



Universidad Nacional Autónoma de México ***Instituto de Geofísica***

Tesis

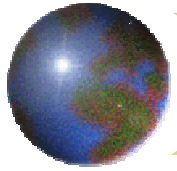
“Métodos de Descomposición de Dominio en el Espacio de Vectores Derivados y su Implementación Computacional en Paralelo”

Presenta:

Antonio Carrillo Ledesma

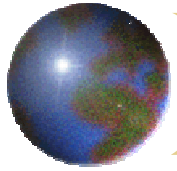
Para Obtener el Grado de Doctor en Ciencias de la Tierra
(Modelación Matemática y Computacional de Sistemas Terrestres)

Tutor: Dr. Ismael Herrera Revilla

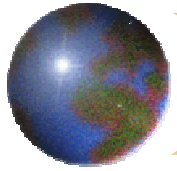


Contenido

- ✚ Motivación
- ✚ Objetivos
- ✚ Conceptos básicos
- ✚ Esquema DVS
- ✚ Formulaciones desarrolladas en DVS
- ✚ Resultados y análisis de rendimiento
- ✚ Ventajas algorítmicas y computacionales
- ✚ Conclusiones
- ✚ Trabajo Futuro



Motivación

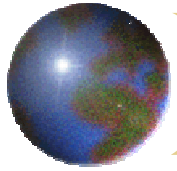


Motivación ...

La modelación de sistemas continuos en Ciencia e Ingeniería está basada principalmente en la solución numérica de una ecuación diferencial parcial o sistemas de tales ecuaciones.

La solución de los sistemas que gobiernan tales modelos tienen un gran número de grados de libertad y a pesar de los constantes avances en cómputo, un sólo procesador no puede resolver dichos problemas.

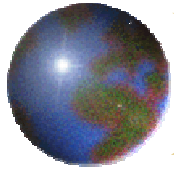
Los métodos de discretización tradicionales como FEM, FDM y FVM generan un único gran sistema algebraico. Y su solución numérica no siempre es lo eficiente que se necesita al implementarse en equipos paralelos de alto rendimiento como clusters.



Motivación ...

Los métodos de descomposición de dominio se basan en la suposición de que un dominio $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ se puede particionar en E subdominios Ω_i entre los cuales puede o no existir traslape. De esta manera, se puede clasificar de forma burda a los métodos de descomposición de dominio como aquellos en que: existe traslape y en los que no existe.

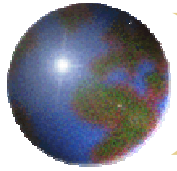
En los que no existe traslape, el problema es reformulado en términos de cada subdominio –mediante el uso de algún método de discretización- obteniendo una familia de subproblemas de tamaño reducido independientes entre sí, y que están acoplados a través de la solución de la interfase –la cual es desconocida- de los subdominios.



Motivación ...

Dos de los algoritmos más usados en la actualidad de los métodos de descomposición de dominio sin traslape son: FETI (Finite Element Tearing and Interconnect) y BDDC (Balancing Domain Decomposition by Constraints). Ambos algoritmos inician con la discretización de la ecuación diferencial parcial y en ellos los grados de libertad están asociados con las funciones base usadas en la discretización.

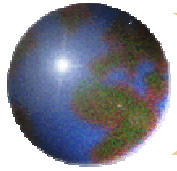
El algoritmo FETI es un método indirecto que usa multiplicadores de Lagrange, por otro lado, el algoritmo BDDC es un método directo que no usa multiplicadores de Lagrange.



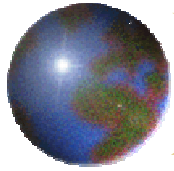
Motivación ...

En el presente trabajo se introduce una formulación integradora “Derived-Vector Space” (DVS) que no usa multiplicadores de Lagrange, generando cuatro algoritmos preconditionados y cuatro no preconditionados, que son igualmente definidos cuando los problemas son simétricos, no simétricos o indefinidos. En dicha formulación quedan incorporados los algoritmos FETI-DP y BDDC.

De esta forma, los métodos de descomposición de dominio en conjunción con el cómputo en paralelo permiten atacar eficientemente problemas que involucran un gran número de grados de libertad en los cuales se logra una alta eficiencia computacional al usar equipos paralelos de alto desempeño.

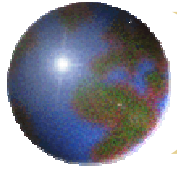


Objetivos

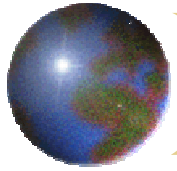


Objetivos ...

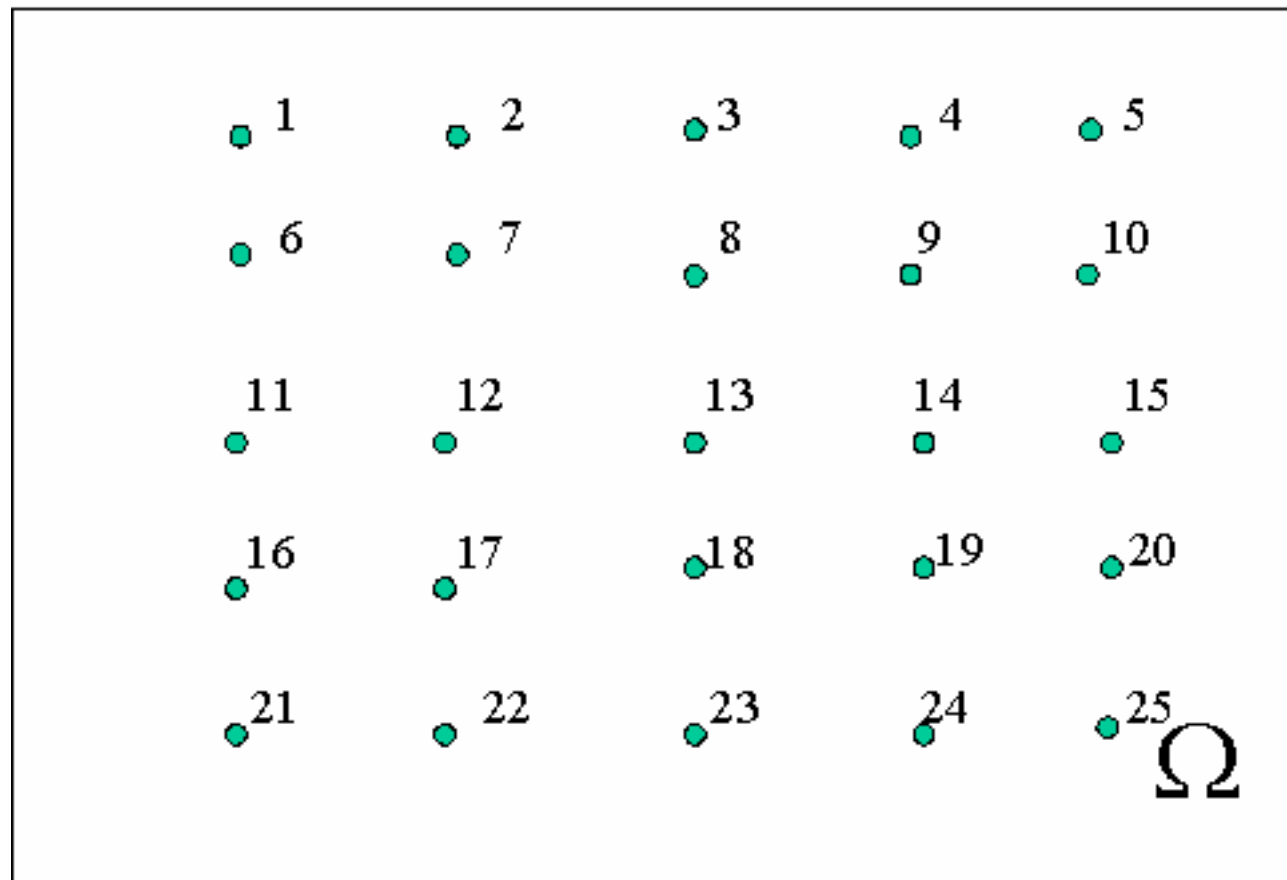
- ✚ Presentar el marco teórico del método de descomposición de dominio en el espacio de vectores derivados DVS.
- ✚ Mostrar como el esquema es igualmente aplicable a matrices simétricas, no simétricas e indefinidas (i.e. no positivas y no negativas definidas).
- ✚ Mostrar el desempeño computacional de los ocho algoritmos iterativos, de los cuales 4 son no preconditionados y 4 preconditionados.
- ✚ Mostrar que la implementación en paralelo es escalable, alcanzando una alta eficiencia computacional en equipos paralelos de alto desempeño computacional.

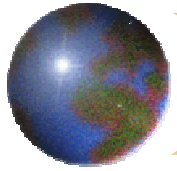


Conceptos Básicos



Conceptos Básicos ...





