. A segmentação binária das varreduras que gerou as malhas estudadas aqui foi realizada por Ferreira et al. (FERREIRA et al., 2023). A Figura 8 exibe uma subregião da imagem segmentada tridimensional, à esquerda, e a imagem bidimensional considerada para as simulações realizadas neste trabalho, à direita. Observe que se trata de uma seção transversal da imagem tridimensional.



Figura 8: Microtomografia computadorizada segmentada de um material compósito reforçado com fibras (MEHDIKHANI et al., 2021), e uma de suas fatias (FERREIRA et al., 2023).

Para essa amostra foram realizadas análises nas direções x e y. É esperada permeabilidade quase isotrópica nessas direções, de acordo com os resultados obtidos por (SEUFFERT et al., 2021) para amostras qualitativamente semelhantes. A célula unitária periódica considerada tem dimensões aproximadas de 0,4 mm×0,4 mm, com um tamanho de pixel de 1,1 µm. Para recuperar com precisão os campos de velocidade, refinamentos incrementais de malha foram aplicados à imagem de 364×364 pixels, até 1456×1456 pixels. Uma tolerância numérica de 10^{-4} foi adotada para ambos os níveis do GC em dois



níveis. A Figura 9 apresenta a convergência dos valores de permeabilidade em relação ao refinamento da malha.

Figura 9: Convergência da permeabilidade obtida para o compósito reforçado com fibras mostrado na Figura 8.

Conforme pode ser observado na Figura 9, foi obtida convergência para os coeficientes de permeabilidade, conforme o refinamento da malha aumenta. Considerando os resultados para a malha mais refinada, foi encontrado $K_{xx} = 0,1178$ D e $K_{yy} = 0,1020$ D para a imagem bidimensional, confirmando sua natureza quase isotrópica esperada no plano xy. Para fins de referência e validação, essas análises de permeabilidade também foram realizadas empregando um método direto para o sistema global de ponto de sela, alcançando resultados qualitativamente compatíveis, dentro da tolerância numérica adotada de 10^{-4} . O comportamento de convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para essas análises é mostrado na Figura 10.



Figura 10: Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para as imagens de 364×364 e 1456×1456 do modelo mostrado na Figura 8. O lado esquerdo apresenta os resultados para a direção x, enquanto o lado direito mostra os resultados para a direção y.

É possível observar que a convergência do GC em dois níveis segue uma tendência descendente estável semelhante àquelas observadas para as análises do benchmark utilizado para validação. É especialmente importante perceber que, em relação ao número de iterações, a abordagem em dois níveis resulta em uma convergência significativamente mais rápida do que aquelas observadas com os métodos GC e MINRES aplicados ao sistema global de ponto de sela. Além disso, a quantidade de iterações necessárias pelos níveis interno e externo do método é apresentada na Tabela 4, para cada tamanho de malha. Nessa tabela, fica evidente que tanto a média de iterações para o nível interno quanto as iterações para o nível externo crescem linearmente com o refinamento da malha. Isso é

	Número de Iterações do GC					
	K_{xx}		K_{yy}			
Malha	Interno	Externo	Interno	Externo		
364×364	$505,9\pm\ 22,0$	31	$503,9\pm\ 22,6$	32		
728×728	$885,4\pm\ 55,0$	61	$890, 8 \pm 49, 1$	62		
1092×1092	$1201, 2\pm 96, 1$	93	$1226, 0\pm 82, 3$	93		
1456×1456	$1494,9 \pm 132,7$	126	$1517, 4 \pm 122, 4$	126		

importante, visto que, como lembrado, o refinamento leva a um crescimento quadrático no número de elementos na malha.

Tabela 4: Número de iterações para os níveis internos (média \pm desvio padrão da amostra) e externos no GC em dois níveis aplicado à amostra do compósito reforçado por fibras.

5.1.2.2 Arenito

Vianna et al. (VIANNA et al., 2020) apresentaram uma imagem de μ CT bidimensional de uma amostra de arenito, que é assumida aqui como sendo um VER do meio estudado, com dimensões de 1 mm×1 mm, representada por 200×200 pixels. Essa imagem é mostrada na Figura 11.



Figura 11: Microtomografia segmentada bidimensional de uma amostra de arenito fornecida por (VIANNA et al., 2020).

Para investigar a permeabilidade desta amostra de arenito, o GC em dois níveis foi aplicado à simulações com malhas cada vez mais refinadas, começando a partir de uma malha de 600×600 pixels. Uma tolerância numérica de 10^{-3} foi utilizada para ambos

os níveis do método. A Figura 12 mostra a convergência dos valores de permeabilidade obtidos à medida que a malha foi refinada progressivamente, chegando a 2400×2400 pixels.



Figura 12: Convergência da análise numérica da permeabilidade para o arenito ilustrado na Figura 11, utilizando o GC em dois níveis com uma tolerância numérica de 10^{-3} . K_{xx} representa a permeabilidade na direção x, enquanto K_{yy} representa a permeabilidade na direção y.

A partir da Figura 12, observa-se que os valores de permeabilidade obtidos para a imagem bidimensional de arenito são consistentes com os resultados relatados por Vianna et al. (VIANNA et al., 2020). Com a malha mais refinada (2400×2400 pixels), foi obtido $K_{xx} = 0,1019$ D e $K_{yy} = 0,1603$ D, o que indica uma permeabilidade ligeiramente anisotrópica. A convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para essas análises é ilustrada na Figura 13.



Figura 13: Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para as imagens de 600×600 e 2400×2400 da amostra de arenito mostrada na Figura 11. À esquerda, métricas para a direção x, à direita, métricas para a direção y.

A partir da Figura 13, observa-se que a convergência do GC em dois níveis foi mais uma vez mais rápida, em termos de número de iterações, do que os métodos GC e MINRES aplicados ao sistema global. O crescimento linear no número de iterações em relação ao refinamento da malha foi verificado novamente. Isso fica evidente na Tabela 5, onde são apresentados os números de iterações para os níveis interno e externo.

Número de Iterações do GC						
	\mathbf{K}_{xx}		K_{yy}			
Malha	Interno	Externo	Interno	Externo		
600×600	$970, 7 \pm 179, 8$	35	$940,8\pm199,4$	33		
800×800	$1258, 5 \pm 243, 8$	45	$1229, 1 \pm 274, 2$	44		
1200×1200	$1698, 3 \pm 354, 0$	68	$1728,5\pm 302,9$	66		
1600×1600	$2255, 0 \pm 356, 3$	92	$2211,9 \pm 377,8$	92		
2000×2000	$2804, 7 \pm 453, 5$	119	$2716,9 \pm 608,9$	117		
2400×2400	$3164, 4 \pm 476, 5$	147	$3190, 4 \pm 557, 0$	145		

Tabela 5: Número de iterações para os níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis aplicado à amostra de arenito.

5.2 GC em Dois Níveis a Partir da Triangularização Superior do Sistema de Equações

Nesta seção são apresentados os resultados referentes à abordagem da triangularização superior do problema de ponto de sela. Essa abordagem é aplicável às aproximações Q1-Q1 com estabilização para a pressão, Q2-Q1 e Q2-P1, pois não envolve a inversão do bloco **P** do sistema. A metodologia é aplicada aos mesmos exemplos da Seção 5.1.

5.2.1 Testes de Validação

As simulações de escoamento no meio poroso formado por cilindros paralelos apresentado em 5.1.1 foram realizadas em imagens bidimensionais com resoluções desde 64×64 pixels até 512×512 pixels.

Inicialmente, essa abordagem do método GC em dois níveis foi submetida a uma tolerância numérica de 10^{-8} . Novamente, essa baixa tolerância foi adotada como um critério rigoroso de parada nesta etapa de validação. Tanto os níveis interno quanto externo admitiram a mesma tolerância. O ponto de partida para todos os processos iterativos foi definido como um vetor nulo. Os valores de permeabilidade obtidos nas simulações e os respectivos erros em comparação com a solução semi-analítica são exibidos na Figura 4.

51



Figura 14: Convergência da análise numérica de permeabilidade para o modelo ilustrado na Figura 3, usando a segunda abordagem do GC em dois níveis com tolerância de 10^{-8} . O gráfico à esquerda apresenta os resultados para a permeabilidade, enquanto o da direita mostra o erro numérico em uma escala logarítmica. Aqui, κ representa a permeabilidade obtida pelas simulações, enquanto $\kappa_{DT} = 2,0444 \times 10^4$ D corresponde ao valor esperado da Equação (5.1).

A Figura 14 mostra que os resultados numéricos para a permeabilidade efetiva convergiram para o valor semi-analítico conhecido conforme o aumento da resolução da imagem, como esperado. A malha mais refinada, com 512×512 pixels, resultou em permeabilidade isotrópica: $2,0276 \times 10^4$ D de acordo com a aproximação Q1-Q1, $2,0286 \times 10^4$ D de acordo com a Q2-Q1 e $2,02680 \times 10^4$ D de acordo com a Q2-P1. Em relação à estabilidade, os gráficos dos resíduos normalizados são mostrados de acordo com o tipo de aproximação. A Figura 15 apresenta a curva dos resíduos do GC em dois níveis para o cálculo da pressão, e a curva dos resíduos do cálculo da velocidade com o GC convencional após a obtenção da pressão. São também mostradas as curvas de convergência dos resíduos do GC convencional e do MINRES aplicados ao sistema completo da aproximação Q1-Q1.



Figura 15: Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para a amostra mostrada na Figura 3 com a aproximação Q1-Q1.

Na Figura 15, é evidente que o GC em dois níveis para a pressão atinge a tolerância numérica de 10^{-8} antes dos outros métodos, assim como na estratégia de solução utilizada na Seção 5.1. O cálculo do sistema da velocidade com o GC convencional também exibe esse comportamento. Para todas as imagens estudadas, as curvas de resíduos observadas no GC convencional exibiram um padrão oscilatório com tendência descendente, consistentemente mantendo-se acima do resíduo do GC em dois níveis. O MINRES, por outro lado, não oscilou, embora tenha mostrado uma tendência descendente semelhante à observada no GC. A Tabela 6 apresenta o número médio de iterações necessárias para a convergência do GC do nível interno, em comparação com o nível externo, no caso da aproximação Q1-Q1.

