

# Parallele Lösung großer Gleichungssysteme

Peter Bastian

Universität Heidelberg  
Interdisziplinäres Zentrum für Wissenschaftliches Rechnen  
Im Neuenheimer Feld 368, D-69120 Heidelberg  
email: [Peter.Bastian@iwr.uni-stuttgart.de](mailto:Peter.Bastian@iwr.uni-stuttgart.de)

March 31, 2009

# Outline

- 1 Elliptisches Modellproblem
- 2 Anwendungsbeispiel: Tracer Transport
- 3 Anwendungsbeispiel: Dichtegetriebene Grundwasserströmung
- 4 Anwendungsbeispiel: Mehrphasenströmung
- 5 Lösung linearer Gleichungssysteme
- 6 Inhalt der Vorlesung

# Contents

- 1 Elliptisches Modellproblem
- 2 Anwendungsbeispiel: Tracer Transport
- 3 Anwendungsbeispiel: Dichtegetriebene Grundwasserströmung
- 4 Anwendungsbeispiel: Mehrphasenströmung
- 5 Lösung linearer Gleichungssysteme
- 6 Inhalt der Vorlesung

# Elliptisches Modellproblem

Finde  $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  so dass

$$-\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \partial_{x_i} (K_{ij}(x) \partial_{x_j} u) = -\nabla \cdot \{K(x) \nabla u\} = f \quad \text{in } \Omega \subseteq \mathbb{R}^n$$

$$u = g \quad \text{on } \Gamma_D \subseteq \partial\Omega$$

$$-(K(x) \nabla u) \cdot \nu = j \quad \text{on } \Gamma_N = \partial\Omega \setminus \Gamma_D$$

- Diskretisierung  $\rightarrow$  großes lineares Gleichungssystem
- Stationäre Wärmeleitung,  $K(x)$ : Wärmeleitfähigkeit
- Elektrostatik
- Gravitationspotential
- Strömungsprozesse in porösen Medien; Grundwasserströmung
- Strömung inkompressibler Fluide, Navier-Stokes-Gleichungen
- Lineare Elastizität

# Contents

- 1 Elliptisches Modellproblem
- 2 Anwendungsbeispiel: Tracer Transport**
- 3 Anwendungsbeispiel: Dichtegetriebene Grundwasserströmung
- 4 Anwendungsbeispiel: Mehrphasenströmung
- 5 Lösung linearer Gleichungssysteme
- 6 Inhalt der Vorlesung

# Transport of a Tracer

- Darcy's law:

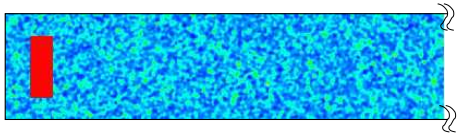
$$\nabla \cdot u = f \quad \text{in } \Omega, \quad u = -\frac{K}{\mu}(\nabla p - \rho g),$$

$K(x)$  is a geostatistically generated permeability field

- $\Omega$  covers about 1000 correlation lengths
- Transport of a conservative tracer:

$$\frac{\partial(\phi \rho C)}{\partial t} + \nabla \cdot j = q \quad \text{in } \Omega, \quad j = \rho C u - D \nabla C,$$

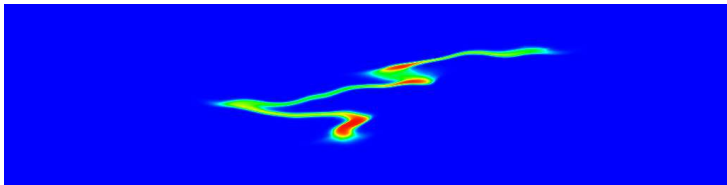
where  $D$  is (very) small (convection dominated transport)



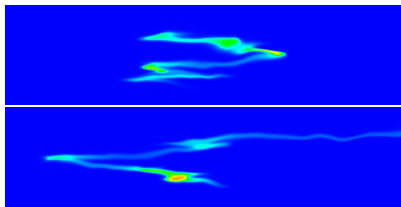
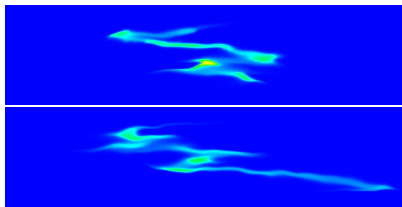
- Initial condition:

# Two-dimensional Results

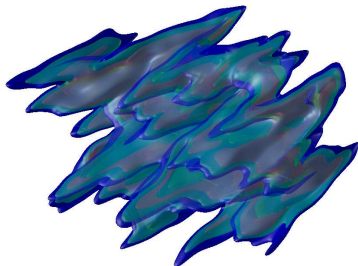
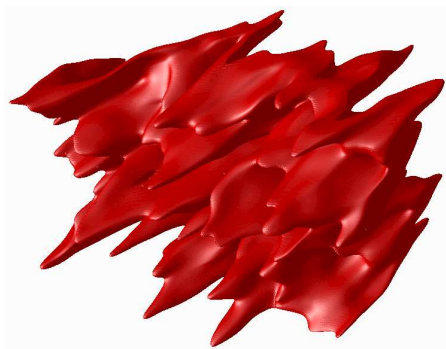
Concentration after about 100 correlation lengths:



Four other realizations (800 correlation lengths):



# Dreidimensionale Berechnung



Gitter:  $4604 \times 384 \times 256 \approx 4.5 \cdot 10^8$  Zellen,  $\approx 3 \cdot 10^4$  Zeitschritte

Zellzentrierte FV-Methode, Godunov-Verfahren 2ter Ordnung

Parallele Berechnung auf 384 Prozessoren

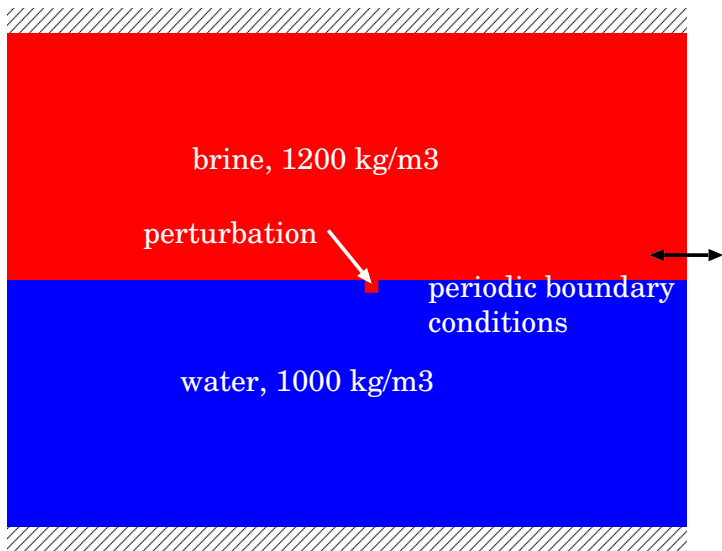
Visualisierung ist eine Herausforderung



# Contents

- 1 Elliptisches Modellproblem
- 2 Anwendungsbeispiel: Tracer Transport
- 3 Anwendungsbeispiel: Dichtegetriebene Grundwasserströmung**
- 4 Anwendungsbeispiel: Mehrphasenströmung
- 5 Lösung linearer Gleichungssysteme
- 6 Inhalt der Vorlesung

# Instabile Schichtung



# Dichtegetriebene Grundwasserströmung

Strömungsgleichung:

$$\nabla \cdot u + r = 0, \quad u = -\frac{K}{\mu}(\nabla p - \varrho(C)g), \quad \varrho(C) = C\varrho_b + (1-C)\varrho_0 \quad \text{in } \Omega$$

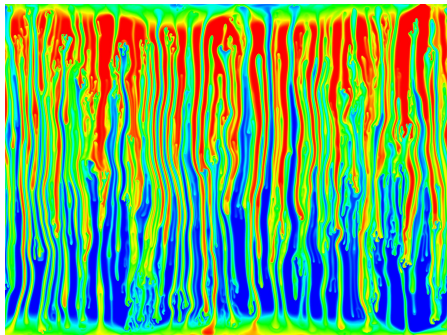
Transport des gelösten Salzes:

$$\frac{\partial(\Phi\varrho_0 C)}{\partial t} + \nabla \cdot j + q = 0, \quad j = \varrho_0 C u - \varrho_0 D(u)\nabla C$$

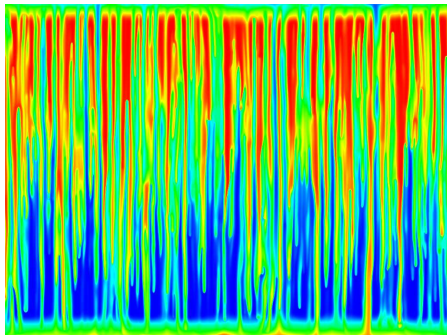
- Bussinesq Approximation
- Entkoppeltes Lösungsverfahren
- Zellzentrierte FV, Godunov-Verfahren 2ter Ordnung
- Mehrgitterlöser