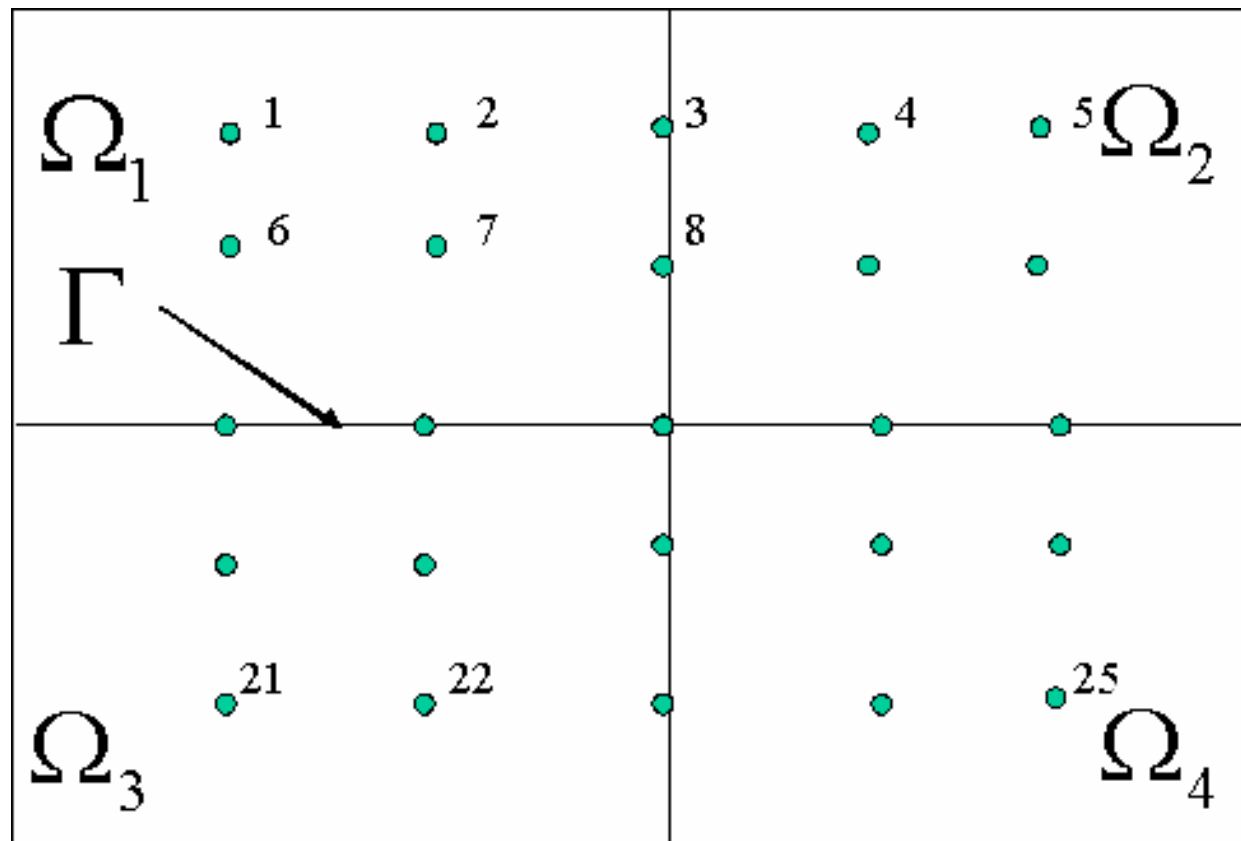
Conceptos Básicos ...

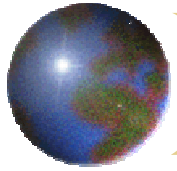
I son nodos "interiores" y Γ son nodos de frontera interior

$\Pi \subset \Gamma$ son nodos "primales"

y

$\Delta \equiv \Gamma - \Pi$ son nodos "duales"





Conceptos Básicos ...

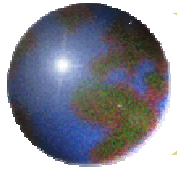
El algoritmo para BDDC está dado por el sistema virtual

$$\underline{\underline{M}}^{-1} \underline{\underline{S}} \underline{u} = \underline{\underline{M}}^{-1} \underline{f}$$

donde

$$\underline{\underline{S}} = \sum_{i=1}^N \underline{\underline{R}}_i^T \underline{\underline{S}}_i \underline{\underline{R}}_i \quad \text{y} \quad \underline{\underline{M}}^{-1} = \sum_{i=1}^N \underline{\underline{R}}_i^T \underline{\underline{S}}_i^{-1} \underline{\underline{R}}_i$$

tal que, $\underline{\underline{R}}_i : \Gamma \rightarrow \Gamma_i$ y $\underline{\underline{\bar{R}}}_i : \Gamma \rightarrow \Gamma_i$, además $\underline{\underline{\bar{R}}}_i = \underline{\underline{D}}_i \underline{\underline{R}}_i$



Conceptos Básicos ...

El complemento de Schur está dado por

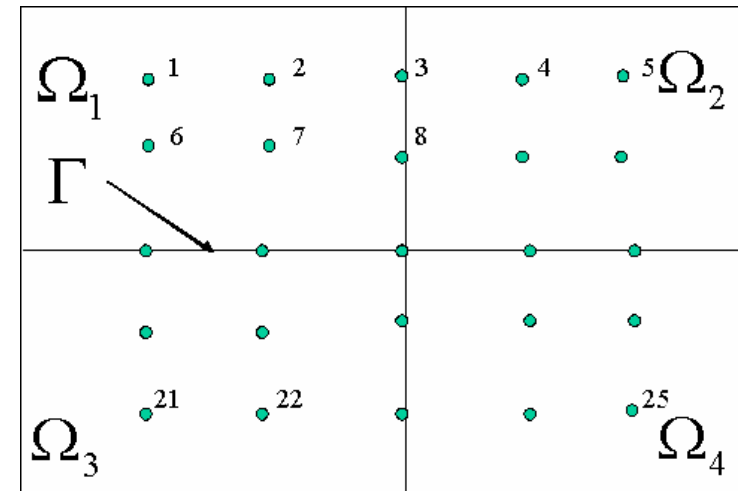
$$\underline{\underline{S}} = \sum_{i=1}^N \underline{\underline{R}}_i^T \underline{\underline{S}}_i \underline{\underline{R}}_i \quad \text{donde} \quad \underline{\underline{S}}_i = \underline{\underline{A}}_{\Gamma\Gamma}^i - \underline{\underline{A}}_{\Gamma I}^i \left(\underline{\underline{A}}_{II}^i \right)^{-1} \underline{\underline{A}}_{I\Gamma}^i$$

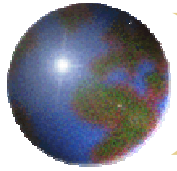
sin embargo

$$\left(\underline{\underline{S}} \right)^{-1} \neq \sum_{i=1}^N \left(\underline{\underline{R}}_i^T \underline{\underline{S}}_i \underline{\underline{R}}_i \right)^{-1}$$

porque los rangos de $\underline{\underline{R}}_i^T \underline{\underline{S}}_i \underline{\underline{R}}_i$ y $\underline{\underline{R}}_j^T \underline{\underline{S}}_j \underline{\underline{R}}_j$ cuando $i \neq j$ no son disjuntos.

Donde Γ es la interfase entre subdominos y $\Gamma_i \subset \Gamma$, mientras que $\underline{\underline{R}}_i : \Gamma \rightarrow \Gamma_i$ es el operador de restricción, tal que $\underline{\underline{R}}_i = \underline{\underline{D}}_i \underline{\underline{R}}_i$.





Conceptos Básicos ...

El algoritmo FETI-DP, esta dado por el sistema virtual

$$\underline{\underline{M}}^{-1} \underline{\underline{F}} \underline{\lambda} = \underline{\underline{M}}^{-1} \underline{d}$$

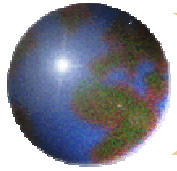
donde

$$\underline{\underline{F}} = \underline{\underline{B}}_{\Delta} \left(\underline{\underline{S}} \right)^{-1} \left(\underline{\underline{B}}_{\Delta} \right)^T, \quad \underline{d} = \underline{\underline{B}}_{\Delta} \left(\underline{\underline{S}} \right)^{-1} \underline{\tilde{f}}_{\Delta}$$

cuyo preconditionador más básico esta dado por

$$\underline{\underline{M}}^{-1} = \underline{\underline{B}}_{D,\Delta} \underline{\underline{S}}_{\Delta} \left(\underline{\underline{B}}_{D,\Delta} \right)^T = \sum_{i=1}^E \underline{\underline{D}}_{\Delta}^i \underline{\underline{B}}_{\Delta}^i \underline{\underline{S}}_{\Delta}^i \left(\underline{\underline{B}}_{\Delta}^i \right)^T \underline{\underline{D}}_{\Delta}^i$$

$$\underline{\underline{B}}_{D,\Delta} = \left[\underline{\underline{D}}_{\Delta}^1 \underline{\underline{B}}_{\Delta}^1, \dots, \underline{\underline{D}}_{\Delta}^E \underline{\underline{B}}_{\Delta}^E \right]$$



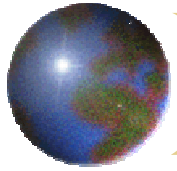
Conceptos Básicos ...

