

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

October 12, 2012

Outline

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

Contents

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

Transport of a Tracer

- Darcy's law:

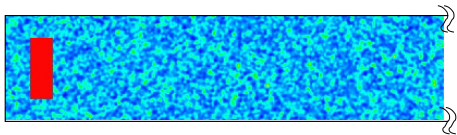
$$\nabla \cdot u = f \quad \text{in } \Omega, \quad u = -\frac{K}{\mu}(\nabla p - \rho g),$$

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

- Ω covers about 1000 correlation lengths
- Transport of a conservative tracer:

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

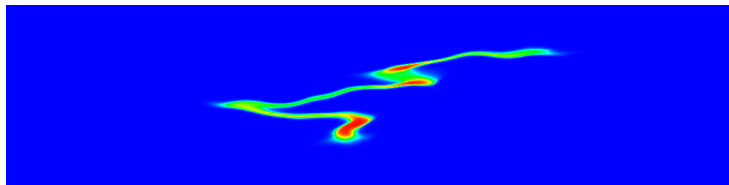
where D is (very) small (convection dominated transport)



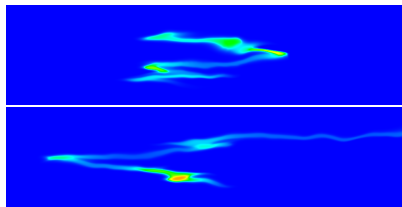
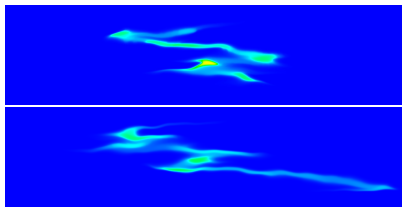
- Initial condition:

Two-dimensional Results

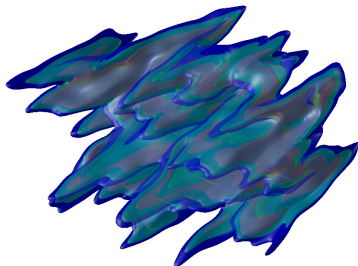
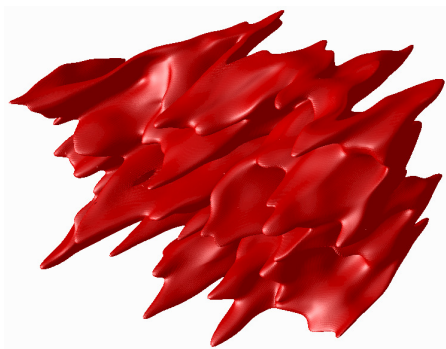
Concentration after about 100 correlation lengths:



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

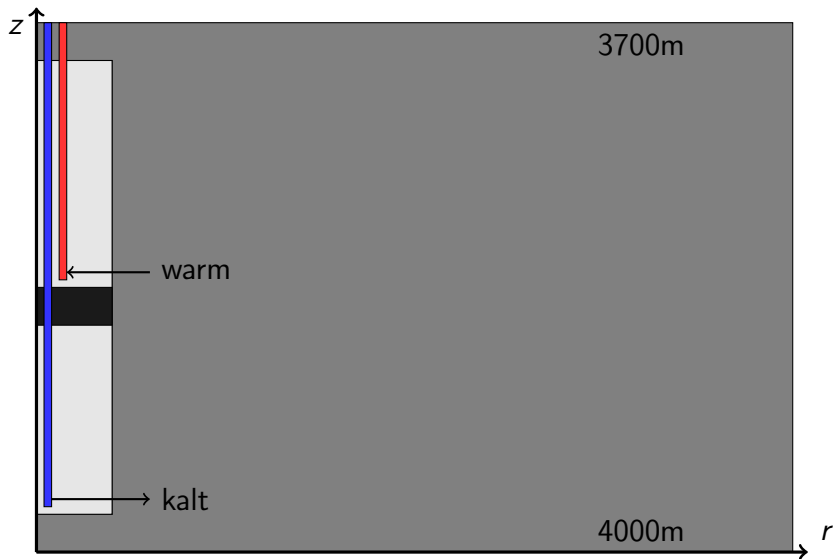
Parallele Berechnung auf 384 Prozessoren