	Número de Iterações do GC					
Malha	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$			
64×64	$119,1\pm0,9$	18	120			
128×128	$236, 3 \pm 2, 1$	18	245			
256×256	$463,7\pm 9,5$	18	495			
512×512	$918,9\pm22,2$	18	996			

Tabela 6: Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determinação da velocidade por meio do GC convencional, aplicados ao modelo de validação usando a formulação Q1-Q1.

Ao examinar o comportamento de convergência dos resíduos, é possível notar que, considerando tanto o nível interno quanto o externo do GC em dois níveis, o número total de iterações para a convergência é maior do que a dos métodos GC ou MINRES aplicados ao sistema global. No entanto, deve-se ter em mente que todas as iterações em qualquer nível tratam de subsistemas menores, especialmente no nível externo em que trabalha-se com um sistema correspondente à pressão. Portanto, menos operações de ponto flutuante são realizadas em cada operação de vetor ou matriz, em comparação com operações que lidam com o sistema original completo. Além disso, um aspecto importante a ser observado é que o número total de iterações em sistemas do tamanho do vetor de velocidades nesses padrões de convergência estáveis vistos na Figura 15 parece crescer linearmente em relação ao refinamento da imagem, já que o número de iterações do nível externo do método em dois níveis se mantém constante independente do tamanho da malha. Os mesmos experimentos foram realizados para a formulação Q2-Q1. Os comportamentos dos resíduos dos métodos de solução empregados são exibidos na Figura 16.



Figura 16: Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para a amostra mostrada na Figura 3 com a aproximação Q2-Q1.

Assim como no caso da formulação Q1-Q1, para o Q2-Q1 o método em dois níveis apresentou boa convergência para o cálculo da pressão e da velocidade. Apesar de, diferente do caso anterior, os resíduos para o cálculo da velocidade apresentarem valores superiores aos resíduos do GC convencional e do MINRES em alguns pontos do gráfico, a curva atinge o resíduo desejado primeiro. Também é interessante notar que a curva de convergência do GC convencional para a formulação biquadrática apresentou menos oscilações, apesar de ainda oscilar. Quanto ao número de iterações do nível externo do GC em dois níveis, o valor se apresenta quase constante, independente do refino da malha, como pode ser observado na Tabela 7.

	Número de Iterações do GC						
Malha	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$				
64×64	$297,6\pm\ 3,3$	44	308				
128×128	$583,87 \pm 10,2$	46	619				
$256{\times}256$	$1142,7\pm\ 26,6$	45	1239				
512×512	$2244,9\pm61,0$	45	2475				

Tabela 7: Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determinação da velocidade por meio do GC convencional, aplicados ao modelo de validação usando a formulação Q2-Q1.

Novamente é possível observar o perfil linear do número de iterações necessárias para a solução do problema em relação ao refino da malha. O maior número de iterações em todas as malhas comparados à aproximação Q1-Q1 ocorre devido ao maior número de nós do elemento Q2-Q1.

Para analisar os comportamentos dos métodos de solução adotados nas análises pela formulação Q2-P1, os mesmos testes dos casos anteriores foram realizados e os gráficos de convergência do método de solução são exibidos na Figura 17.



Figura 17: Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para a amostra mostrada na Figura 3 com a aproximação Q2-P1.

Neste caso, as curvas de convergência dos resíduos do GC em dois níveis para o cálculo da velocidade apresentaram boa convergência e, diferente do caso Q2-Q1, se mantiveram abaixo das curvas do GC convencional. Quanto ao cálculo da pressão, novamente o número de iterações do nível externo do solver foi baixo e quase constante, apresentando uma rápida convergência ao valor de tolerância adotado. Os números de iterações podem ser conferidos na Tabela 8

	Número de Iterações do GC						
Malha	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$				
64×64	$384, 7 \pm 7, 1$	38	305				
128×128	$751,5\pm\ 17,7$	38	610				
$256{\times}256$	$1469.9 \pm 33, 6$	38	1222				
512×512	$2849,7\pm86,6$	37	2441				

Tabela 8: Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determinação da velocidade por meio do GC convencional, aplicados ao modelo de validação usando a formulação Q2-P1.

Como nas outras formulações, é possível observar o perfil linear do número de iterações necessárias para a solução do problema em relação ao refino da malha.

Para melhor representar a variabilidade do número médio de iterações internas, apresentadas nas Tabelas 6, 7 e 8, a Figura 18 é fornecida. Nessa figura, são apresentados gráficos da evolução das iterações internas em relação às iterações externas para todas as malhas consideradas no modelo de referência. Ambos os eixos dizem respeito a dados normalizados, de modo a destacar o comportamento semelhante das curvas.



Figura 18: Evolução da quantidade de iterações do GC no nível interno, em relação à convergência do nível externo. O primeiro gráfico (esquerda superior) se refere à formulação Q1-Q1, o segundo (direita superior) à Q2-Q1 e o terceiro (centro inferior) à Q2-P1. As contagens de iterações do nível interno são normalizadas pela média respectiva, enquanto as contagens de iterações do nível externo são normalizadas para um intervalo [0,1].

É possível observar uma tendência descendente, inicialmente, e a variação é estabilizada, para as formulações Q1-Q1 e Q2-Q1. Isso significa que, a partir dessas observações, a quantidade de iterações necessárias pelo nível interno diminui nas primeiras iterações do nível externo e, em seguida, oscila em torno de um cenário ligeiramente abaixo da média geral das iterações internas. A formulação Q2-P1 inicialmente apresenta um número menor de iterações, mas o número aumenta e se estabiliza em torno da média. Foi particularmente importante verificar que essas curvas não mostravam uma tendência ascendente durante todo o processo de solução. Para investigar se o GC em dois níveis pela triangularização superior poderia alcançar o mesmo resultado com menos iterações internas, outro experimento foi conduzido. A malha 512×512 foi novamente simulada com uma tolerância de 10^{-6} para ambos os níveis interno e externo. Em seguida, foi simulada com uma tolerância de 10^{-6} para o nível externo e 10^{-5} para o nível interno. Finalmente, foi simulada com uma tolerância de 10^{-6} para o nível externo e 10^{-4} para o nível interno. As curvas resultantes para as três formulações são plotadas na Figura 19.



Figura 19: Convergência do resíduo normalizado observado com o GC em dois níveis considerando uma tolerância numérica variável para o nível interno. A tolerância numérica para o nível externo foi definida como $\epsilon_{\text{externo}} = 10^{-6}$. Análise da amostra sintética ilustrada na Figura 3, com a imagem de 512×512 pixels.

A Figura 19 indica que relaxar a tolerância do GC do nível interno, nesse caso, não introduz um erro significativo nas iterações do nível externo. Essa observação mostra que o uso de ordens de tolerância menores para o segundo nível do método é uma abordagem possível para reduzir o número de iterações internas.

5.2.2 Aplicação: Permeabilidade Absoluta de Amostras de Varreduras de μCT

Após o primeiro experimento de validação, a abordagem da triangulação superior do sistema com o GC em dois níveis foi empregada para determinar a permeabilidade absoluta

de amostras bidimensionais de materiais reais imageados por µCT.

5.2.2.1 Material Compósito Reforçado com Fibras

Neste experimento, foi aplicado o método de solução com o GC em dois níveis ao material compósito reforçado por fibras ilustrado pela Figura 8 na Seção 5.1. Para esse caso, o escoamento foi simulado nas imagens de 364×364 pixels e 728×728 pixels com o valor de 10^{-4} adotado para tolerância dos resíduos. A Tabela 9 mostra os resultados das permeabilidades calculadas de acordo com a formulação utilizada e a dimensão da malha.

	Permeabilidade [D]					
		\mathbf{K}_{xx}		\mathbf{K}_{yy}		
Malha	Q1-Q1	Q2-Q1	Q2-P1	Q1Q1	Q2Q1	Q2P1
364×364	0,2122	0,1170	0,1694	0,2001	0,1005	0,1452
728×728	0,1406	0,1116	0,1064	0,1252	0,9553	0,9097

Tabela 9: Valores de permeabilidade para o compósito reforçado por fibras calculados pelas formulações Q1-Q1, Q2-Q1 e Q2-P1 com tolerância numérica $\epsilon_{\text{externo}} = 10^{-4}$.

Conforme pode ser observado na Tabela 9, os valores obtidos para os coeficientes de permeabilidade estão próximos aos valores esperados. Considerando os resultados obtidos para a malha mais refinada (1456×1456) na Seção 5.1, $K_{xx} = 0,1178$ D e $K_{yy} = 0,1020$ D, foi necessário apenas um refino à imagem original para que as aproximações biquadráticas para a velocidade se aproximassem desse valor. O comportamento de convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para as análises com a aproximação Q1-Q1 é mostrado na Figura 20.



Figura 20: Convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para a imagem de 364×364 do modelo mostrado na Figura 8 usando a aproximação Q1-Q1. O lado esquerdo apresenta os resultados para a direção x, enquanto o lado direito mostra os resultados para a direção y.

É possível notar que, assim como no caso de validação, as curvas da abordagem em dois níveis resultam em uma convergência mais rápida do que aquelas observadas com os métodos GC e MINRES aplicados ao sistema global, em relação ao número de iterações. Entretanto, diferente do caso da validação, a curva para o cálculo da pressão (nível externo do GC em dois níveis) apresenta oscilações durante o processo de convergência. Além disso, a quantidade de iterações necessárias pelos níveis interno e externo do método de solução é apresentada na Tabela 10, para cada tamanho de malha.