Una vez resuelto el sistema virtual para $\underline{\lambda}$ la solución en la frontera interior es dada por

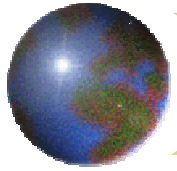
$$\underline{u}_{\Delta} = (\underline{\tilde{S}})^{-1} \left(\underline{f}_{\Delta} - (\underline{B}_{\Delta})^T \underline{\lambda} \right)$$

y la solución en los nodos interiores por

$$\underline{u}_I^i = \left(\underline{A}_{II}^i \right)^{-1} \left(\underline{b}_I^i - \underline{A}_{I\Gamma}^i \underline{u}_{\Delta}^i \right)$$



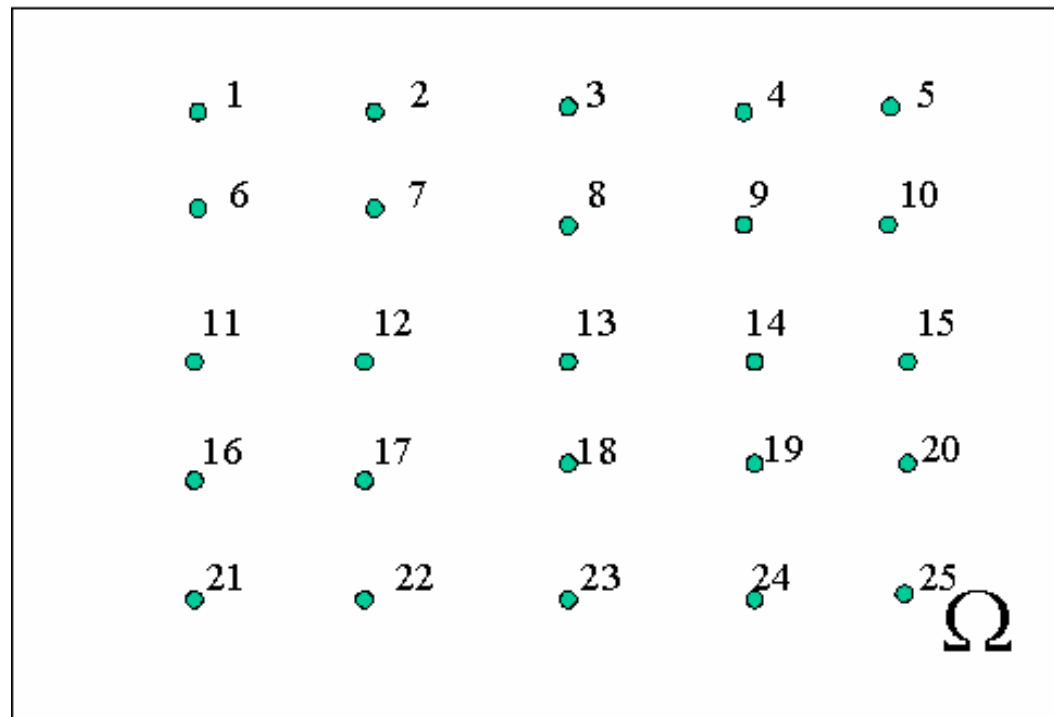
Esquema DVS-DDM

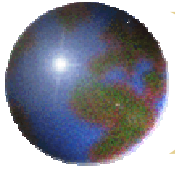


Conceptos Básicos ...

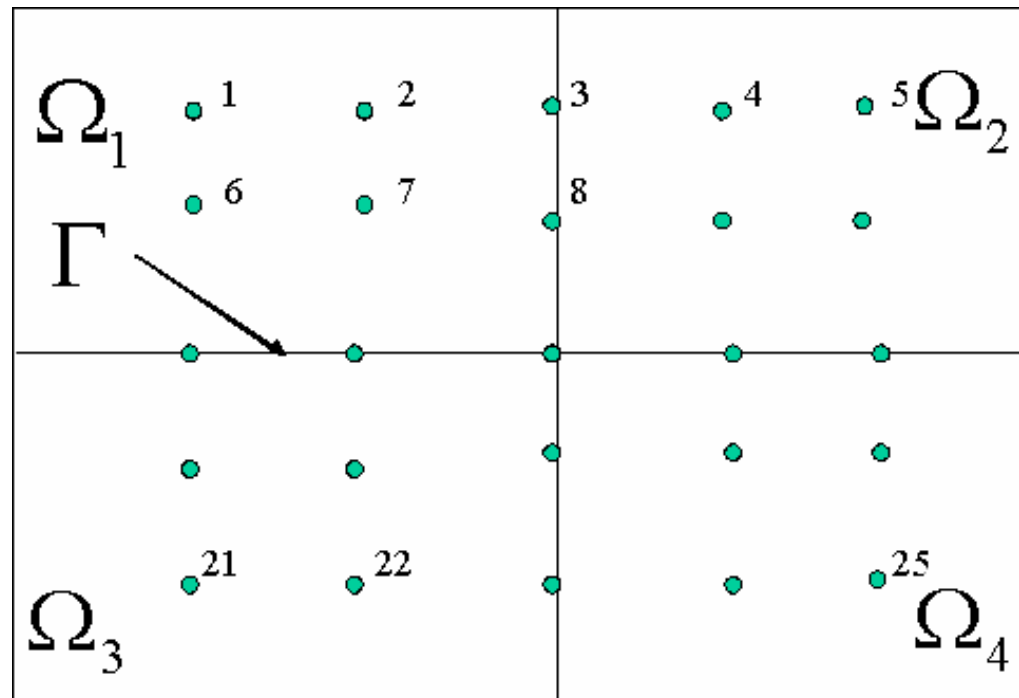
Problema original

$$\underline{\underline{\hat{A}\hat{u}}} = \underline{\hat{f}}$$



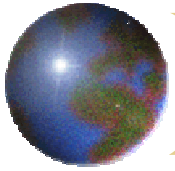


Conceptos Básicos ...



Un inconveniente es que $\Omega_\alpha \cap \Omega_\beta \neq \emptyset$

Cuando $\alpha \neq \beta$



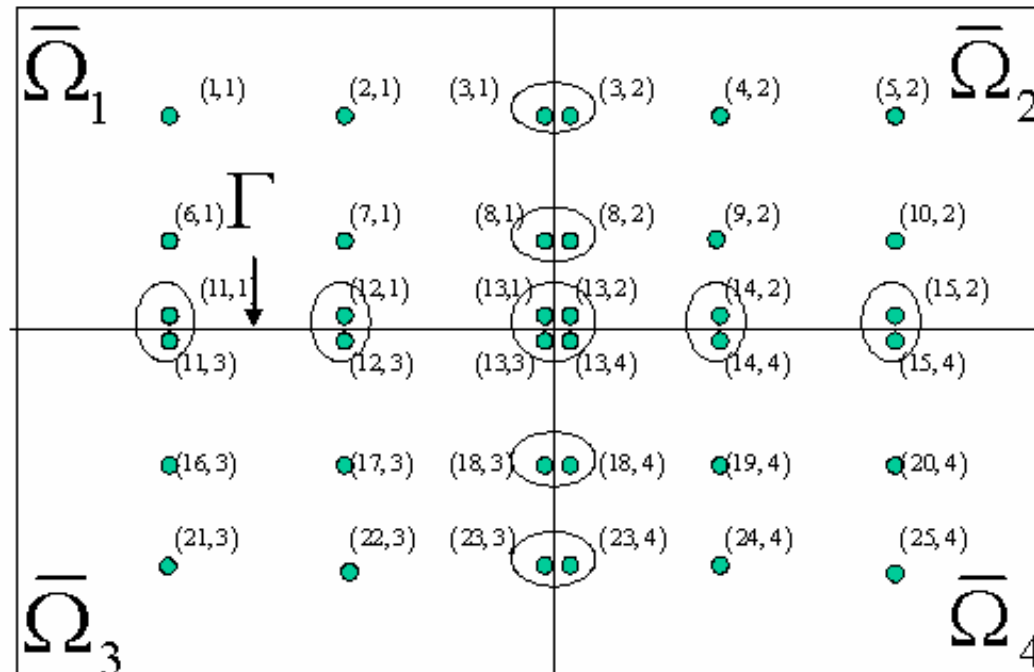
Esquema DVS-DDM ...

$$\Omega \rightarrow \bar{\Omega}$$

$$25 \rightarrow 36$$

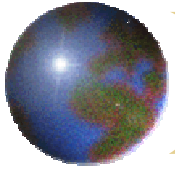
$$\Gamma \rightarrow \Gamma$$

$$9 \rightarrow 20$$

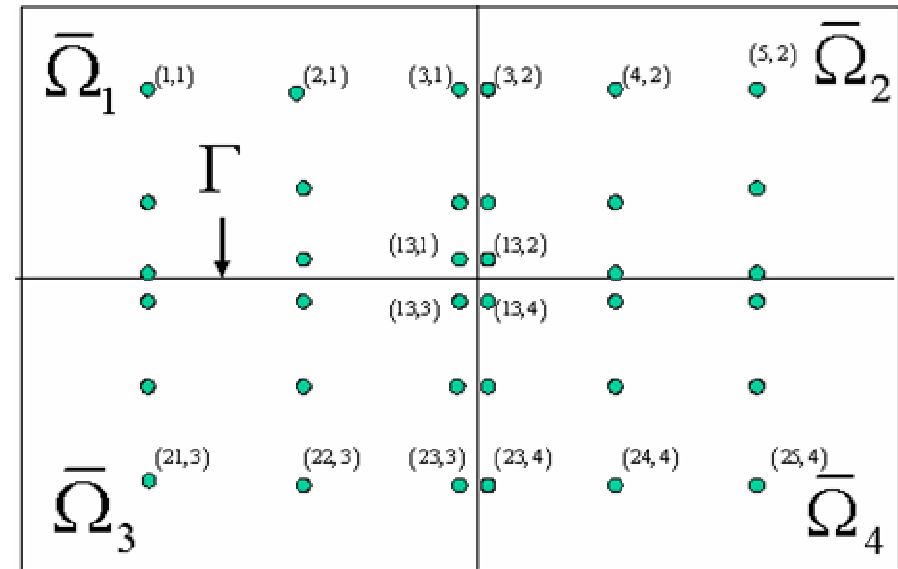


$$\Omega \equiv \{ \underline{p} = (p, \alpha) \mid p \in \Omega_\alpha \},$$

$$\bar{\Omega}_\alpha \equiv \{ \underline{p} = (p, \alpha) \mid p \in \bar{\Omega}_\alpha \}, \quad \alpha = 1, \dots, 4$$



Esquema DVS-DDM ...