Visualisierung ist eine Herausforderung

Contents

- 1 Elliptisches Modellproblem
- 2 Anwendungsbeispiel: Tracer Transport
- 3 Anwendungsbeispiel: Geothermie**
- 4 Anwendungsbeispiel: Dichtgetriebene Grundwasserströmung
- 5 Anwendungsbeispiel: Mehrphasenströmung
- 6 Lösung linearer Gleichungssysteme
- 7 DUNE
- 8 Inhalt der Vorlesung

Geothermal Power Plant



Geothermal Power Plant: Mathematical Model

Coupled system for water flow and heat transport:

$$\partial_t(\phi\rho_w) + \nabla \cdot \{\rho_w u\} = f \quad (\text{mass conservation})$$

$$u = \frac{k}{\mu}(\nabla p - \rho_w g) \quad (\text{Darcy's law})$$

$$\partial_t(c_e \rho_e T) + \nabla \cdot q = g \quad (\text{energy conservation})$$

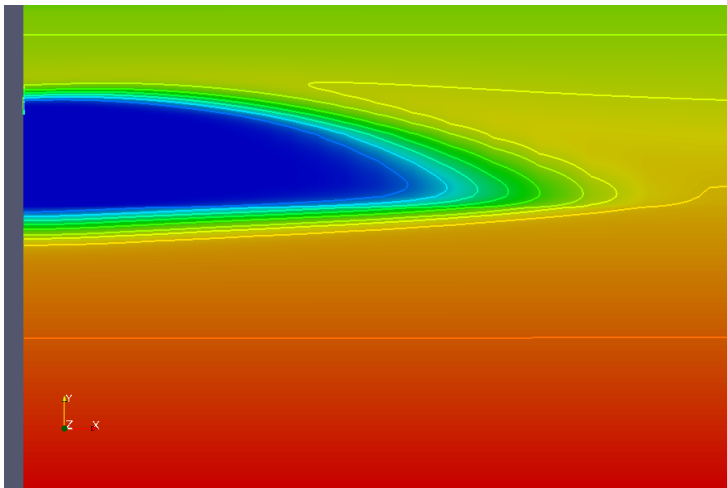
$$q = c_w \rho_w u T - \lambda \nabla T \quad (\text{heat flux})$$

Nonlinearity: $\rho_w(T)$, $\rho_e(T)$, $\mu(T)$

Permeability $k(x)$: 10^{-7} in well, 10^{-16} in plug

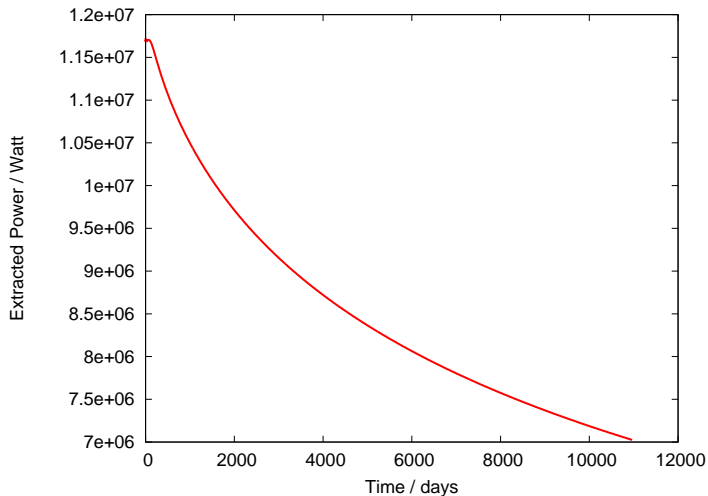
Space and time scales: $R=15$ km, $r_b=14$ cm, flow speed 0.3 m/s in well, power extraction: decades