	Número de Iterações do GC					
K_{xx} K_{yy}						
Malha	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$
364×364	$63,4 \pm 1,8$	267	63	$63,7\pm\ 2,0$	269	65
728×728	$120,4\pm4,3$	305	115	$120,8\pm4,4$	299	116

Tabela 10: Convergência do resíduo normalizado (norma L2) da amostra do compósito reforçado por fibras usando a formulação Q1-Q1. As métricas para a direção x estão à esquerda, enquanto as métricas para a direção y estão à direita.

Nessa tabela, é possível notar que, para as malhas consideradas, tanto a média de iterações para o nível interno quanto as iterações para a determinação da velocidade crescem linearmente com o refinamento da malha. Enquanto isso, o número de iterações do nível externo, ao invés de se manter quase constante como no teste de validação, aumenta ligeiramente de acordo com o refino da malha. Além disso, é interessante notar que o número de iterações do nível externo do método é maior do que o número de iterações necessárias para determinar a velocidade pelo GC convencional, o que não ocorreu nos testes de validação.

Quanto ao comportamento das curvas de convergência obtidas com a formulação Q2-Q1, os resultados são exibidos na Figura 21



Figura 21: Convergência do resíduo normalizado (norma L2) para a imagem de 364x364 da amostra do compósito reforçado por fibras usando a formulação Q2-Q1. As métricas para a direção x estão à esquerda, enquanto as métricas para a direção y estão à direita.

Nesse caso, é interessante observar o perfil que as curvas de convergência do GC convencional e do MINRES assumem. Ambas convergem sem grandes oscilações. Enquanto isso, além da curva do nível externo do CG em dois níveis apresentar maior número de iterações do que a curva do cálculo da velocidade, o valor do número de iterações ultrapassou os métodos de solução convencionais aplicados ao sistema completo. Os números de iterações são apresentados na Tabela 11.

	Número de Iterações do GC					
K_{xx} K_{yy}						
Malha	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$
364×364	$143, 1 \pm 5, 7$	288	137	$143,0\pm\ 6,7$	276	136
728×728	$261,7\pm 16,8$	285	282	$266, 0 \pm 15, 9$	270	281

Tabela 11: Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determinação da velocidade por meio do GC convencional, aplicados ao compósito reforçado por fibras usando a formulação Q2-Q1.

Nesta tabela, observa-se que o número de iterações do nível interno do método e do cálculo da velocidade pelo GC convencional mantém a característica linear, enquanto o número de iterações para o nível externo novamente se mantém quase constante.

Para concluir as análises do compósito reforçado por fibras, a Figura 22 exibe as

63

curvas de convergência obtidas pela simulação do escoamento com a formulação Q2-P1 na imagem de 364×364 pixels.



Figura 22: Convergência do resíduo normalizado (norma L2) para a imagem de 364x364 da amostra do compósito reforçado por fibras usando a formulação Q2-P1. As métricas para a direção x estão à esquerda, enquanto as métricas para a direção y estão à direita.

Os comportamentos observados nos resultados obtidos com a formulação Q2-P1 são semelhantes aos observados na Figura 21, com a formulação Q2-Q1. Entretanto, a curva do cálculo da pressão (nível externo do GC em dois níveis) apresentou grande oscilação no processo de convergência e exigiu maior número de iterações. O número exato de iterações pode ser conferido na Tabela 12.

	Número de Iterações do GC					
K_{xx} K_{yy}						
Malha	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$
364×364	$130,0\pm\ 5,5$	494	136	$129,9\pm 5,8$	485	134
728×728	$241,8\pm 12,6$	485	277	$241, 2 \pm 12, 9$	472	274

Tabela 12: Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determinação da velocidade por meio do GC convencional, aplicados ao compósito reforçado por fibras usando a formulação Q2-P1.

5.2.2.2 Arenito

O método também foi empregado ao meio poroso mostrado na Figura 11 da Seção 5.1. Para investigar a permeabilidade desta amostra de arenito, o GC em dois níveis foi aplicado à simulações com malhas cada vez mais refinadas, começando a partir da malha de 200×200 pixels, que é a resolução original da imagem. Uma tolerância numérica de 10^{-3} foi utilizada para ambos os níveis do método. A Figura 23 mostra a convergência dos valores de permeabilidade obtidos à medida que a malha foi refinada progressivamente, chegando a 1000×1000 pixels.



Figura 23: Convergência da análise numérica da permeabilidade para o arenito ilustrado na Figura 11, utilizando o GC em dois níveis com uma tolerância numérica de 10^{-3} . K_{xx} representa a permeabilidade na direção x, enquanto K_{yy} representa a permeabilidade na direção y.

A partir da Figura 23, observa-se que os valores de permeabilidade obtidos para a imagem bidimensional de arenito são consistentes com os resultados relatados na Seção 5.1. Além disso, é evidente que as formulações com aproximação biquadrática para a velocidade apresentaram um perfil claro de convergência para o resultado da permeabilidade desde a malha menos refinada. A convergência do resíduo normalizado pelo critério da norma L2 para as análises com a formulação Q1-Q1 é ilustrada na Figura 24.



Figura 24: Convergência do resíduo normalizado (norma L2) para a imagem de 600×600 da amostra de arenito usando a formulação Q1-Q1. As métricas para a direção x estão à esquerda, enquanto as métricas para a direção y estão à direita.

Novamente é possível observar o comportamento oscilatório da curva do nível externo do método em dois níveis. A Tabela 13 expõe o número de iterações realizadas em cada etapa do cálculo das variáveis.

	Número de Iterações do GC					
	\mathbf{K}_{xx}			\mathbf{K}_{yy}		
Malha	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$
200×200	$67,6\pm3,1$	207	51	$68,3\pm3,1$	201	50
400×400	$127,8\pm5,7$	225	79	$129,1\pm6,3$	218	72
600×600	$187,0\pm9,2$	225	103	$187,8\pm10,0$	220	104
800×800	$244,8\pm13,1$	231	138	$246,1\pm13,8$	220	130
1000×1000	$301,9\pm16,1$	234	172	$304,3\pm16,8$	219	161

Tabela 13: Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determinação da velocidade por meio do GC convencional, aplicados à amostra de arenito usando a formulação Q1-Q1.

O número de iterações do nível interno do método em dois níveis e do cálculo da velocidade com o GC convencional cresce de forma linear, enquanto o número de iterações do nível externo do método se mantém na mesma faixa. Os mesmos experimentos foram realizados para a formulação Q2-Q1. Os comportamentos dos resíduos dos métodos de solução empregados são exibidos na Figura 25.

66


Figura 25: Convergência do resíduo normalizado (norma L2) para a imagem de 600×600 da amostra de arenito usando a formulação Q2-Q1. As métricas para a direção x estão à esquerda, enquanto as métricas para a direção y estão à direita.

Neste caso, a curva de convergência do cálculo da pressão apresentou oscilações. A Tabela 14 mostra informações quanto ao número de iterações realizadas em cada etapa do método.

	Número de Iterações do GC					
	K_{xx}			\mathbf{K}_{yy}		
Malha	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$
200×200	$102,27\pm9,9$	215	84	$102,9\pm10,1$	209	82
400×400	$177,0\pm24,9$	206	170	$182,0\pm24,9$	199	173
600×600	$252,9\pm40,0$	201	258	$259,0\pm41,2$	196	265
800×800	$320,9\pm55,7$	210	345	$331,1\pm57,6$	193	354
1000×1000	$395,0\pm70,3$	208	432	$404,4\pm74,2$	192	443

Tabela 14: Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determinação da velocidade por meio do GC convencional, aplicados à amostra de arenito usando a formulação Q2-Q1.

Novamente é possível observar o perfil linear do número de iterações necessárias para a solução do problema em relação ao refino da malha. Para analisar os comportamentos dos métodos de solução adotados nas análises na formulação Q2-P1, os mesmos testes dos casos anteriores foram realizados e são exibidos na Figura 26.

67



Figura 26: Convergência do resíduo normalizado (norma L2) para a imagem de 600×600 da amostra de arenito usando a formulação Q2-P1. As métricas para a direção x estão à esquerda, enquanto as métricas para a direção y estão à direita.

Neste caso, a curva de convergência dos resíduos do GC em dois níveis para o cálculo da pressão apresentou ainda maior oscilação. É interessante notar que a curva do cálculo da velocidade e do cálculo do sistema global pelo GC convencional também apresentaram oscilações no início dos processos. Os números de iterações podem ser conferidos na Tabela 15

	Número de Iterações do GC					
		\mathbf{K}_{xx}			\mathbf{K}_{yy}	
Malha	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$	Interno	Externo	Cálculo de ${\bf u}$
200×200	$91,37\pm9,0$	263	104	$94,2\pm8,9$	181	104
400×400	$168,0\pm19,5$	182	225	$170,7\pm17,7$	178	220
600×600	$237,2\pm31,3$	180	349	$241,4\pm28,0$	172	356
800×800	$295,4\pm39,7$	254	483	$308,7\pm36,6$	172	488
1000×1000	$355,6\pm51,6$	254	610	$372,5\pm46,3$	176	617

Tabela 15: Número de iterações para cálculo dos níveis interno (média \pm desvio padrão da amostra) e externo do GC em dois níveis, bem como para determinação da velocidade por meio do GC convencional, aplicados à amostra de arenito usando a formulação Q2-P1.