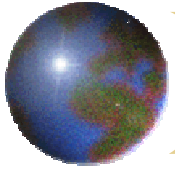


Ω es el conjunto de nodos "originales"
 $\bar{\Omega}$ es el conjunto de nodos "derivados"

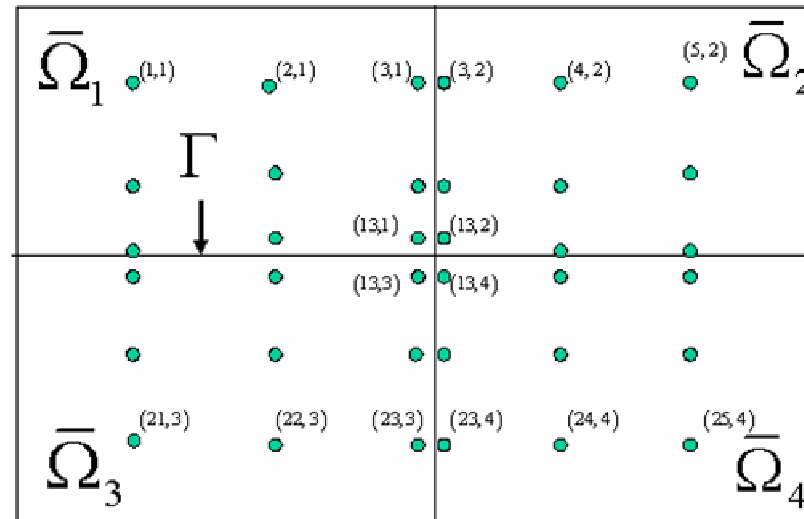
$\{\Omega_1, \dots, \Omega_E\}$ es una "cubierta" de Ω ; i.e., $\Omega = \bigcup_{\alpha=1}^E \Omega_\alpha$

$\{\bar{\Omega}_1, \dots, \bar{\Omega}_E\}$ es una "partición" de $\bar{\Omega} \equiv \bigcup_{\alpha=1}^E \bar{\Omega}_\alpha$

y $\bar{\Omega}_\alpha \cap \bar{\Omega}_\beta = \emptyset$, siempre que $\alpha \neq \beta$



Esquema DVS-DDM ...



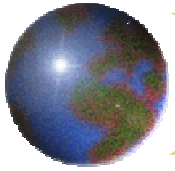
I son nodos "interiores" y Γ son nodos de frontera interior

$\pi \subset \Gamma$ son nodos "primales" y

$\Delta \equiv \Gamma - \pi$ son nodos "duales"

Entonces $\bar{\Omega} = I \cup \Gamma = I \cup \pi \cup \Delta = \Pi \cup \Delta$

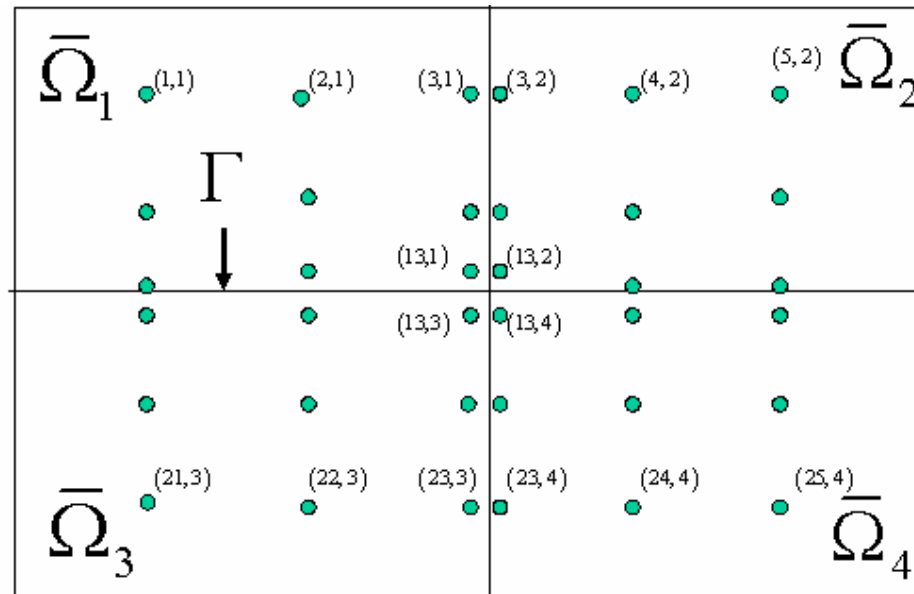
$\Pi \equiv I \cup \pi$



Esquema DVS-DDM ...

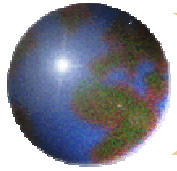
Problema original

$$\underline{\underline{\hat{A}}}\underline{\underline{\hat{u}}} = \underline{\underline{\hat{f}}}$$



Problema en el espacio derivado

$$\underline{\underline{a}}\underline{\underline{A}}\underline{\underline{u}}' = \underline{\underline{\bar{f}}} \text{ y } \underline{\underline{j}}\underline{\underline{u}}' = 0, \text{ donde } \underline{\underline{\bar{f}}} = \underline{\underline{\bar{f}}}_{\Pi} + \underline{\underline{\bar{f}}}_{\Delta}, \underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi} & \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta} \\ \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi} & \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta} \end{pmatrix}$$



Esquema DVS-DDM ...

Problema transformado

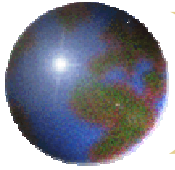
$$\underline{\underline{a}} \underline{\underline{A}}^t \underline{u}' = \underline{f} \text{ donde } \underline{\underline{j}} \underline{u}' = 0$$

Usando una formulación tipo el Complemento de Schur

$$\underline{\underline{S}} = \underline{\underline{A}}_{\Delta\Delta}^t - \underline{\underline{A}}_{\Delta\Pi}^t \left(\underline{\underline{A}}_{\Pi\Pi}^t \right)^{-1} \underline{\underline{A}}_{\Pi\Delta}^t$$

entonces

$$\underline{\underline{a}} \underline{\underline{S}} \underline{u}_{\Delta} = \underline{f}_{\Delta} \text{ donde } \underline{\underline{j}} \underline{u}_{\Delta} = 0$$

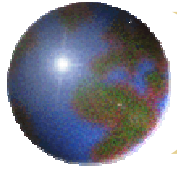


Esquema DVS-DDM ...

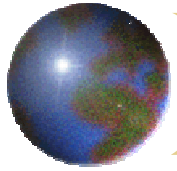
$$\underline{\underline{A}}^\alpha : \overline{\underline{\Omega}}_\alpha \rightarrow \overline{\underline{\Omega}}_\alpha$$

$$\underline{\underline{A}}^t = \sum_{\alpha=1}^E \underline{\underline{A}}_\alpha \quad y \quad \left(\underline{\underline{A}}^t \right)^{-1} = \sum_{\alpha=1}^E \left(\underline{\underline{A}}_\alpha \right)^{-1}$$

$$\underline{\underline{S}} = \sum_{\alpha=1}^E \underline{\underline{S}}_\alpha \quad y \quad \left(\underline{\underline{S}} \right)^{-1} = \sum_{\alpha=1}^E \left(\underline{\underline{S}}_\alpha \right)^{-1}$$



Formulaciones desarrolladas en DVS



Formulaciones desarrolladas en DVS ...

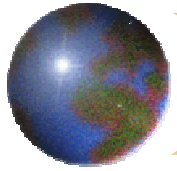
Las formulaciones no preconditionadas son:

- Formulación Dirichlet-Dirichlet

$$\left\{ \underline{\underline{a}} \underline{\underline{S}} \underline{\underline{u}}_{\Delta} = \underline{\underline{f}}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{j}} \underline{\underline{u}}_{\Delta} = 0, \quad (\text{PRIMAL\#1}) \right.$$

- Formulación Neumann-Neumann

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{j}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{\lambda}}_{\Delta} = \underline{\underline{j}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{f}}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{a}} \underline{\underline{\lambda}}_{\Delta} = 0, \quad (\text{DUAL\#1}) \\ \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{j}} \underline{\underline{v}}_{\Delta} = \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{j}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{f}}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{a}} \underline{\underline{S}} \underline{\underline{v}}_{\Delta} = 0, \quad (\text{PRIMAL\#2}) \\ \underline{\underline{S}} \underline{\underline{a}} \underline{\underline{\mu}}_{\Delta} = \underline{\underline{S}} \underline{\underline{a}} \underline{\underline{S}} \underline{\underline{j}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{f}}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{j}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{\mu}}_{\Delta} = 0, \quad (\text{DUAL\#2}) \end{array} \right.$$



Formulaciones desarrolladas en DVS ...