Geothermal Power Plant: Results



Temperature after 30 years of operation

Geothermal Power Plant: Results

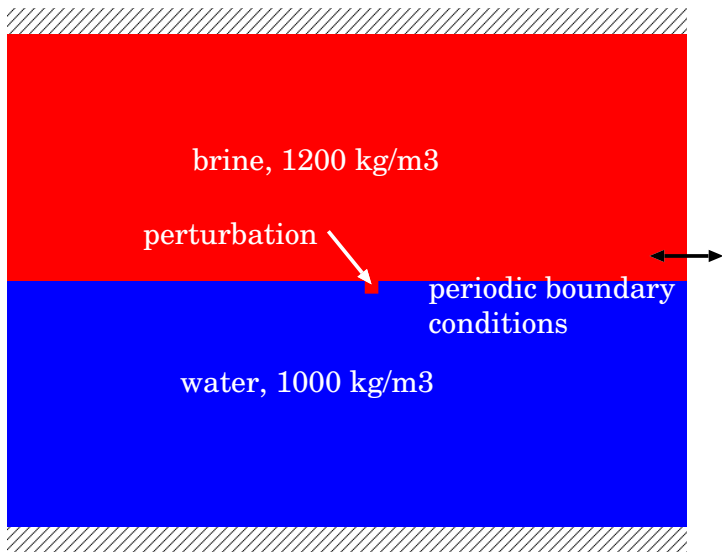


Extracted power over time

Contents

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

Instabile Schichtung



Dichtegetriebene Grundwasserströmung

Strömungsgleichung:

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

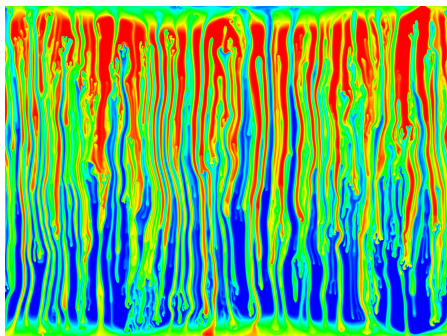
Transport des gelösten Salzes:

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

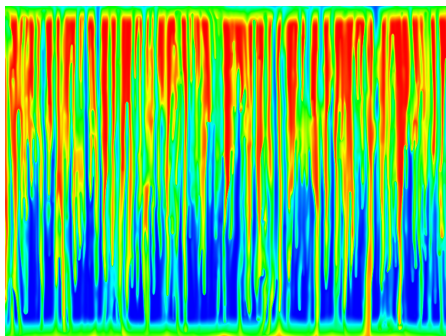
- Bussinesq Approximation
- Entkoppeltes Lösungsverfahren
- Zellzentrierte FV, Godunov-Verfahren 2ter Ordnung
- Mehrgitterlöser

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: Geothermie
- 4 Anwendungsbeispiel: Dichtegetriebene Grundwasserströmung
- 5 Anwendungsbeispiel: Mehrphasenströmung**
- 6 Lösung linearer Gleichungssysteme
- 7 DUNE
- 8 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

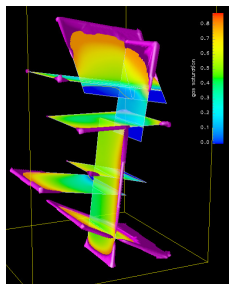
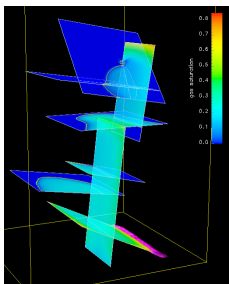
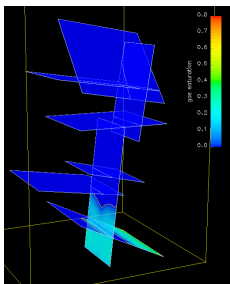
$$\lambda_\alpha = \frac{k_{r\alpha}(S_\alpha)}{\mu_\alpha} \quad \lambda = \lambda_w + \lambda_n \quad G = \frac{\lambda_w \varrho_w + \lambda_n \varrho_n}{\lambda} g$$