68

6 Aplicação Prática: Estimativa da Permeabilidade de Meios Porosos por Aprendizado de Máquina

O conhecimento sobre porosidade, distribuição de tamanho de poros e permeabilidade de meios porosos é essencial para as operações em campos de petróleo e o gerenciamento de reservatórios. Esses conhecimentos podem ser obtidos por meio de medidas de relaxação de Ressonância Magnética Nuclear (RMN), por exemplo (COATES; XIAO; PRAMMER, 1999). Dentre as diferentes abordagens para estimar a permeabilidade a partir de experimentos de RMN, o Modelo da Média de T_2 (conhecido também como Modelo SDR) e o Modelo de Fluido Livre (também chamado de Modelo Coates) são os mais comumente utilizados. Essas equações matemáticas são fundamentadas na porosidade da amostra e na distribuição dos tamanhos dos poros. Para obter a distribuição de tamanhos de poros do domínio, a medição de $T_{\rm 2}$ é frequentemente empregada. No regime de difusão rápida, a relação entre T_2 e a distribuição de tamanhos de poros é estabelecida através da relaxatividade superficial (ρ) da interface entre a parede do poro e o fluido. ρ influencia a velocidade de desmagnetização dos spins na interface. Entretanto, na indústria, ρ não é medido diretamente no domínio analisado. Este valor não é uniforme em todas as paredes de poros; é, na verdade, um valor médio experimental obtido a partir de dados de laboratório para um determinado tipo de amostra. Devido à influência da distribuição de tamanhos de poros e, consequentemente, nos resultados petrofísicos, a estimativa de ρ é de grande importância (SOUZA; CARNEIRO; BOYD et al., 2016).

As abordagens mencionadas para estimativa da permeabilidade (SDR e Coates) apresentam limitações e podem falhar ou subestimar a permeabilidade de acordo com o tipo de hidrocarboneto presente no reservatório (COATES; XIAO; PRAMMER, 1999). Em contrapartida, atualmente, uma ferramenta que tem se mostrado altamente eficiente na previsão de resultados petrofísicos são os modelos de aprendizado de máquina (PLAS-TINO et al., 2017; EL-SEBAKHY et al., 2012; VIVEROS; PARRA, 2014; BRUCE et al., 2000; LIATSIS et al., 2012). Esses modelos possuem a capacidade de extrair informações complexas de conjuntos de dados. Neste contexto, os modelos utilizam exemplos de curvas T_2 ou distribuição de tamanhos de poro, juntamente com a permeabilidade correspondente do meio poroso, para estimar a permeabilidade em exemplos com permeabilidade desconhecida, com base nas curvas fornecidas. Essa estimativa pode ser realizada por meio da aplicação de técnicas de regressão, cálculo de distância ou similaridade das informações, bem como outras abordagens baseadas em propriedades estatísticas. O conjunto de dados de observações anteriores, os exemplos fornecidos, é chamado de conjunto de treinamento. Essas observações devem ser capazes de representar as principais peculiaridades do sistema para estimar um valor de saída próximo ao valor real de um novo exemplo. A quantidade de informações fornecidas ao modelo é arbitrária. No entanto, geralmente, quanto maior o número de informações apresentadas ao modelo sobre os exemplos, maior a sua capacidade de fornecer boas previsões.

Este trabalho é baseado em um conjunto de dados construído a partir de 15000 meios porosos tridimensionais criados de forma sintética. A curva T_2 de cada um dos modelos sintéticos é obtida por meio de uma simulação de RMN usando uma implementação de *Random Walk* (RW, ou "Caminhantes Aleatórios" em português), conforme descrito em (RIBEIRO et al., 2022). A determinação da permeabilidade do meio é feita através de técnicas de homogeneização computacional usando uma abordagem do MEF com a aproximação Q1-Q1, baixa alocação de memória e baixo tempo de processamento baseada em imagens, conforme descrito em (LOPES; VIANNA et al., 2023).

Assim, a partir da criação de um conjunto de dados sintéticos para estimar a permeabilidade de meios porosos, o objetivo é investigar a influência que ρ exerce na estimativa da permeabilidade a partir de simulações de RMN. Para isso, são realizados três experimentos usando modelos de aprendizado de máquina, alimentados com informações diferentes. No primeiro experimento, é criado um modelo preditivo para estimar a permeabilidade a partir das curvas T_2 de rochas que adotam o mesmo valor de ρ . O segundo experimento utiliza um conjunto de curvas T_2 geradas a partir de rochas que adotam valores diferentes para ρ . Nesse caso, o modelo não possui informações sobre o valor de ρ de cada rocha. Por fim, no terceiro experimento, as mesmas curvas geradas no segundo experimento são usadas. No entanto, o valor de ρ de cada rocha é informado ao modelo por meio da multiplicação da curva T_2 por ρ , resultando na curva de distribuição de tamanhos de poros.

6.1 Meios Porosos Sintéticos em 3D

O primeiro passo para o desenvolvimento deste estudo consistiu na geração do conjunto de imagens que representa os meios porosos analisados nas etapas seguintes. As imagens foram criadas por meio da superposição aleatória de esferas com diâmetros semelhantes. O espaço ocupado por uma esfera representa uma parte sólida da imagem, enquanto os espaços entre as esferas representam os poros. Foram geradas 15000 imagens com valores de porosidade distribuídos entre 1% e 40%. A Figura 27 apresenta fatias bidimensionais de alguns dos meios porosos sintéticos gerados.



Figura 27: Fatias bidimensionais de meios porosos tridimensionais gerados sinteticamente. A região branca corresponde ao componente sólido, enquanto a região preta indica a região porosa.

6.2 Simulação de Random Walk Baseada em Voxels

As imagens sintéticas de meios porosos são usadas como parâmetro de entrada para o código de RW para simular o decaimento da magnetização em meios porosos. Os caminhantes contidos na região porosa começam com um estado de magnetização, e seu decaimento ocorre devido aos efeitos de volume do fluido e à relaxatividade superficial da interface entre o fluido e o sólido. No algoritmo RW, cada partícula do fluido é posicionada aleatoriamente no espaço que representa os poros e difunde em etapas discretas pelos voxels vizinhos. Para calcular a desmagnetização devido às paredes sólidas, é necessário introduzir um valor para a relaxatividade superficial na simulação. Dessa forma, testes de desmagnetização foram simulados com o parâmetro de relaxatividade superficial variando de 10 a 52,5 μ m/s para cada imagem.

Posteriormente, os valores das curvas de decaimento são aplicados a um algoritmo de inversão que fornecerá as curvas T_2 . De acordo com o valor de relaxatividade superficial introduzido no código, uma curva T_2 diferente é gerada. Os valores das coordenadas dessas curvas serão usados como atributos para os modelos preditivos baseados em aprendizado de máquina.

6.3 Cálculo de Permeabilidade com Homogeneização Numérica

As medições de permeabilidade dessas imagens foram calculadas usando um programa de Elementos Finitos baseado em voxels, com o uso da aproximação Q1-Q1 com estabilização para a pressão, como introduzido neste trabalho. Para a análise numérica, a malha gerada para representar o domínio é baseada nos voxels das imagens e suas cores, que representam elementos sólidos e poros. Cada uma das imagens geradas para representar o meio poroso apresenta caminhos capazes de permitir o escoamento de fluidos através dos canais de poros. Dessa forma, o código é usado para simular o fluxo de uma extremidade do meio poroso até a outra. Como o código é baseado em imagens, a tarefa de construção da malha é facilmente realizada e não requer muito esforço.

Assume-se que o escoamento é governado pelas equações de Stokes. O escoamento descrito por essas equações é caracterizado por um estado estacionário e não leva em consideração os efeitos convectivos do fluxo. A partir das equações governantes do problema, o cálculo das velocidades é realizado nos pontos da malha que representam o espaço poroso da imagem com uma técnica elemento por elemento (LOPES; VIANNA et al., 2023). Essa técnica reduz a quantidade de memória alocada para executar análises extensas.

A permeabilidade é obtida pela aplicação de um gradiente de pressão unitário no meio poroso. O campo de velocidade induzido no meio poroso após a aplicação do gradiente define a propriedade de homogeneização efetiva do material através da Lei de Darcy. Essas medidas são os atributos-alvo para os modelos de aprendizado de máquina.

6.4 Estimativa de Permeabilidade com SDR

A equação SDR 6.1, proposta por (KENYON et al., 1988), é um estimador clássico de permeabilidade que utiliza a medição das distribuições de tempo de relaxamento longitudinal (T_1) ou transversal (T_2) obtidas através de ferramentas de RMN. Nestes processos,

quando um núcleo magnético, como o de um átomo de hidrogênio, é submetido a um campo magnético externo forte, ele começa a girar em torno do eixo do campo magnético. T_1 está associado ao tempo necessário para os prótons realinharem-se com o campo magnético externo após um pulso de radiofrequência aplicado ser desligado, caracterizando a recuperação da magnetização longitudinal. Por outro lado, T_2 está relacionado ao tempo necessário para os prótons perderem a coerência de fase entre si, devido a interações magnéticas locais, representando o decaimento da magnetização transversal. A equação SDR é apresentada neste trabalho como uma função da distribuição de tempo de relaxamento transversal, uma vez que a sua aquisição é mais rápida comparativamente ao tempo de relaxamento longitudinal.

$$k_{SDR} = a\phi^b (T_{2LM})^c \tag{6.1}$$

Aqui, a é uma constante que depende da litologia da formação, ϕ é a porosidade do meio poroso (em %), T_{2LM} é a média logarítmica da distribuição de tempo de relaxamento T_2 (também considerada a média geométrica da distribuição). b e c são parâmetros constantes de expoente que também dependem dos aspectos da formação. A Regressão Linear Múltipla (MLR) é usada para determinar os melhores valores para a, b e c a partir de medições laboratoriais de RMN e permeabilidade a gás. O modelo proposto pela equação 6.1 não necessariamente exige o uso de ρ , sua influência está incluída na constante a. Para casos em que se assume que o mecanismo de relaxamento superficial é dominado pela interação do fluido com a superfície do poro e que ρ é homogêneo em cada volume analisado, é possível incluir explicitamente a relaxatividade superficial para obter conhecimento sobre a distribuição de tamanho de poros, como segue na equação 6.2 (SOUZA; CARNEIRO; ZIELINSKI et al., 2013).

$$k_{SDR} = a\phi^b (\rho T_{2LM})^c \tag{6.2}$$

6.5 Estimativa de Permeabilidade com Inteligência Artificial

Ao utilizar os modelos de aprendizado de máquina, o primeiro passo é escolher algoritmos que se alinhem à aplicação em questão, seguido pelo treinamento dos algoritmos no conjunto de dados da aplicação e a avaliação dos desempenhos. É interessante testar diferentes algoritmos para escolher aquele que melhor se ajusta ao conjunto de dados. No caso da caracterização de meios porosos, os modelos usados foram alimentados com diferentes informações disponíveis: a curva T_2 e a curva de distribuição de tamanho de poros. Após testar vários modelos, os melhores foram selecionados e os principais parâmetros foram ajustados de acordo com o conjunto de dados para otimizar o processo. As curvas são fornecidas aos modelos na forma de bins, que são conjuntos de pontos finitos usados para representar curvas contínuas. No caso da curva T_2 , cada um dos 128 pontos utilizados corresponde ao valor da amplitude da curva em um determinado instante de tempo, na faixa de 0,0001 a 10 ms. No caso da curva de distribuição de tamanho de poros, os intervalos correspondem ao valor da amplitude da curva de acordo com o valor da relação Superfície/Volume (S/V), na faixa de 0,001 a 525 μ m.