Las formulaciones preconditionadas son:

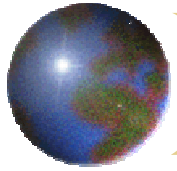
- Formulación Dirichlet-Dirichlet DVS BDDC

$$\underline{\underline{a}}S^{-1}\underline{\underline{a}}Su_{\Delta} = \underline{\underline{a}}S^{-1}\underline{f}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{j}}u_{\Delta} = 0, \quad (\text{PRIMAL\#1})$$

- Formulación Neumann-Neumann DVS FETI-DP

$$\underline{\underline{j}}S\underline{\underline{j}}S^{-1}\underline{\lambda}_{\Delta} = \underline{\underline{j}}S\underline{\underline{j}}S^{-1}\underline{f}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{a}}\underline{\lambda}_{\Delta} = 0, \quad (\text{DUAL\#1})$$

donde $\underline{u}_{\Delta} = \underline{\underline{a}}S^{-1} \left(\underline{f}_{\Delta} - \underline{\underline{j}}\underline{\lambda}_{\Delta} \right)$



Formulaciones desarrolladas en DVS ...

- Formulación Neumann-Neumann DVS-PRIMAL

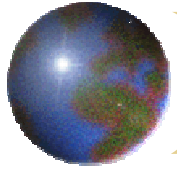
$$\underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{jSj}} \underline{\underline{v}}_{\Delta} = \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{jSj}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{f}}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{aSv}}_{\Delta} = 0, (\text{PRIMAL\#2})$$

donde $\underline{\underline{u}}_{\Delta} = \underline{\underline{aS}}^{-1} \left(\underline{\underline{f}}_{\Delta} - \underline{\underline{jSv}}_{\Delta} \right)$

- Formulación Neumann-Neumann DVS-DUAL

$$\underline{\underline{SaS}}^{-1} \underline{\underline{a\mu}}_{\Delta} = \underline{\underline{SaS}}^{-1} \underline{\underline{aSjS}}^{-1} \underline{\underline{f}}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{jS}}^{-1} \underline{\underline{\mu}}_{\Delta} = 0, (\text{DUAL\#2})$$

donde $\underline{\underline{u}}_{\Delta} = \underline{\underline{aS}}^{-1} \left(\underline{\underline{f}}_{\Delta} + \underline{\underline{\mu}}_{\Delta} \right)$



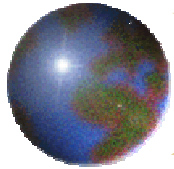
Resultados y análisis de rendimiento

Parte de los ejemplos numéricos desarrollados y mostrados en esta sección, fueron hechos en conjunto con:

C.Dr. Alberto Rosas Medina

C.Dr. Iván Contreras Trejo

los ejemplos forman parte de sus respectivas investigaciones doctorales

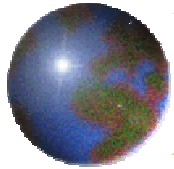


Ejemplo 1, La ecuación de Helmholtz

$$-\Delta u - k^2 u = f \quad k = 10.$$

Para el primer ejemplo, la ecuación utilizada es en 2D; $(x, y) \in [-1, 1] \times [-1, 1]$, donde $u(x, y) = 0$ sobre $\partial\Omega$, los resultados obtenidos para las distintas descomposiciones de dominio, se muestran en la siguiente tabla:

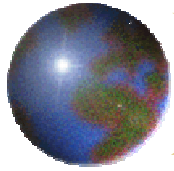
Partición	Grados de Libertad	Primales	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
6×6 y 6×6	1225	25	8	8	8	7
10×10 y 10×10	9801	81	16	13	16	13
14×14 y 14×14	38025	169	18	15	18	15
18×18 y 18×18	104329	289	21	16	20	16
22×22 y 22×22	233289	441	20	17	21	16
26×26 y 26×26	455625	625	21	17	20	17
30×30 y 30×30	808201	841	26	18	21	17



Ejemplo 1, La ecuación de Helmholtz ...

Para el segundo ejemplo, la ecuación utilizada es en 3D; $(x, y, z) \in [-1, 1] \times [-1, 1] \times [-1, 1]$, donde $u(x, y, z) = 0$ sobre $\partial\Omega$, los resultados obtenidos para las distintas descomposiciones de dominio, se muestran en la siguiente tabla:

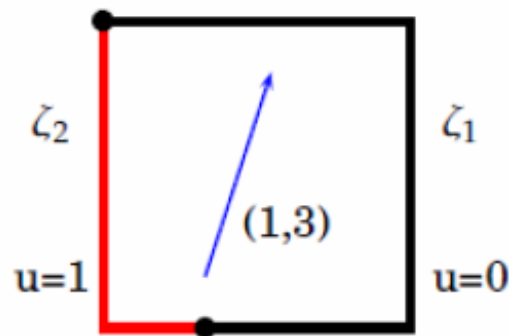
Partición	Grados de Libertad	Primales	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
$2 \times 2 \times 2$ y $2 \times 2 \times 2$	27	7	1	1	1	1
$3 \times 3 \times 3$ y $3 \times 3 \times 3$	512	80	4	4	4	3
$4 \times 4 \times 4$ y $4 \times 4 \times 4$	3375	351	5	4	4	3
$5 \times 5 \times 5$ y $5 \times 5 \times 5$	13824	1024	6	6	5	5
$6 \times 6 \times 6$ y $6 \times 6 \times 6$	42875	2375	7	7	6	5
$7 \times 7 \times 7$ y $7 \times 7 \times 7$	110592	4752	7	7	6	5
$8 \times 8 \times 8$ y $8 \times 8 \times 8$	250047	8575	8	8	6	5
$9 \times 9 \times 9$ y $9 \times 9 \times 9$	512000	14336	8	8	6	6
$10 \times 10 \times 10$ y $10 \times 10 \times 10$	970299	22599	9	6	6	6



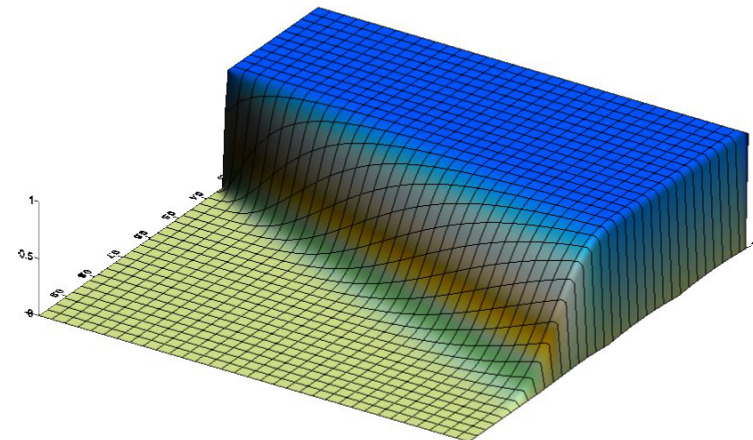
Ejemplo 2, Da Conceicao y Markus Sarkis, 2005

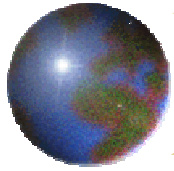
$$-\nu\Delta u + \underline{b} \cdot \nabla u + cu = 0, \quad \underline{b} = (1, 3), \quad c = 0$$

$$u(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{si } (x, y) \in \zeta_1 \\ 1 & \text{si } (x, y) \in \zeta_2 \end{cases}$$



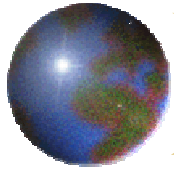
$$\nu = 0.01$$





Ejemplo 2, Da Conceicao y Markus Sarkis ...

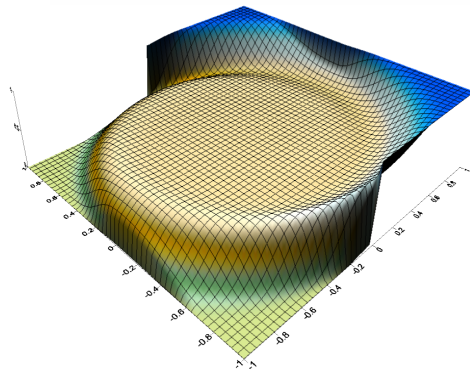
Partición	ν	BDDC	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
8×8 y 64×64	0.01	12	12	11	11	11
8×8 y 64×64	0.001	9	8	8	8	7
8×8 y 64×64	0.0001	9	7	7	7	7
8×8 y 64×64	0.00001	9	7	7	7	7
16×16 y 32×32	0.01	20	19	17	17	18
16×16 y 32×32	0.001	17	14	13	14	13
16×16 y 32×32	0.0001	15	13	13	13	13
16×16 y 32×32	0.00001	16	13	13	13	13
32×32 y 16×16	0.01	33	33	29	29	31
32×32 y 16×16	0.001	30	26	25	25	25
32×32 y 16×16	0.0001	28	25	25	25	25
32×32 y 16×16	0.00001	29	25	25	25	26
64×64 y 8×8	0.01	52	53	53	52	59
64×64 y 8×8	0.001	53	46	46	46	47
64×64 y 8×8	0.0001	53	45	45	47	47
64×64 y 8×8	0.00001	54	45	45	47	48



Ejemplo 3, Toselli 2001

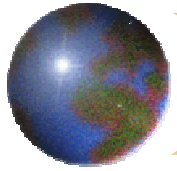
$$-\nu \Delta u + \underline{b} \cdot \nabla u + cu = 0$$

en $(x, y) \in [-1, 1] \times [0 - 1, 1]$, donde



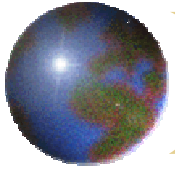
$$u(x, y) = 1 \begin{cases} y = -1, & 0 < x \leq 1 \\ y = 1, & 0 < x \leq 1 \\ x = 1, & -1 \leq y \leq 1 \end{cases}$$
$$u(x, y) = 0, \quad \text{en cualquier otro caso}$$

el coeficiente advectivo esta dado por $\underline{b} = (y, -x)$, el valor de $c = 10^{-4}$



Ejemplo 3, Toselli 2001...