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

Elliptische Druckgleichung, hyperbolische/parabolische Sättigungsgleichung

Erweiterung auf Mehrphasen/Mehrkomponentenmodell

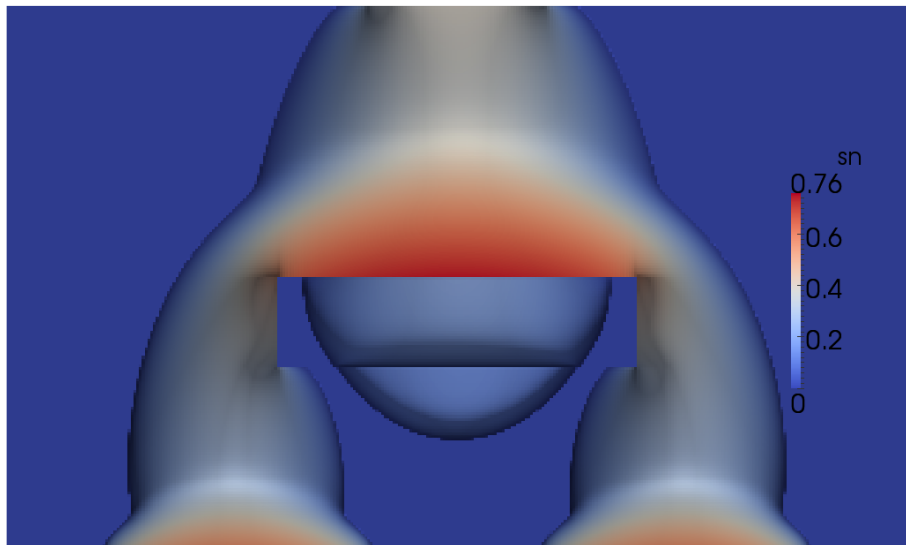
Zweiphasenströmung in geklüftet porösen Medien



Anwendungen:

- Lagerung gefährlicher Stoffe
- Boden sanierung
- Erdölgewinnung
- CO₂-Sequestrierung

DNAPL Infiltration



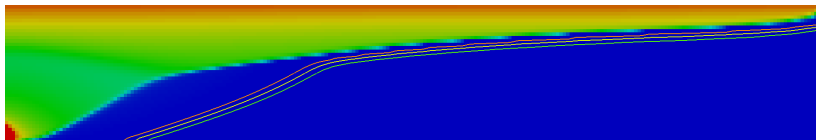
2d CO₂ Example



7 days, $\max(s_g) = 0.82$, $\max(x_w^g) = 0.022$

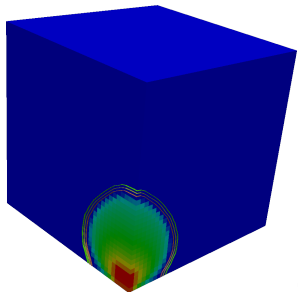


20 days, $\max(s_g) = 1$, $\max(x_w^g) = 0.02$

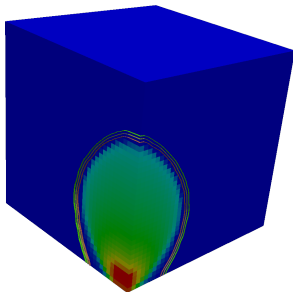


80 days, $\max(s_g) = 1$, $\max(x_w^g) = 0.02$

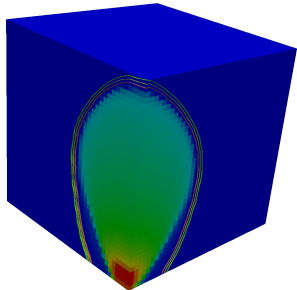
3d CO₂ Example



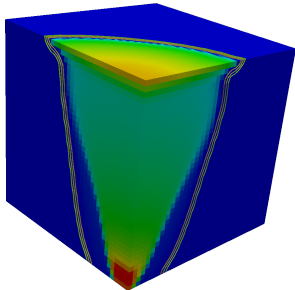
(2 days)



(5 days)