O conjunto de dados foi manipulado com o uso da biblioteca *pandas*, uma ferramenta escrita em Python para análise de dados e computação científica. Ela inclui várias estruturas de dados poderosas e funções integradas para análise estatística. Para a aplicação dos algoritmos de aprendizado de máquina, foi utilizado o *sklearn*, uma biblioteca em Python que fornece uma ampla gama de algoritmos para mineração de dados e aprendizado de máquina. O *sklearn* é fácil de usar e está bem integrado ao ecossistema do Python. É uma das bibliotecas de aprendizado de máquina mais populares em uso. Por fim, o *matplotlib* foi utilizado para visualização de dados, uma biblioteca de plotagem para a linguagem de programação Python com recursos para análise de dados científicos e engenharia.

6.5.1 Pré Processamento

Uma parte significativa do tempo utilizado na aplicação do aprendizado de máquina é gasto na garantia da qualidade dos dados. Se algumas instâncias forem claramente pontos de dados que diferem significativamente de outras observações (conhecidos como outliers) ou não possuírem valores de alguns atributos, eliminá-las pode ajudar na qualidade das estimativas. Primeiramente, através do histograma de porosidade e permeabilidade das amostras, outliers são identificados e removidos. Desta forma, foi garantido que os valores de porosidade estivessem distribuídos de forma aproximadamente equilibrada na faixa entre 1 e 40%, enquanto a permeabilidade teve seus valores compreendidos entre 0,1 e 6000 mD.

Para reduzir a interferência da grande variação entre as ordens de grandeza dos valores de permeabilidade nos algoritmos de aprendizado de máquina, os valores são expressos em logaritmo de base 10. Além disso, todas as curvas contêm informações de porosidade a partir da curva T_2 . No caso do conjunto de dados criado para este estudo, inicialmente as curvas foram normalizadas e em seguida suas coordenadas no eixo das ordenadas foram

multiplicadas pela porosidade, como forma de inserir esta informação no modelo.

A relaxatividade superficial do meio é introduzida nos modelos através da curva de distribuição do tamanho dos poros. Como os modelos são simples e consideram o regime de difusão rápida, a curva de distribuição do tamanho dos poros é obtida conforme a equação 6.3 apresentada em (DUNN; BERGMAN; LATORRACA, 2002).

$$\frac{1}{T_2} = \rho\left(\frac{S}{V}\right),\tag{6.3}$$

onde T_2 é a distribuição do tempo de relaxamento transversal para um determinado meio poroso, ρ é a relaxatividade superficial transversal e $\left(\frac{S}{V}\right)$ é a relação entre a área da superfície interna dos poros e o volume dos poros. As coordenadas no eixo das abscissas das curvas são multiplicadas pelo respectivo valor de relaxatividade superficial para gerar os valores de distribuição do tamanho dos poros. Após a multiplicação, todas as coordenadas são colocadas no mesmo domínio de coordenadas no eixo das abscissas através de técnicas de extrapolação.

6.5.2 Seleção de Algoritmo

Alguns algoritmos promissores e amplamente utilizados foram empregados para realizar as tarefas de regressão: *k-Nearest Neighbors* (kNN, ou "k-Vizinhos Mais Próximos"), *Multilayer Perceptron* (MLP, ou "Perceptron Multicamada") e *Random Forest* (RF, ou "Floresta Aleatória"). Esta seção oferece uma visão geral simples de como os algoritmos funcionam e seus principais hiperparâmetros. Mais informações podem ser exploradas no site da biblioteca sklearn¹.

• KNN: O método dos k vizinhos mais próximos consiste em calcular a distância entre uma instância e as outras instâncias no conjunto de dados. A tarefa de classificação ou regressão é realizada de acordo com as instâncias que têm maior proximidade com a instância em questão. No caso da classificação, é feita uma votação e a classe da instância analisada será a mesma da maioria das instâncias mais próximas. No caso da regressão, a variável alvo é definida por meio de uma média entre os valores dos vizinhos mais próximos. Os principais parâmetros para esse modelo de aprendizado de máquina são o número de vizinhos mais próximos, os pesos que os pontos de uma instância possuem, o algoritmo usado para estruturar os dados e buscar os vizinhos mais próximos, e a métrica usada para calcular a distância.

¹Consulte para mais detalhes: *sklearn*.

- MLP: O MLP é um tipo de rede neural *feedforward*, o que significa que as conexões entre os nós não formam um *loop* e as informações são transmitidas apenas em uma direção. O algoritmo MLP é uma modificação do algoritmo Perceptron, uma rede neural de camada única mais simples, que é usado para resolver problemas que são muito complexos para uma rede neural de camada única. Seus principais hiperparâmetros são o tamanho das camadas ocultas, o tipo de função de ativação para as camadas ocultas, o otimizador usado para ajustar os parâmetros da rede (os pesos), a técnica de regularização para regressão, a taxa de aprendizado (que dita o quanto o modelo muda de acordo com o erro estimado em cada iteração) e o número máximo de iterações.
- RF: O RF é um algoritmo poderoso baseado na construção de várias árvores de decisão com subamostras do conjunto de dados. As árvores de decisão extraem regras de decisão a partir dos dados. Os ramos e folhas da árvore de decisão são uma representação de tabelas de decisão, em que as folhas definem uma classe (ou valor no caso de tarefas de regressão) e os ramos são os atributos. A estratégia de basear o valor final do atributo-alvo na previsão realizada por várias árvores é chamada de Aprendizado em Conjunto. No caso do RF, cada árvore estima valores diferentes para a permeabilidade, e o valor final retornado pelo modelo preditivo é a média dos valores que elas geraram. O uso de múltiplos modelos é uma estratégia para melhorar a precisão e evitar o overfitting, que ocorre quando o modelo se ajusta bem aos dados de treinamento, mas não consegue generalizar seu bom desempenho para novos dados. Os principais hiperparâmetros utilizados no algoritmo RF são o número de árvores na floresta e os parâmetros que controlam a qualidade das árvores de decisão, como sua profundidade, número mínimo de divisões e a aleatoriedade das instâncias usadas em cada árvore. A aleatoriedade extra introduzida pelo RF resulta em árvores mais diversas, o que melhora a extração de informações.

6.5.3 Avaliação de Desempenho

Em qualquer projeto de aprendizado de máquina, é importante prestar atenção ao *overfitting* (ajuste excessivo) e usar métricas apropriadas para avaliar um modelo de regressão. O *overfitting* pode ocorrer quando um modelo é excessivamente ajustado para capturar as particularidades dos dados em que foi treinado e, como resultado, ele tem um desempenho ruim quando aplicado a novos dados. Métricas apropriadas podem ajudar a identificar o *overfitting* ao medir o quão bem um modelo se comporta em dados que ele não viu antes. Algumas métricas comuns foram utilizadas para avaliar modelos de regressão: a Raíz do Erro Quadrático Médio (RMSE) e o coeficiente de determinação (R^2). O RMSE mede a distância média entre os valores estimados e os valores reais. O R^2 mede o quão bem o modelo prevê os valores no conjunto de dados, sendo que um valor de 1 indica um ajuste perfeito. Como a permeabilidade é usada no logaritmo na base 10 nas estimativas dos modelos, o RMSE é apresentado na escala do logaritmo na base 10, indicado por RMSLE na equação (6.4), e na escala normal (o valor do logaritmo é exponencializado pelo valor do RMSE), indicado por RMSE na equação (6.5).

$$RMSLE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} (k_{pred}(i) - k_{MEF}(i))^2}$$
(6.4)

$$RMSE = \operatorname{antilog}_{10}\left(\sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(k_{pred}(i) - k_{MEF}(i))^2}\right)$$
(6.5)

Nas equações (6.4) e (6.5), N é o número total de observações, k_{pred} são os valores de permeabilidade estimados pelos modelos e k_{MEF} são os valores de permeabilidade determinados pela análise do MEF. Os valores da permeabilidade são utilizados na escala log nos modelos preditivos, então não é necessário aplicar novamente o \log_{10} nos valores de permeabilidade como consta nas Equações (6.4) e (6.5).

Os modelos preditivos foram aplicados ao conjunto de dados usando a técnica de validação cruzada com 10 divisões (10-fold cross-validation). A validação cruzada com 10-fold é uma técnica usada no aprendizado de máquina para estimar o desempenho de um modelo. A técnica envolve dividir os dados em dez partes e treinar o modelo em nove das divisões e testá-lo na décima. Isso é repetido dez vezes, com uma divisão diferente sendo usada como conjunto de teste a cada vez. Os resultados das dez execuções são calculados para obter uma estimativa do desempenho do modelo em novos dados.

6.6 Resultados e Discussão

6.6.1 Caso 1 - Instâncias de Mesma Relaxatividade Superficial e Curvas T2 como Atributos

Primeiramente, a estimativa da permeabilidade de um conjunto de instâncias (exemplos) que possuem um valor de relaxatividade superficial de 10 μ m/s foi realizada. Portanto, informar esse parâmetro aos modelos de aprendizado não é necessário, pois não acrescenta

mais conhecimento ao modelo. Os resultados dos modelos aplicados são apresentados na Tabela 16.