# Simulationsergebnisse

2d



3d



Gittergröße:  $1024 \times 1024 \times 768$  Zellen, ca. 9000 Zeitschritte

30 Sekunden für eine Lösung der Druckgleichung

Anwendung: Biosanierung, Strömung um einen Salzstock

# Contents

- 1 Elliptisches Modellproblem
- 2 Anwendungsbeispiel: Tracer Transport
- 3 Anwendungsbeispiel: Dichtegetriebene Grundwasserströmung
- 4 Anwendungsbeispiel: Mehrphasenströmung**
- 5 Lösung linearer Gleichungssysteme
- 6 Inhalt der Vorlesung

## Zweiphasenströmung

Unbekannte: globaler Druck  $p$ , Sättigung  $S_n$  (fraktionale Flussformulierung):

$$\nabla \cdot u = q \quad \text{in } \Omega, \quad u = -\lambda(S_n)K (\nabla p - G(S_n))$$

$$\Phi \frac{\partial S_n}{\partial t} + \nabla \cdot j = q_n \quad \text{in } \Omega, \quad j = f_n(S_n)w(S_n, u) - h(S_n)K \nabla p_c(S_n)$$

mit

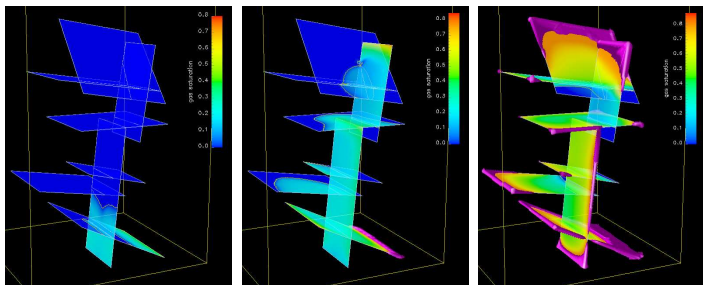
$$\lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}(S_\alpha)}{\mu_\alpha} \quad \lambda = \lambda_w + \lambda_n \quad G = \frac{\lambda_w \varrho_w + \lambda_n \varrho_n}{\lambda} g$$

$$f_n = \frac{\lambda_n}{\lambda} \quad h = \frac{\lambda_n \lambda_w}{\lambda} \quad w(S_n, u) = u - \lambda_w (\varrho_w - \varrho_n) K g$$

Elliptische Druckgleichung, hyperbolische/parabolische Sättigungsgleichung

Erweiterung auf Mehrphasen/Mehrkomponentenmodell

# Zweiphasenströmung in geklüftet porösen Medien



Anwendungen:

- Lagerung gefährlicher Stoffe
- Bodensanierung
- Erdölgewinnung
- CO<sub>2</sub>-Sequestrierung

# Contents

- 1 Elliptisches Modellproblem
- 2 Anwendungsbeispiel: Tracer Transport
- 3 Anwendungsbeispiel: Dichtegetriebene Grundwasserströmung
- 4 Anwendungsbeispiel: Mehrphasenströmung
- 5 Lösung linearer Gleichungssysteme**
- 6 Inhalt der Vorlesung



# Solution of Linear Systems

We want to solve

$$Ax = b$$

with  $A$  large and sparse

$A$  obtained from discretization and linearization of a PDE

Direct methods work always (slow)

Iterative methods (may) work fast

Multigrid is potentially a very fast method

Time complexity of typical solvers for a finite element problem

Constant number of entries/row

$N$  is the number of unknowns.

$$h = \sqrt[d]{N}, \quad \|r^k\| \leq \varepsilon \|r^0\|$$

Dimension	$d = 2$	$d = 3$
Gaussian elimination	$O(N^3)$	$O(N^3)$
Banded Gauss	$O(N^2)$	$O(N^{2.33})$
Nested Dissection	$O(N^{1.5})$	$O(N^2)$
GS, Jacobi	$O(N^2)$	$O(N^{1.67})$
CG, SOR	$O(N^{1.5})$	$O(N^{1.33})$
SSOR-CG	$O(N^{1.25})$	$O(N^{1.17})$
Multigrid	$O(N)$	$O(N)$