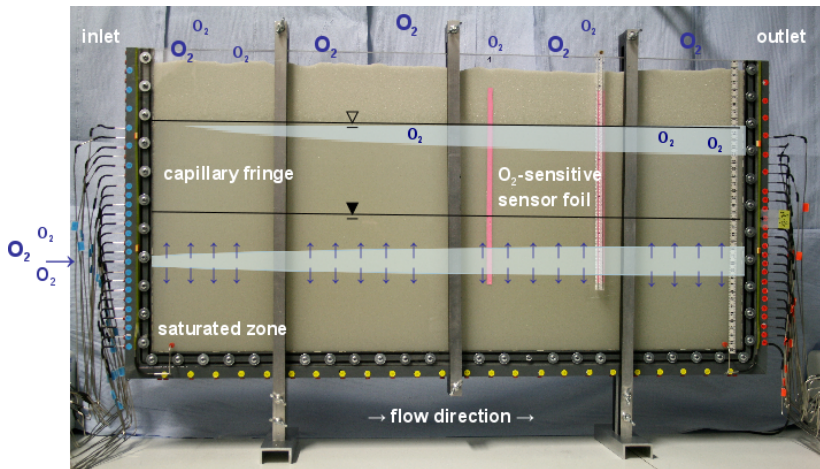


(8 days)



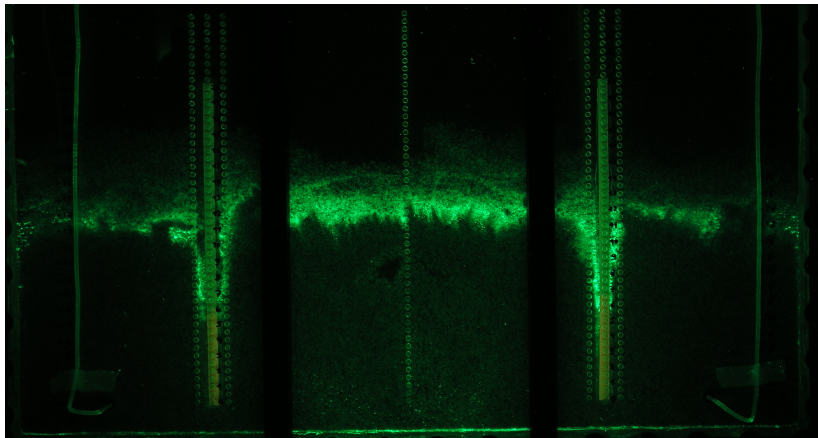
(12 days)

Bacterial Growth and Transport in Capillary Fringe



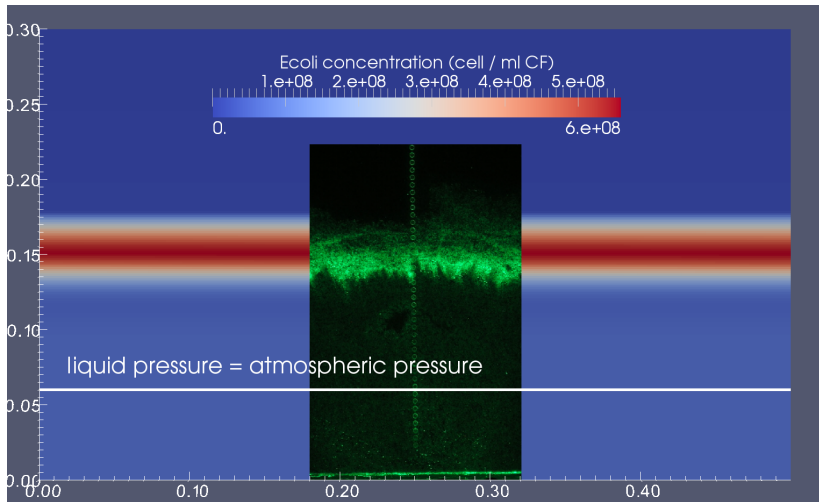
DFG Research Group 831 DyCap, Experiment by C. Haberer, Tübingen