Partición	ν	FETI-DP	PRIMAL#1	DUAL#1	PRIMAL#2	DUAL#2
4×4 y 8×8	1	11	9	8	8	8
4×4 y 8×8	0.01	12	11	8	10	9
4×4 y 8×8	0.001	23	20	16	20	16
4×4 y 8×8	0.0001	45	24	19	24	18
4×4 y 8×8	0.00001	69	24	19	24	18
8×8 y 4×4	1	10	9	8	8	8
8×8 y 4×4	0.01	11	16	9	10	13
8×8 y 4×4	0.001	27	24	21	24	22
8×8 y 4×4	0.0001	68	32	25	30	26
8×8 y 4×4	0.00001	111	33	24	29	27
16×16 y 2×2	1	9	8	6	6	6
16×16 y 2×2	0.01	16	26	8	9	21
16×16 y 2×2	0.001	63	47	23	28	41
16×16 y 2×2	0.0001	176	48	29	34	42
16×16 y 2×2	0.00001	200	48	30	34	42



Ejemplo 4, Toselli 2001

$$-\nu\Delta u + \underline{b} \cdot \nabla u + cu = 0$$

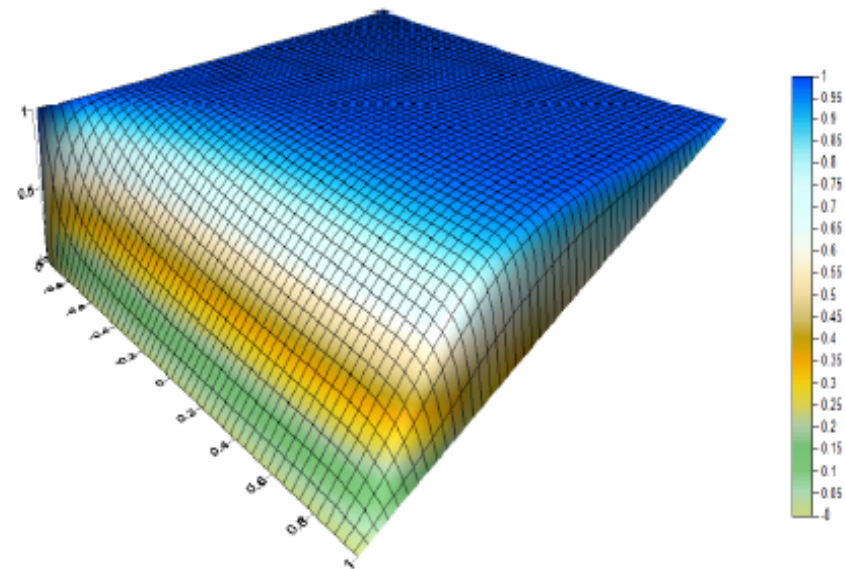
$$u(x, y) = 1 \begin{cases} x = -1, & -1 \leq y \leq 1 \\ y = 1, & -1 \leq x \leq 1 \end{cases}$$

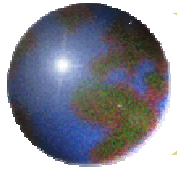
$$u(x, y) = 0, \quad y = -1, \quad -1 \leq x \leq 1$$

$$u(x, y) = \frac{1+y}{2}, \quad x = 1, \quad -1 \leq y \leq 1$$

Donde

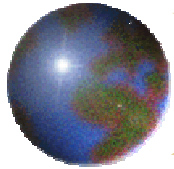
$$\underline{b} = \left(\frac{1+y}{2}, 0 \right); \quad c = 10^{-4}; \quad \nu = 0.01$$





Ejemplo 4, Toselli 2001...

Partición	ν	FETI-DP	PRIMAL #1	DUAL #1	PRIMAL #2	DUAL #2
4×4 y 8×8	1	13	10	10	8	8
4×4 y 8×8	0.01	13	11	10	8	7
4×4 y 8×8	0.001	9	8	9	6	6
4×4 y 8×8	0.0001	10	10	10	4	4
4×4 y 8×8	0.00001	11	9	10	3	4
4×4 y 8×8	0.000001	11	9	9	2	3
8×8 y 4×4	1	44	9	9	8	8
8×8 y 4×4	0.01	34	15	14	10	10
8×8 y 4×4	0.001	16	15	15	10	10
8×8 y 4×4	0.0001	16	27	28	9	9
8×8 y 4×4	0.00001	16	32	32	8	8
8×8 y 4×4	0.000001	16	25	25	6	5
16×16 y 2×2	1	159	8	8	6	5
16×16 y 2×2	0.01	98	22	21	9	8
16×16 y 2×2	0.001	38	37	37	18	18
16×16 y 2×2	0.0001	33	48	48	23	22
16×16 y 2×2	0.00001	46	42	41	20	20
16×16 y 2×2	0.000001	51	37	36	15	15



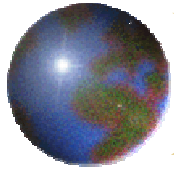
Ejemplo 5, Elasticidad Lineal

$$(\lambda + \mu) \nabla \nabla \cdot \underline{u} + \mu \Delta \underline{u} = \underline{f}_{\Omega}, \text{ en } \Omega$$

$$\underline{u} = 0, \text{ en } \partial\Omega$$

$$\underline{u} = (\sin \pi x \sin \pi y \sin \pi z, \sin \pi x \sin \pi y \sin \pi z)$$

Partición	Subdominios	DOF	PRIMAL#1	DUAL#1	PRIMAL#2	DUAL#2
5×5×5 y 5×5×5	125	41472	8	7	9	9
6×6×6 y 6×6×6	216	128625	8	8	10	10
7×7×7 y 7×7×7	343	331776	8	8	11	11
8×8×8 y 8×8×8	512	750141	8	8	12	12

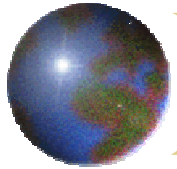


Ejemplo 6, Problemas Simétricos y no Simétricos

Operador elíptico más general de segundo orden

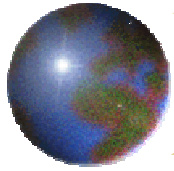
$$-\nabla \cdot (\underline{\underline{a}} \cdot \nabla u) + \nabla \cdot (\underline{b} u) + cu$$

Si consideramos a la matriz $\underline{\underline{a}}$ simétrica con entradas constantes y el vector $\underline{b}$ es nulo, el problema será simétrico, en cualquier otro caso es no simétrico



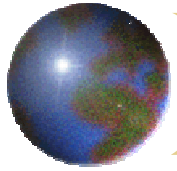
Ejemplo 6, Resultados en Problemas 2D ...

Ejemplo	Partición	Subdominios	Grados Libertad	Primales
1	2×2 y 2×2	4	9	1
2	4×4 y 4×4	16	225	9
3	6×6 y 6×6	36	1225	25
4	8×8 y 8×8	64	3969	49
5	10×10 y 10×10	100	9801	81
6	12×12 y 12×12	144	20449	121
7	14×14 y 14×14	196	38025	169
8	16×16 y 16×16	256	65025	225
9	18×18 y 18×18	324	104329	289
10	20×20 y 20×20	400	159201	361
11	22×22 y 22×22	484	233289	441
12	24×24 y 24×24	576	330625	529
13	26×26 y 26×26	676	455625	625
14	28×29 y 28×28	784	613089	729
15	30×30 y 30×30	900	808201	841



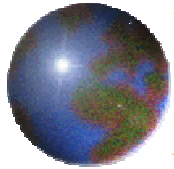
Ejemplo 6, Resultados en Problemas 2D Simétricos

Ejemplo	PRIMAL#1	PRIMAL#1	DUAL#1	DUAL#2
1	2	1	2	1
2	7	7	6	5
3	9	9	7	6
4	10	10	9	7
5	11	11	10	8
6	12	11	13	9
7	12	12	13	12
8	13	12	14	12
9	13	13	15	13
10	13	13	15	14
11	13	14	15	16
12	14	14	15	15
13	14	14	15	15
14	14	14	15	15
15	15	14	15	15



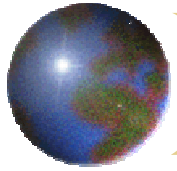
Ejemplo 6, Resultados en Problemas 2D no Simétricos

Ejemplo	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
1	2	1	2	1
2	8	6	6	6
3	10	8	8	8
4	12	10	9	9
5	13	12	9	10
6	14	12	10	10
7	15	13	11	11
8	15	14	11	11
9	16	14	11	12
10	16	15	12	12
11	17	16	12	12
12	17	16	12	13
13	17	16	13	13
14	18	17	13	13
15	18	17	13	13



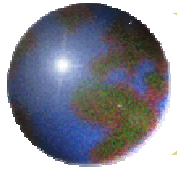
Ejemplo 6, Resultados en Problemas 3D ...