# Bewertung paralleler Algorithmen

## Laufzeiten

$T_{best}(N)$ : Laufzeit des *besten sequentiellen* Algorithmus in Abhängigkeit der Problemgröße  $N$

$T_P(N, P)$ : Laufzeit des zu untersuchenden parallelen Algorithmus in Abhängigkeit von Problemgröße  $N$  und Prozessorzahl  $P$

## Speedup

$$S(N, P) = \frac{T_{best}(N)}{T_P(N, P)}$$

Es gilt  $0 \leq S(N, P) \leq P$

## Effizienz

$$E(N, P) = \frac{S(N, P)}{P}$$

Es gilt:  $0 \leq E(N, P) \leq 1$

Skalierbarkeit:

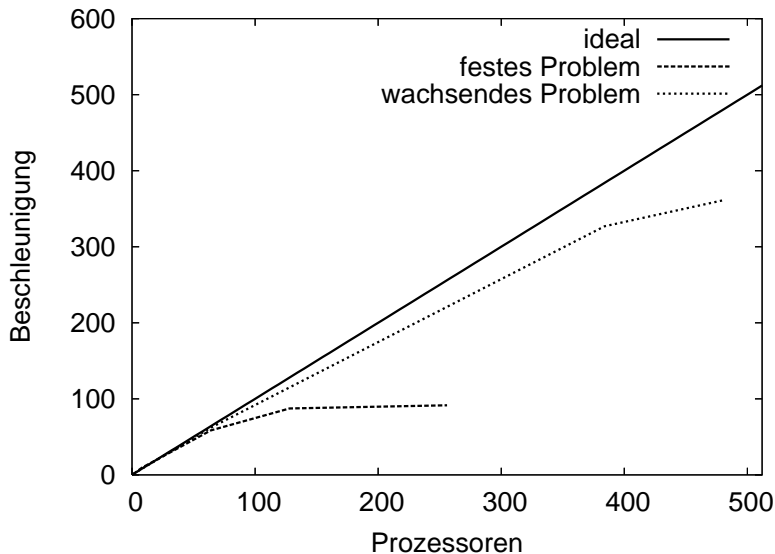
$N = const$

$N = N(P)$  s. t.  $T_P(N, P) = const$

$N = N(P)$  s. t.  $M(P) = const$

$N = N(P)$  s. t.  $E_P(N, P) = const$

# Speedup Mehrgitterlöser auf Helics



größtes Problem:  $10^{10}$  Unbekannte

# HELICS Cluster (one half)



# Contents

- 1 Elliptisches Modellproblem
- 2 Anwendungsbeispiel: Tracer Transport
- 3 Anwendungsbeispiel: Dichtegetriebene Grundwasserströmung
- 4 Anwendungsbeispiel: Mehrphasenströmung
- 5 Lösung linearer Gleichungssysteme
- 6 Inhalt der Vorlesung**

# Inhalt

- (Kurze) Einführung in die Numerik partieller Differentialgleichungen
- Teilraumkorrekturverfahren
- Überlappende Gebietszerlegungsverfahren
- geometrische und algebraische Mehrgitterverfahren
- Nichtüberlappende Gebietszerlegungsverfahren
  
- Algorithmisches Verständnis der Methoden und deren mathematische Analyse
- Praktische Übungen am Parallelrechner (Pool)
- [www.dune-project.org](http://www.dune-project.org)
- Smith, Bjorstad, Gropp: Domain Decomposition, Cambridge University Press, 1996.
- Toselli, Widlund: Domain Decomposition Methods — Algorithms and Theory.

# Weitere Veranstaltungen der AG ParRech

**Seminar “Scientific Software Development”** mit B. Paech, S. Sager

Vorbesprechung **heute** 13.15 - 14.15 Uhr in INF 348 R 013.

**Software-Praktikum Wissenschaftliches Rechnen**

Vorbesprechung **heute** 13.15 Uhr, IWR INF 368, R 420

**Seminar Modellierung und Simulation in den Neurowissenschaften**

S. Lang, Di; wöch; 14:00 - 16:00; INF 368 / 532

**Vorlesung Simulationswerkzeuge**

S. Lang, Mi; wöch; 14:00 - 16:00; INF 350 / OMZ R U013

**Vorlesung Numerik von Transportprozessen in porösen Medien**

O. Ippisch, Mi; wöch; 14:00 - 16:00; INF 350 / OMZ R U014