Model	R^2	RMSLE	RMSE (mD)
SDR	0,963	$0,\!172$	1,486
KNN	0,992	0,077	$1,\!195$
MLP	0,993	0,074	$1,\!187$
RF	0,992	0,077	$1,\!195$

Tabela 16: Métricas de avaliação das estimativas de permeabilidade no caso em que todos os exemplos possuem o mesmo ρ .

Os algoritmos utilizados foram capazes de estimar muito bem a permeabilidade dos meios porosos, apresentando excelentes coeficientes de determinação e erros médios quadrados. Todos os algoritmos de aprendizado de máquina escolhidos para este estudo apresentaram R^2 maior que 0,992 e RMSLE menor que 0,077. A equação SDR apresentou valores de erro mais altos em comparação com os outros modelos.

A Figura 28 mostra o gráfico de dispersão da permeabilidade absoluta (obtida através do MEF) em relação à permeabilidade estimada pelo MLP, que apresentou o maior coeficiente de determinação e os menores erros. A Figura 28mostra apenas 1/10 de todas as instâncias do banco de dados, já que o restante é utilizado como conjunto de treinamento na metodologia de validação cruzada com 10 divisões.



Figura 28: Relação entre a permeabilidade absoluta, obtida através do MEF, e a permeabilidade estimada utilizando o MLP no contexto do Caso 1. Todos os valores estão representados em uma escala logarítmica.

O gráfico ilustra o sucesso na estimativa da previsão da permeabilidade dos meios porosos com a mesma relaxatividade superficial. Além disso, é interessante notar que a escala de cores no lado direito da Figura 28 descreve a média das curvas T_2 de cada instância.

6.6.2 Caso 2 - Instâncias de Relaxatividades Superficiais Variadas e Curvas T2 como Atributos

No segundo experimento, foi realizada a estimativa da permeabilidade de um conjunto de instâncias que possuem valores de relaxatividade superficial de 10 μ m/s a 52.5 μ m/s. Foi adotado um valor aleatório de ρ para cada instância, com o cuidado de que nenhum valor fosse adotado um número excessivo de vezes em relação aos outros. Os resultados dos modelos aplicados são apresentados na Tabela 17.

Model	R^2	RMSLE	RMSE (mD)
SDR	0,916	0,257	$1,\!807$
KNN	$0,\!983$	$0,\!115$	1,302
MLP	$0,\!987$	0,101	1,262
RF	$0,\!985$	0,106	1,277

Tabela 17: Métricas de avaliação das estimativas de permeabilidade no caso em que cada exemplo possui um ρ diferente não informado ao modelo.

Nesse caso, não foi informado aos modelos o valor da relaxatividade superficial de cada instância e, como esperado, as métricas de avaliação das estimativas apresentaram resultados inferiores quando comparados ao caso em que a relaxatividade superficial é a mesma para todas as instâncias. Apesar do Caso 1 apresentar melhores resultados, os algoritmos no Caso 2 apresentaram valores aceitáveis de R^2 e erro médio quadrado. Todos os algoritmos escolhidos para este estudo apresentaram RMSLE inferior a 0,115 e o melhor R^2 obtido foi de 0,987. A equação SDR apresentou valores de erro mais altos em comparação com os modelos de aprendizado de máquina.

A Figura 29 mostra a permeabilidade absoluta (obtida através do MEF) em relação à permeabilidade estimada pelo MLP, que apresentou o maior R^2 e o menor RMSLE.

O gráfico apresenta bons resultados na estimativa da permeabilidade dos meios porosos, mostrando alguns pontos ligeiramente mais dispersos.



Figura 29: Relação entre a permeabilidade absoluta, obtida através do MEF, e a permeabilidade estimada utilizando o MLP no contexto do Caso 2. Todos os valores estão representados em uma escala logarítmica.

6.6.3 Caso 3 - Instâncias de Relaxatividades Superficiais Variadas e Curvas S/V como Atributos

Assim como no segundo caso, foi realizada a estimativa da permeabilidade do mesmo conjunto de instâncias que possuem valores de relaxatividade superficial de 10 μ m/s a 52.5 μ m/s. No entanto, ao contrário do caso anterior, os modelos foram informados sobre o valor da relaxatividade superficial de cada instância do conjunto. Esse conhecimento foi fornecido aos algoritmos por meio da curva de distribuição de tamanho de poro, que pode ser obtida no regime de difusão rápido por meio do valor de ρ . Os resultados dos modelos aplicados são apresentados na Tabela 18.

Model	\mathbb{R}^2	RMSLE	RMSE (mD)
SDR	$0,\!959$	$0,\!178$	1,507
KNN	0,992	0,080	1,202
MLP	0,992	0,078	$1,\!198$
RF	0,991	0,081	1,206

Tabela 18: Métricas de avaliação das estimativas de permeabilidade no caso em que cada exemplo possui um ρ diferente, informado ao modelo por meio da curva de distribuição de tamanho de poro.

Como esperado, as métricas de avaliação das estimativas apresentaram resultados tão bons quanto no primeiro caso, em que a relaxatividade superficial é a mesma para todas as instâncias. Foram obtidos bons valores de R^2 e erro médio quadrado. Todos os algoritmos de aprendizado de máquina escolhidos para este estudo apresentaram RMSLE inferior a 0,081 e o melhor R^2 obtido foi de 0,992.

A Figura 30 mostra a permeabilidade absoluta (obtida através do MEF) em relação à permeabilidade estimada pelo MLP, que apresentou o maior coeficiente de determinação e o menor RMSLE.



Figura 30: Relação entre a permeabilidade absoluta, obtida através do MEF, e a permeabilidade estimada utilizando o MLP no contexto do Caso 3. Todos os valores estão representados em uma escala logarítmica.

Por meio das Tabelas 16, 17 e 18, é possível observar que em todos os casos a equação SDR mostra valores de erro mais altos em comparação com os algoritmos de aprendizado de máquina, o que demonstra a grande competência desses algoritmos como ferramentas para estimar informações.

A Tabela 19 exibe as melhores métricas de avaliação em cada caso de estimativa da permeabilidade e, apesar da simplicidade do conjunto de dados, é possível notar que os casos em que a relaxatividade superficial é conhecida apresentaram resultados mais precisos. O conjunto de dados construído por este trabalho representa o cenário mais simples, no qual as rochas têm uma estrutura interna simples e a permeabilidade é altamente dependente da porosidade do meio. Além disso, foi considerado que os valores de relaxatividade superficial são bem conhecidos, uniformes em todas as interfaces dos meios e limitados a uma faixa pequena. É interessante enfatizar que o desempenho dos algoritmos de estimativas de permeabilidade apresenta desafios para cenários reais. Quanto mais complexas forem as estruturas das rochas, maior será o impacto da ausência da relaxatividade superficial (SOUZA; CARNEIRO; BOYD et al., 2016).

Model	R^2	RMSLE	RMSE (mD)
Case 01	0,993	0,074	1,187
Case 02	$0,\!987$	$0,\!101$	1,262
Case 03	0,992	$0,\!078$	$1,\!198$

Tabela 19: Comparação entre as melhores métricas de avaliação dos três experimentos realizados. Todas as métricas são correspondentes ao MLP.

7 Conclusão

Em conclusão, este trabalho apresentou uma metodologia para a determinação da permeabilidade a partir de uma formulação bidimensional de elementos finitos, utilizando aproximações Q1-Q1 com estabilização para a pressão, Q2-Q1 e Q2-P1 para as variáveis do problema de Stokes. Os sistemas de equações lineares foram resolvidos por meio de uma estratégia em dois níveis, que se baseia no complemento de Schur e é aplicada ao método iterativo dos Gradientes Conjugados (GC). As bases teóricas do problema foram explicadas, acompanhadas de uma discussão sobre as características do problema de ponto de sela. Foi demonstrado como incorporar a matriz inversa resultante do complemento de Schur como solução de um subsistema em cada iteração do processo de solução.

A metodologia explorada foi efetivamente validada por meio de um problema simples com solução semi-analítica conhecida, evidenciando a confiabilidade e precisão das aproximações e do método de solução em dois níveis. Além disso, os códigos que simulam o escoamento e o método de solução em dois níveis foram aplicados no cálculo da permeabilidade efetiva de amostras obtidas por µCT: um material poroso preenchido com fibras e uma rocha de arenito. Isso demonstrou a aplicabilidade dos métodos em simulações baseadas em imagens. Os valores de permeabilidade obtidos foram consistentes com as faixas de valores relatados na literatura, validando novamente o método de solução utilizado.

Todas as aproximações convergiram para o resultado semi-analítico de permeabilidade usado para validar as implementações, exibindo perfis de convergência semelhantes. No caso dos meios porosos microtomografados analisados, as aproximações biquadráticas para a velocidade demonstraram convergência para o valor da permeabilidade desde malhas pouco refinadas, enquanto a aproximação Q1-Q1 exigiu maior refinamento da malha para alcançar a convergência. Para todos os meios porosos estudados, as curvas de resíduos observadas no GC em dois níveis aplicado à triangularização inferior do sistema apresentaram convergência significativamente mais rápida em comparação com a aplicação dos métodos GC e MINRES ao sistema global de ponto de sela. No caso da abordagem pela triangularização superior do sistema de equações, as curvas de convergência para os modelos com geometrias complexas apresentaram oscilações antes de atingir o valor estabelecido pela tolerância. Embora o número total de iterações (internas e externas) necessárias para a convergência seja semelhante, ou maior, do que o do GC e do MINRES, o método em dois níveis lida com subsistemas menores em todas as iterações.