Ejemplo	Partición	Subdominios	Grados Libertad	Primales
1	$2 \times 2 \times 2$ y $2 \times 2 \times 2$	8	27	7
2	$3 \times 3 \times 3$ y $3 \times 3 \times 3$	27	512	80
3	$4 \times 4 \times 4$ y $4 \times 4 \times 4$	64	3375	351
4	$5 \times 5 \times 5$ y $5 \times 5 \times 5$	125	13824	1024
5	$6 \times 6 \times 6$ y $6 \times 6 \times 6$	216	42875	2375
6	$7 \times 7 \times 7$ y $7 \times 7 \times 7$	343	11059	4752
7	$8 \times 8 \times 8$ y $8 \times 8 \times 8$	512	250592	8575
8	$9 \times 9 \times 9$ y $9 \times 9 \times 9$	729	512000	14336
9	$10 \times 10 \times 10$ y $10 \times 10 \times 10$	1000	970299	22599



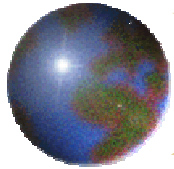
Ejemplo 6, Resultados en Problemas 3D Simétricos

Ejemplo	PRIMAL#1	PRIMAL#1	DUAL#1	DUAL#2
1	2	2	2	2
2	4	4	3	3
3	5	5	4	3
4	6	5	4	3
5	6	6	4	4
6	7	6	4	4
7	8	7	5	6
8	8	8	7	7
9	8	8	8	8



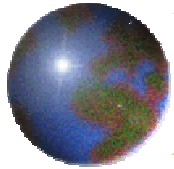
Ejemplo 6, Resultados en Problemas 3D no Simétricos

Ejemplo	PRIMAL#1	PRIMAL#2	DUAL#1	DUAL#2
1	3	2	2	2
2	6	4	4	4
3	7	6	5	5
4	8	7	5	5
5	10	7	6	6
6	11	8	6	6
7	11	9	7	7
8	12	10	8	8
9	13	11	9	9



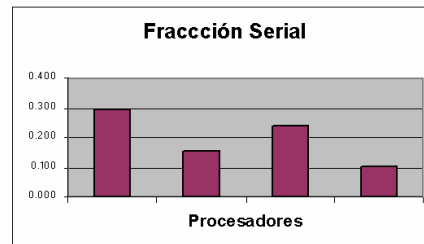
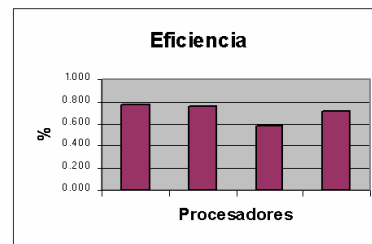
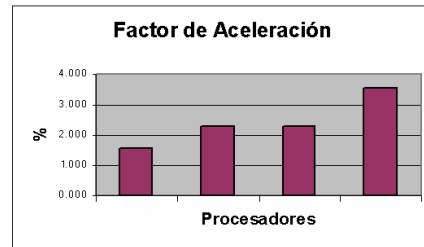
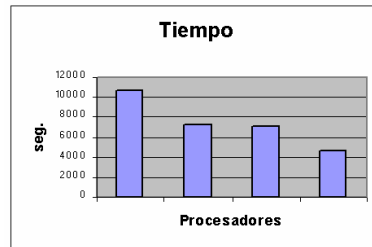
Problema 7, Selección de la Descomposición Óptima

	1 Core	2 Cores	3 Cores	4 Cores	5 Cores	6 Cores	7 Cores	8 Cores
Partición	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo	Tiempo
2x2 y 512x512	16465	10659	7207	7105	4641			
4x4 y 256x256	2251	5063	2252	2103	1643	1233	1068	947
8x8 y 128x128	855	885	482	395	314	311	283	272
16x16 y 64x64	321	348	190	149	121	125	118	117
32x32 y 32x32	26	39	26	24	23	21	21	21
64x64 y 16x16	205	595	485	477	481	461	469	469
128x128 y 8x8	1026	5453	5352	5431	5633	5843	5843	5903
256x256 y 4x4	8544	26167	25892	25902	25939	25950	25969	26003
512x512 y 2x2	34845	64230	63293	63308	63389	63475	63502	63693

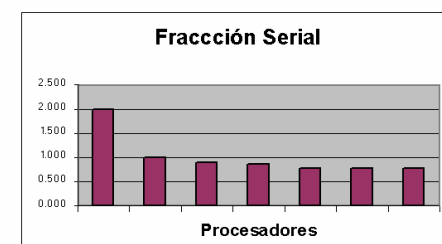
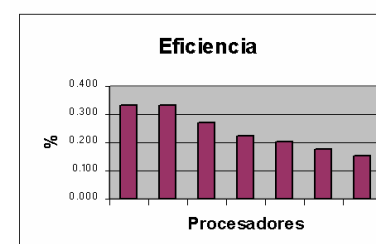
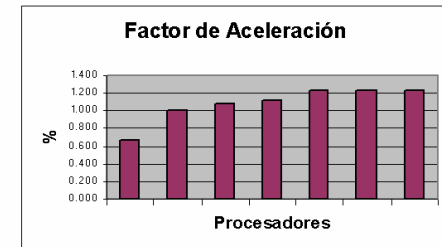
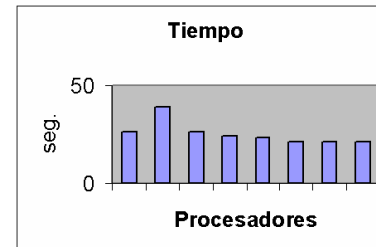


Problema 7, Selección de la Descomposición Óptima ...

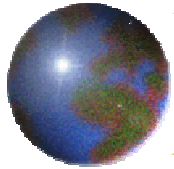
Descomposición 2 x 2 y 512 x 512



Descomposición 32 x 32 y 32 x 32



El factor de aceleración S es tal que $1 \leq S(n) \leq n$, la eficiencia E es tal que $1/n \leq E(n) \leq 1$ y la fracción serial F es tal que $0 \leq F(n) \leq 1$. Se considera que en el caso ideal, el factor de aceleración debería de aumentar linealmente al aumentar el número de procesadores $S(p) \approx p$, por su parte la eficiencia debería de ser cercana a la unidad cuando el Hardware se está usando de forma eficiente y en caso contrario se desaprovecha éste; por último, la fracción serial debería tender a cero y cualquier aumento indica una sobrecarga en el proceso de comunicaciones.



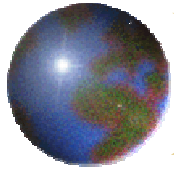
Ejemplo 8, Selección de la Descomposición Adecuada para el Equipo Paralelo con que se Cuenta

Dominio 32 x 32 y 150 x 150 generando 23,040,000 grados de libertad

Cores	Pohualli	Kanbalam
16	9158 seg	ND
32	5178 seg	5937 seg
64	3647 seg	4326 seg
100	2661 seg	
128		2818 seg

Cluster Kanbalam 1024 Cores AMD a 2.6 GHz de 64 bits, cada 4 Cores cuentan con 8 GB de RAM

Cluster Pohualli de 104 Cores Intel Xeon a 2.33 GHz de 64 bits, cada 8 Cores cuentan con 32GB de RAM



Ejemplo 9, Escalabilidad ...

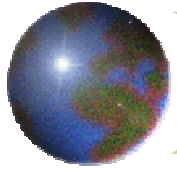
Subdominio	Cores					
	32	64	128	256	512	1024
$31 \times 33_y 150 \times 150$	7,315 s	4,016 s	2,619 s	1,941 s	1,541 s	1,298 s
$31 \times 33_y 200 \times 200$	ND	16,037 s.	4,916 s	3,166 s	2,688 s	2,295 s
$31 \times 33_y 250 \times 250$	ND	ND	26,587 s	8,716 s	6,388 s	ND

Subdominio	Aceleración	Aceleración esperada	Eficiencia
$31 \times 33_y 150 \times 150$	$S_{1024}^{32} = 5.6$	$S_{1024}^{32} = 32$	$E_{1024}^{32} = 0.2$
$31 \times 33_y 200 \times 200$	$S_{1024}^{64} = 5.9$	$S_{1024}^{32} = 8$	$E_{1024}^{64} = 0.7$
$31 \times 33_y 250 \times 250$	$S_{1024}^{128} = 4.1$	$S_{1024}^{32} = 4$	$E_{1024}^{128} = 1.0$

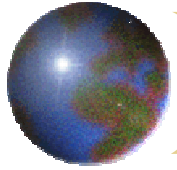
31 x 33 y 150 x 150 generando 23,017,500 grados de libertad

31 x 33 y 200 x 200 generando 40,920,000 grados de libertad

31 x 33 y 250 x 250 generando 63,937,500 grados de libertad

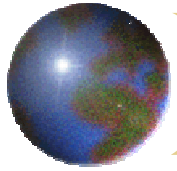


Ventajas Algorítmicas y Computacionales

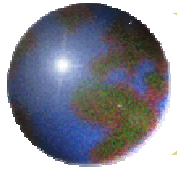


Ventajas Algorítmicas y Computacionales ...