Bacterial Growth and Transport in Capillary Fringe



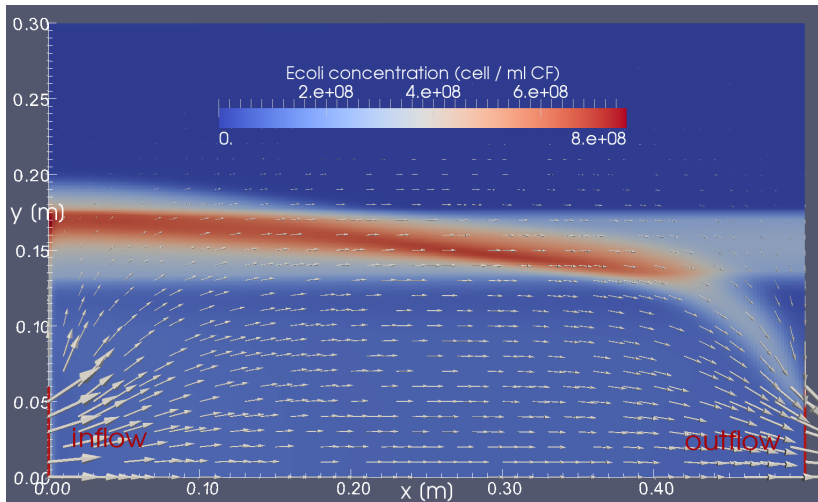
Experiment by Daniel Jost, KIT, Karlsruhe

Reactive Multiphase Simulation



Simulation by Pavel Hron

Reactive Multiphase Simulation



Simulation by Pavel Hron

Contents

- 1 Elliptisches Modellproblem
- 2 Anwendungsbeispiel: Tracer Transport
- 3 Anwendungsbeispiel: Geothermie
- 4 Anwendungsbeispiel: Dichtegetriebene Grundwasserströmung
- 5 Anwendungsbeispiel: Mehrphasenströmung
- 6 Lösung linearer Gleichungssysteme**
- 7 DUNE
- 8 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. $E_P(N, P) = const$

Parallel Computing is Ubiquitous

- Brick wall: energy, memory, ILP
- MacBook Pro 2.6 GHz quad-core i7, 16 GB 1600 MHz DDR 3
- 4 cores + hyper threading
- **Strong scaling**

method	procs	TASS	TB	TS	It	TIt
Q1 FEM	1	2.00	2.93	4.79	12	0.399
1024 ²	2	1.03	1.49	2.77	12	0.231
AMG	4	0.52	0.86	2.30	12	0.192
ovlp 1	8	0.51	0.63	2.22	12	0.185
DG(3) SIPG	1	0.84	-	46.48	234	0.198
128 ²	2	0.48	-	39.10	325	0.114
BCGS-SSOR	4	0.27	-	33.68	447	0.075
ovlp 5	8	0.25	-	32.84	451	0.073

AMG Weak Scaling Results

- AAMG and results presented is work of **Markus Blatt**
- **BlueGene/P** at Jülich Supercomputing Center
- $P \cdot 80^3$ degrees of freedom (5120^3 finest mesh), CCFV
- **Poisson problem**, 10^{-8} reduction
- AMG used as preconditioner in BiCGStab (2 V-Cycles!)
- **Scaling starts at 1**

procs	1/h	lev.	TB	TS	lt	Tlt	TT
1	80	5	19.86	31.91	8	3.989	51.77
8	160	6	27.7	46.4	10	4.64	74.2
64	320	7	74.1	49.3	10	4.93	123
512	640	8	76.91	60.2	12	5.017	137.1
4096	1280	10	81.31	64.45	13	4.958	145.8
32768	2560	11	92.75	65.55	13	5.042	158.3
262144	5120	12	188.5	67.66	13	5.205	256.2

Weak Scaling: 3D Compositional Two Phase Flow

- Results by **Rebecca Neumann**
- Helics IIIa: 4x8 (AMD6212@2.6GHz) nodes, Infiniband 40G
- Block aggregation-based AMG preconditioner
- $P \cdot 50^3 = P \cdot 250000$ degrees of freedom in space
- Run with **fixed wall clock time** 20500s (5.7h)