Por fim, foi realizada a estimativa da permeabilidade de um conjunto de meios porosos sintéticos utilizando algoritmos de aprendizado de máquina. A metodologia aplicada obteve sucesso na tarefa e superou os resultados gerados por estimativas empíricas. Além disso, por meio das análises foi possível comprovar a influência que a relaxatividade superficial possui na determinação da permeabilidade dos meios porosos.

Em resumo, este estudo mostra o desenvolvimento de ferramentas destinadas à determinação da permeabilidade com base em imagens e à solução de sistemas lineares indefinidos usando o complemento de Schur. Em trabalhos futuros, planeja-se explorar técnicas de implementação computacionalmente eficientes para as abordagens aqui apresentadas.

REFERÊNCIAS

AARNES, J. E.; GIMSE, T.; LIE, K.A. An introduction to the numerics of flow in porous media using matlab. In: GEOMETRIC modelling, numerical simulation, and optimization: applied mathematics at SINTEF. [S. 1.]: Springer, 2007. p. 265–306.

AKANJI, L. T.; MATTHAI, S. K. Finite element-based characterization of pore-scale geometry and its impact on fluid flow. **Transport in porous media**, Springer, v. 81, p. 241–259, 2010.

ANDRÅ, H. et al. Digital rock physics benchmarks—part I: imaging and segmentation. **Computers & Geosciences**, v. 50, p. 25–32, 2013. Benchmark problems, datasets and methodologies for the computational geosciences. ISSN 0098-3004. DOI: https://doi.org/10.1016/j.cageo.2012.09.005. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098300412003147>.

_____. Digital rock physics benchmarks—part II: computing effective properties. Computers & Geosciences, v. 50, p. 33–43, 2013. Benchmark problems, datasets and methodologies for the computational geosciences. ISSN 0098-3004. DOI:

https://doi.org/10.1016/j.cageo.2012.09.008. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098300412003172>.

ANDREASSEN, E.; ANDREASEN, C. S. How to determine composite material properties using numerical homogenization. **Computational Materials Science**, v. 83, p. 488–495, 2014. ISSN 0927-0256. DOI:

https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.09.006. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025613005302>.

BABUŠKA, I. Error-bounds for finite element method. Numerische Mathematik, v. 16, n. 4, p. 322–333, 1995. ISSN 0945-3245. DOI: 10.1007/BF02165003.

BACHMAT, Y.; BEAR, J. On the concept and size of a representative elementary volume (rev). In: Advances in transport phenomena in porous media. Edição: J. BEAR e M. Y. CORAPCIOGLU. Dordrecht: Springer Netherlands, 1987. p. 3–20. ISBN 978-94-009-3625-6. DOI: 10.1007/978-94-009-3625-6_1. Disponível em: https://doi.org/10.1007/978-94-009-3625-6_1.

BATHE, K.J. Finite element procedures. [S. l.]: Klaus-Jürgen Bathe, 2006.

_____. The inf–sup condition and its evaluation for mixed finite element methods. Computers & Structures, v. 79, p. 243–252, 2001.

BECKER, R.; HANSBO, P. A simple pressure stabilization method for the Stokes equation. **Communications in Numerical Methods in Engineering**, v. 24, n. 11, p. 1421–1430, 2008. DOI: https://doi.org/10.1002/cnm.1041. eprint: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/cnm.1041. Disponível em:

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/cnm.1041>.

BENZI, M. Preconditioning techniques for large linear systems: a survey. Journal of Computational Physics, v. 182, n. 2, p. 418–477, 2002. ISSN 0021-9991. DOI: https://doi.org/10.1006/jcph.2002.7176. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0021999102971767>.

BLUNT., M. J. et al. Pore-scale imaging and modelling. Advances in Water Resources, v. 51, p. 197-216, 2013. 35th Year Anniversary Issue. ISSN 0309-1708. DOI: https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2012.03.003. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0309170812000528>.

BRAACK, M.; SCHIEWECK, F. Equal-order finite elements with local projection stabilization for the Darcy-Brinkman equations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 200, n. 9, p. 1126–1136, 2011. ISSN 0045-7825. DOI: https://doi.org/10.1016/j.cma.2010.06.034. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S004578251000201X>.

BREZZI, F. On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from lagrangian multipliers. **R.A.I.R.O. Analyse Numérique**, v. 8, R2, p. 129–151, 1974. DOI: 10.1051/m2an/197408R201291. Disponível em: https://doi.org/10.1051/m2an/197408R201291.

BRUCE, A.G. et al. A state-of-the-art review of neural networks for permeability prediction. **The APPEA Journal**, v. 40, p. 341–354, 2000. DOI: https://doi.org/10.1071/AJ99019. Disponível em:

<https://www.publish.csiro.au/aj/aj99019>.

CHEN, L. Fast solvers for Stokes equations. In. Disponível em: https://www.math.uci.edu/~chenlong/226/MGStokes.pdf>.

CLEVENGER, T. C.; HEISTER, T. Comparison between algebraic and matrix-free geometric multigrid for a Stokes problem on adaptive meshes with variable viscosity. **Numerical Linear Algebra with Applications**, v. 28, n. 5, e2375, 2021. DOI: https://doi.org/10.1002/nla.2375. Disponível em:

<https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nla.2375>.

COATES, G. R.; XIAO, L.; PRAMMER, M. G. Nmr logging: principles and applications. [S. l.]: Halliburton Energy Services Houston, 1999. v. 234.

CODINA, R.; BLASCO, J. A finite element formulation for the Stokes problem allowing equal velocity-pressure interpolation. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 143, n. 3, p. 373–391, 1997. ISSN 0045-7825. DOI: https://doi.org/10.1016/S0045-7825(96)01154-1. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782596011541>.

DONEA, J.; HUERTA, A. Finite element methods for flow problems. In: [s. l.]: John Wiley & Sons, Ltd, 2003. p. 33–78. ISBN 9780470013823. DOI:

https://doi.org/10.1002/0470013826.ch2.eprint:

https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/0470013826.ch2. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/0470013826.ch2>.

DRUMMOND, J. E.; TAHIR, M. I. Laminar viscous flow through regular arrays of parallel solid cylinders. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 10, n. 5, p. 515–540, 1984. ISSN 0301-9322. DOI:

https://doi.org/10.1016/0301-9322(84)90079-X. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/030193228490079X>.

DUNN, K.J.; BERGMAN, D.J.; LATORRACA, G.A. Nuclear magnetic resonance: petrophysical and logging applications. [S. l.]: Elsevier Science, 2002. (ISSN). ISBN 9780080537795. Disponível em:

<https://books.google.com.br/books?id=70mAcL2qi-0C>.

ELMAN, H.; SILVESTER, D.; WATHEN, A. Finite elements and fast iterative solvers: with applications in incompressible fluid dynamics. [S. l.]: Oxford University Press, jun. 2014. ISBN 9780199678792. DOI:

10.1093/acprof:oso/9780199678792.001.0001.

FERREIRA, L. P. et al. An image-based numerical homogenization strategy for the characterization of viscoelastic composites. **International Journal of Solids and Structures**, v. 267, p. 112142, 2023. ISSN 0020-7683. DOI:

https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2023.112142. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0020768323000392>.

FERZIGER, J.; PERIĆ, M. Computational methods for fluid dynamics. [S. l.]: Springer Berlin, Heidelberg, 2002. ISBN 978-3-642-56026-2. DOI: doi.org/10.1007/978-3-642-56026-2. Disponível em: https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-642-56026-2.

FONG D. C.; SAUNDERS, M. A. cg Versus minres: an empirical comparison. Sultan Qaboos University Journal for Science, v. 17, p. 44–62, 2012.

FORTIN, M.; GLOWINSKI, R. Augmented lagrangian methods: applications to the numerical solution of boundary-value problems. [S. l.]: Elsevier Science, 1983. (Studies in Mathematics and its Applications). ISBN 9780444866806. Disponível em: https://books.google.com.br/books?id=QslPAQAAIAAJ>.

GLOWINSKI, R. Finite element methods for incompressible viscous flow. In: NUMERICAL Methods for Fluids (Part 3). [S. l.]: Elsevier, 2003. v. 9. (Handbook of Numerical Analysis). p. 3–1176. DOI:

https://doi.org/10.1016/S1570-8659(03)09003-3. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1570865903090033>.

_____. Numerical methods for nonlinear variational problems. [S. l.]: Springer, 1984. (Springer Series in Computational Physics Series). ISBN 9783540124344.

HASHIN, Z.; SHTRIKMAN, S. On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity. **Journal of the Mechanics and Physics of Solids**, v. 10, n. 4, p. 335–342, 1962. ISSN 0022-5096. DOI:

https://doi.org/10.1016/0022-5096(62)90004-2. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022509662900042>.

HESTENES, M. R.; STIEFEL, E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. Journal of Research of the National Bureau of Standards, v. 49, p. 409–436, 1952.

HILL, R. Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, v. 11, n. 5, p. 357–372, 1963. ISSN 0022-5096. DOI: https://doi.org/10.1016/0022-5096(63)90036-X. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/002250966390036X>.

HUGHES, J.R.; FRANCA, L. P. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VII. The stokes problem with various well-posed boundary conditions: Symmetric formulations that converge for all velocity/pressure spaces. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 65, n. 1, p. 85–96, 1987. ISSN 0045-7825. DOI: https://doi.org/10.1016/0045-7825(87)90184-8. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0045782587901848>.

HUGHES, T.J.R. The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis. [S. l.]: Dover Publications, 2000. (Dover Civil and Mechanical Engineering). ISBN 9780486411811. Disponível em:

<https://books.google.com.br/books?id=yarmSc7ULRsC>.

HUGHES, T.J.R.; FRANCA, L.P.; BALESTRA, M. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: V. Circumventing the babuška-brezzi condition: a stable Petrov-Galerkin formulation of the stokes problem accommodating equal-order interpolations. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 59, n. 1, p. 85–99, 1986. ISSN 0045-7825. DOI:

https://doi.org/10.1016/0045-7825(86)90025-3. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0045782586900253>.

HUGHES, T.J.R.; FRANCA, L.P.; MALLET, M. A new finite element formulation for computational fluid dynamics: I. Symmetric forms of the compressible Euler and Navier-Stokes equations and the second law of thermodynamics. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 54, n. 2, p. 223–234, 1986. ISSN

0045-7825. DOI: https://doi.org/10.1016/0045-7825(86)90127-1. Disponível em: https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0045782586901271.

JOHN, V. Higher order finite element methods and multigrid solvers in a benchmark problem for the 3D Navier–Stokes equations. International Journal for Numerical Methods in Fluids, v. 40, n. 6, p. 775–798, 2002. DOI:

https://doi.org/10.1002/fld.377.eprint:

https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/fld.377. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/fld.377>.

KARIM, M. R.; KRABBENHOFT, K.; LYAMIN, A. V. Permeability determination of porous media using large-scale finite elements and iterative solver. International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics, v. 38, n. 10, p. 991–1012, 2014. DOI: https://doi.org/10.1002/nag.2245. eprint:

https://onlinelibrary.wiley.com/doi/pdf/10.1002/nag.2245. Disponível em: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/nag.2245>.

KENYON, W. E. et al. A three-part study of nmr longitudinal relaxation properties of water-saturated sandstones. **SPE Formation Evaluation**, v. 3, n. 03, p. 622–636, set. 1988. ISSN 0885-923X. DOI: 10.2118/15643-PA. eprint:

https://onepetro.org/FE/article-pdf/3/03/622/2637223/spe-15643-pa.pdf. Disponível em: <https://doi.org/10.2118/15643-PA>.

LADYZHENSKAYA, O. A. The mathematical theory of viscous incompressible flow. Gordon & Breach, 1969.

LAI, Y.; LIN, W.; PIERCE, D. Conjugate gradient and minimal residual methods for solving symmetric indefinite systems. Journal of Computational and Applied Mathematics, v. 84, n. 2, p. 243–256, 1997. ISSN 0377-0427. DOI:

https://doi.org/10.1016/S0377-0427(97)00127-1. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377042797001271>.

LANCZOS, C. Solution of systems of linear equations by minimized iterations. Journal of Research of the National Bureau of Standards, v. 49, p. 33, 1952.

LIATSIS, P. et al. Prediction of hydrocarbon reservoirs permeability using support vector machine. Mathematical Problems in Engineering, Hindawi Publishing Corporation, v. 2012, p. 670723, 2012. ISSN 1024-123X. DOI: 10.1155/2012/670723. Disponível em: https://doi.org/10.1155/2012/670723.

LOPES, P. C. F.; PEREIRA, ANDRÉ M. B. et al. A gpu implementation of the pcg method for large-scale image-based finite element analysis in heterogeneous periodic media. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, v. 399, p. 115276, 2022. ISSN 0045-7825. DOI:

https://doi.org/10.1016/j.cma.2022.115276. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782522003978>.

LOPES, P. C. F.; VIANNA, R. S. et al. Simulation toolkit for digital material characterization of large image-based microstructures. **Computational Materials Science**, v. 219, p. 112021, 2023. ISSN 0927-0256. DOI:

https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2023.112021. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0927025623000150>. MEHDIKHANI, M. et al. A dataset of micro-scale tomograms of unidirectional glass fiber/epoxy and carbon fiber/epoxy composites acquired via synchrotron computed tomography during in-situ tensile loading. **Data in Brief**, v. 34, p. 106672, 2021. ISSN 2352-3409. DOI: https://doi.org/10.1016/j.dib.2020.106672. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2352340920315511>.

MEIER, A.; BÄNSCH, E.; FRANK, F. Schur preconditioning of the Stokes equations in channel-dominated domains. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 398, p. 115264, 2022. ISSN 0045-7825. DOI:

https://doi.org/10.1016/j.cma.2022.115264. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0045782522003917>.

MOSTAGHIMI, P.; BLUNT, M. J.; BIJELJIC, B. Computations of absolute permeability on micro-CT images. Mathematical Geosciences, v. 45, n. 1, p. 103–125, 2013. ISSN 1874-8953. DOI: 10.1007/s11004-012-9431-4. Disponível em: https://doi.org/10.1007/s11004-012-9431-4.

PAIGE, C. C.; SAUNDERS, M. A. Solution of sparse indefinite systems of linear equations. **SIAM Journal on Numerical Analysis**, v. 12, n. 4, p. 617–629, 1975. DOI: 10.1137/0712047. Disponível em: https://doi.org/10.1137/0712047.

PEARSON, J. W.; PESTANA, J. Preconditioners for krylov subspace methods: an overview. **GAMM-Mitteilungen**, v. 43, n. 4, e202000015, 2020. DOI: https://doi.org/10.1002/gamm.202000015. Disponível em: https://onlinelibrary.wiley.com/doi/abs/10.1002/gamm.202000015.

PETERS, J.; REICHELT, V.; REUSKEN, A. Fast iterative solvers for discrete Stokes equations. **SIAM Journal on Scientific Computing**, v. 27, n. 2, p. 646–666, 2005. DOI: 10.1137/040606028.

PLASTINO, A. et al. Combining classification and regression for improving permeability estimations from 1H nmr relaxation data. Journal of Applied Geophysics, v. 146, p. 95–102, 2017. ISSN 0926-9851. DOI:

https://doi.org/10.1016/j.jappgeo.2017.09.003. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0926985117306055>.

REDDY, J. N. An introduction to the finite element method. [S. l.]: McGraw-Hill Education, 2005. ISBN 9780072466850. Disponível em:

<https://books.google.com.br/books?id=8gqnRwAACAAJ>.

RIBEIRO, M. C. et al. Image-based simulation of molecular diffusion on nmr pulsed-field gradient experiments: feasibility to estimate tortuosity and permeability of porous media. **Journal of Petroleum Science and Engineering**, v. 219, p. 111064, 2022. ISSN 0920-4105. DOI: https://doi.org/10.1016/j.petrol.2022.111064. Disponível em:

<https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0920410522009160>.

SAAD, Y. Iterative Methods for Sparse Linear Systems. Second. [S. l.]: SIAM, 2003. (Other titles in applied mathematics). ISBN 978-0-89871-534-7. DOI: 10.1137/1.9780898718003. Disponível em:

<http://www-users.cs.umn.edu/%5C~%7B%7Dsaad/IterMethBook%5C_2ndEd.pdf>.

SAAD, Y.; SCHULTZ, M. H. Gmres: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. **SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing**, v. 7, n. 3, p. 856–869, 1986. DOI: 10.1137/0907058.

EL-SEBAKHY, E. A. et al. Functional networks as a new data mining predictive paradigm to predict permeability in a carbonate reservoir. **Expert Systems with Applications**, v. 39, n. 12, p. 10359–10375, 2012. ISSN 0957-4174. DOI: https://doi.org/10.1016/j.eswa.2012.01.157. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0957417412001777>.

SEUFFERT, J. et al. Micro-scale permeability characterization of carbon fiber composites using micrograph volume elements. Frontiers in Materials, v. 8, 2021. ISSN 2296-8016. DOI: 10.3389/fmats.2021.745084.

SHENG, X. Y.; ZHI, X. X. A new numerical method for the analysis of the permeability anisotropy ratio. Chinese Physics, v. 11, p. 1009–1963, 2002.

SHEWCHUK, J. R. An introduction to the conjugate gradient method without the agonizing pain. USA, 1994.

SOUZA, A.; CARNEIRO, G; BOYD, A et al. Improving lab nmr petrophysical estimations by incorporating the surface relaxivity parameter. In: 30TH International Symposium of Society of Core Analysts, Snowmass, Colorado. SCA2016-047.[S. l.: s. n.], 2016.

[S. l.]. Permeability prediction improvement using 2d nmr diffusion-t2 maps.[S. l.: s. n.], jun. 2013. All Days. SPWLA-2013-U. eprint:

https://onepetro.org/SPWLAALS/proceedings-pdf/SPWLA13/All-SPWLA13/SPWLA-2013-U/1601823/spwla-2013-u.pdf.

STRANG, G. Krylov subspaces and conjugate gradients. Cambridge, USA, 2006. Last accessed in July 13th of 2023. Disponível em:

<https://math.mit.edu/classes/18.086/2006/am64.pdf>.

_____. The saddle point Stokes problem. Cambridge, USA, 2006. Disponível em: <https://math.mit.edu/classes/18.086/2006/am65.pdf>.

TEMAM, R. Navier-Stokes equations: theory and numerical analysis. [S. l.]: North-Holland, 1984. (Studies in Mathematics and its Applications). ISBN 9780444853080.

TUNGKAHOTARA, S. Parallel MPI/Fortran finite element symmetrical/unsymmetrical domain decomposition. 2008. Tese (Doutorado) – Old Dominion University. DOI: 10.25777/tqm7-mq28. Disponível em: <https://digitalcommons.odu.edu/cee_etds/42/>.

TUREK, S. Efficient solvers for incompressible flow problems: an algorithmic and computational approach. [S. l.]: Springer-Verlag, 1999. (Lecture Notes in Computational Science and Engineering). ISBN 9783540654339.

VIANNA, R. S. et al. Computing effective permeability of porous media with fem and micro-ct: an educational approach. **Fluids**, v. 5, n. 1, 2020. ISSN 2311-5521. DOI: 10.3390/fluids5010016. Disponível em:

<https://www.mdpi.com/2311-5521/5/1/16>.

VIVEROS, U. I.; PARRA, J. O. Artificial neural networks applied to estimate permeability, porosity and intrinsic attenuation using seismic attributes and well-log data. Journal of Applied Geophysics, v. 107, p. 45–54, 2014. ISSN 0926-9851. DOI: https://doi.org/10.1016/j.jappgeo.2014.05.010. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S092698511400144X>.

YANG, L. et al. Image-based simulations of absolute permeability with massively parallel pseudo-compressible stabilised finite element solver. **Computational Geosciences**, Springer, v. 23, p. 881–893, 2019.