P	N	RT[s]	ADT[s]	TS	ANllt	ALinlt	Tlt[s]
1	$250 \cdot 10^3$	86400	288	310	3.3	5.7	0.6
8	$2 \cdot 10^6$	24430	140	176	3.8	5.6	1.1
64	$16 \cdot 10^6$	7892	68	116	4.0	5.7	1.2
512	$128 \cdot 10^6$	2690	33	82	4.3	6.2	1.5

$$\frac{\text{ADT}(1)}{\text{ADT}(512)} \cdot \frac{\text{ANllt}(512)}{\text{ANllt}(1)} \cdot \frac{\text{ALinlt}(512)}{\text{ALinlt}(1)} \cdot \frac{\text{Tlt}(512)}{\text{Tlt}(1)} = 8.7 \cdot 1.3 \cdot 1.09 \cdot 2.5 \approx 31$$

$$\frac{\text{RT}(1)}{\text{RT}(512)} \approx 32$$

Contents

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

DUNE Software Framework

Distributed and **U**nified **N**umerics **E**nvironment

**Software for the numerical solution of PDEs
with grid based methods.**

Goals:

- Flexibility: Meshes, discretizations, adaptivity, solvers.
- Efficiency: Pay only for functionality you need.
- Parallelization.
- Reuse of existing code.
- Enable team work through standardized interfaces.

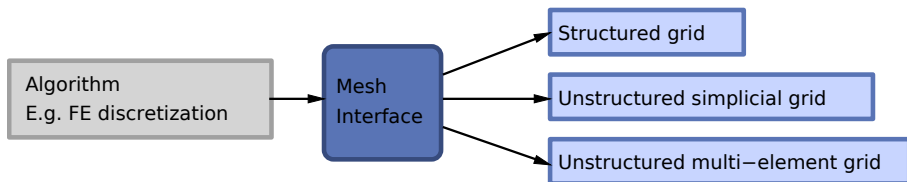
Background

- Developed since 2002 by groups at
 - ▶ Free University of Berlin: O. Sander and R. Kornhuber
 - ▶ Freiburg University: M. Nolte and D. Kröner
 - ▶ NCAR Boulder: R. Klöfkorn
 - ▶ Warwick: A. Dedner
 - ▶ Münster University: C. Engwer, M. Ohlberger
 - ▶ Heidelberg: P. Bastian, M. Blatt, J. Fahlke
- Available under GNU LGPL license with linking exception.
- Platform for “Open Reservoir Simulator” (U Stuttgart, U Bergen, SINTEF, StatOil, ...)
- DUNE courses given every spring (at least).

DUNE <http://www.dune-project.org/>

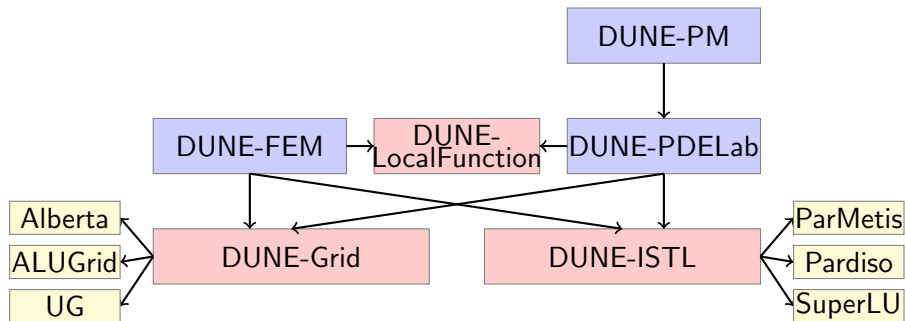
Programming With Concepts

- Separation of data structures and algorithms



- Realization with generic programming (templates) in C++.
- Static polymorphism:
 - ▶ Inlining of “small” methods.
 - ▶ Allows global optimizations.
 - ▶ Interface code is removed at compile-time.
- Template Meta Programs: compile-time algorithms.
- Standard Template Library (STL) is a prominent example.

The DUNE World



Contents

- 1 Elliptisches Modellproblem
- 2 Anwendungsbeispiel: Tracer Transport
- 3 Anwendungsbeispiel: Geothermie
- 4 Anwendungsbeispiel: Dichtegetriebene Grundwasserströmung
- 5 Anwendungsbeispiel: Mehrphasenströmung
- 6 Lösung linearer Gleichungssysteme
- 7 DUNE
- 8 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
- Smith, Bjorstad, Gropp: Domain Decomposition, Cambridge University Press, 1996.
- Toselli, Widlund: Domain Decomposition Methods — Algorithms and Theory.