- Para cada uno de estos algoritmos, se han generado fórmulas matriciales explícitas, las cuales son directamente usadas para desarrollar el código.
- Cuando han sido aplicados a problemas simétricos, no simétricos e indefinidos, la eficiencia numérica es del mismo orden que los algoritmos DDM en el estado del arte.
- Está desarrollado para problemas en 2 y 3 dimensiones.
- Los algoritmos son altamente paralelizables.
- Programación secuencial en C++, en paralelo en C++ y MPI.
- Simplificación de la jerarquía de clases de los códigos computacionales desarrollados.



Conclusiones



Conclusiones ...

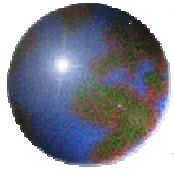
Las formulaciones no preconditionadas son:

- Formulación Dirichlet-Dirichlet

$$\left\{ \underline{\underline{a}} \underline{\underline{S}} \underline{\underline{u}}_{\Delta} = \underline{\underline{f}}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{j}} \underline{\underline{u}}_{\Delta} = 0, \quad (\text{PRIMAL\#1}) \right.$$

- Formulación Neumann-Neumann

$$\left\{ \begin{array}{l} \underline{\underline{j}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{\lambda}}_{\Delta} = \underline{\underline{j}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{f}}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{a}} \underline{\underline{\lambda}}_{\Delta} = 0, \quad (\text{DUAL\#1}) \\ \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{j}} \underline{\underline{v}}_{\Delta} = \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{j}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{f}}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{a}} \underline{\underline{S}} \underline{\underline{v}}_{\Delta} = 0, \quad (\text{PRIMAL\#2}) \\ \underline{\underline{S}} \underline{\underline{a}} \underline{\underline{\mu}}_{\Delta} = \underline{\underline{S}} \underline{\underline{a}} \underline{\underline{j}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{f}}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{j}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{\mu}}_{\Delta} = 0, \quad (\text{DUAL\#2}) \end{array} \right.$$



Conclusiones ...

Las formulaciones preconditionadas son:

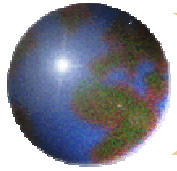
- Formulación Dirichlet-Dirichlet DVS BDDC

$$\underline{\underline{a}}S^{-1}\underline{\underline{a}}Su_{\Delta} = \underline{\underline{a}}S^{-1}\underline{f}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{j}}u_{\Delta} = 0, \quad (\text{PRIMAL\#1})$$

- Formulación Neumann-Neumann DVS FETI-DP

$$\underline{\underline{j}}S\underline{\underline{j}}S^{-1}\underline{\lambda}_{\Delta} = \underline{\underline{j}}S\underline{\underline{j}}S^{-1}\underline{f}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{a}}\underline{\lambda}_{\Delta} = 0, \quad (\text{DUAL\#1})$$

donde $\underline{u}_{\Delta} = \underline{\underline{a}}S^{-1} \left(\underline{f}_{\Delta} - \underline{\underline{j}}\underline{\lambda}_{\Delta} \right)$



Conclusiones ...

- Formulación Neumann-Neumann DVS-PRIMAL

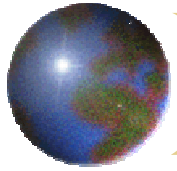
$$\underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{jSj}} \underline{\underline{v}}_{\Delta} = \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{jSj}} \underline{\underline{S}}^{-1} \underline{\underline{f}}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{aSv}}_{\Delta} = 0, (\text{PRIMAL\#2})$$

donde $\underline{\underline{u}}_{\Delta} = \underline{\underline{aS}}^{-1} \left(\underline{\underline{f}}_{\Delta} - \underline{\underline{jSv}}_{\Delta} \right)$

- Formulación Neumann-Neumann DVS-DUAL

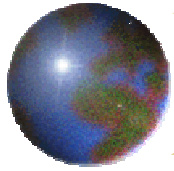
$$\underline{\underline{SaS}}^{-1} \underline{\underline{a\mu}}_{\Delta} = \underline{\underline{SaS}}^{-1} \underline{\underline{aSjS}}^{-1} \underline{\underline{f}}_{\Delta} \quad y \quad \underline{\underline{jS}}^{-1} \underline{\underline{\mu}}_{\Delta} = 0, (\text{DUAL\#2})$$

donde $\underline{\underline{u}}_{\Delta} = \underline{\underline{aS}}^{-1} \left(\underline{\underline{f}}_{\Delta} + \underline{\underline{\mu}}_{\Delta} \right)$



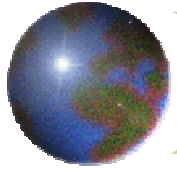
Conclusiones ...

- La formulación Dual y Primal de dos de los métodos más usados (FETI-DP y BDDC) han sido derivadas de una manera unificada en el esquema DVS.
- El esquema DVS permite aplicar técnicas de descomposición de dominio directamente al sistema de matrices obtenidas después de que la ecuación diferencial parcial o sistemas de tales ecuaciones han sido discretizadas.
- El esquema DVS es igualmente aplicable a matrices simétricas, no simétricas e indefinidas (i.e. no positivas y no negativas definidas).



Conclusiones ...

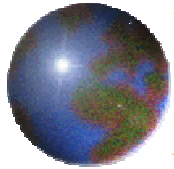
- Los algoritmos generados tienen una aplicabilidad general, ya que pueden ser aplicados a problemas de valor en la frontera asociados a una ecuación diferencial o sistemas de ecuaciones.
- Las formulaciones DVS permiten desarrollar códigos que satisfacen el paradigma DDM, i.e. *en el cual la solución de problemas globales es obtenida exclusivamente por resolución de problemas locales.*



Conclusiones ...

Algunas de las propiedades computacionales de los algoritmos DVS-DDM son:

- El código es robusto y con ligeras modificaciones es aplicado a problemas en 2D y 3D tanto escalares como vectoriales.
- El mismo código puede ser aplicado a una ecuación o a sistemas de ecuaciones.
- El código soporta diferentes resolvedores locales en los subdominios.
- El algoritmo global es débilmente acoplado a los subdominios.
- La formulación DVS es altamente paralelizable.



Conclusiones ...

Geoscientia Internacional (2011) 50-4: 445-463

REVIEW PAPER

A brief overview of non-overlapping domain decomposition methods

Ismael Herrera*, Antonio Carrillo-Ledesma and Alberto Rosas-Medina

Received: July 1, 2011; accepted: July 7, 2011; published online: September 30, 2011

Resumen

Se presenta una visión general de los métodos de descomposición de dominio con dominios ajenos. Los métodos más eficientes que existen en la actualidad, el BDDC y el FETI-DP, se ubican en un marco 'primal' (el 'espacio de vectores derivados' (DVS, por sus siglas en inglés)), el cual permite una presentación sintética y efectiva tanto de las formulaciones primales como de las 'duales'. El marco conceptual del espacio de los vectores derivados tiene alguna similitud con el que usa BDDC, pero una diferencia importante es que en el marco DVS el problema tratado se transforma en otro definido en el espacio vectorial producto, mientras que en el BDDC no se hace tal cosa. Esto simplifica los algoritmos, los cual se sintetizan en un breve conjunto de fórmulas matriciales muy generales que son aplicables a matrices simétricas, no simétricas e indefinidas, cuando ellas provienen de la discretización de ecuaciones diferenciales parciales o sistemas de tales ecuaciones. Las fórmulas matriciales de este conjunto, son explícitas y pueden ser usadas directamente para desarrollar códigos computacionales. Hasta donde sabemos, dos de los algoritmos precondicionados del conjunto mencionado, son totalmente diferentes a cualquiera de los reportados en la literatura y deben ser motivo de investigaciones futuras.

Palabras clave: subestructuración iterativa, métodos de descomposición en dominios ajenos; BDD, BDDC; FETI, FETI-DP; precondicionadores; espacio producto; multiplicadores de Lagrange.

Abstract

An overview of non-overlapping domain decomposition methods is presented. The most efficient methods that exist at present, BDDC and FETI-DP, are placed in a 'primal' framework (the 'derived-vectors space' (DVS)) which permits a synthetic and effective presentation of both: primal and 'dual' formulations. The derived-vectors space is similar to the setting used in BDDC. A significant difference is that, in the DVS framework, the problem considered is transformed into one that is defined in a product vector space while in BDDC that is not done. This simplifies the algorithmic formulations, which are summarized in a set of matrix-formulas applicable to symmetric, non-symmetric and indefinite matrices generated when treating numerically partial differential equations or systems of such equations. They can directly be used for code development. Two preconditioned algorithms of the mentioned set had not been reported previously in the DDM literature, as far as we know, and are suitable for being researched.

Key words: iterative substructuring, non-overlapping domain decomposition, BDD, BDDC, FETI, FETI-DP, preconditioners, product space, Lagrange multipliers.

I. Herrera*, A. Carrillo-Ledesma and A. Rosas-Medina
Instituto de Geofísica
Universidad Nacional Autónoma de México
Ciudad Universitaria
Delagación, Coyoacán 04510
México D.F.

*Corresponding author: iherrera@geofisica.unam.mx

Parallel Algorithms for Computational Models of Geophysical Systems

By

Antonio Carrillo-Ledesma, Ismael Herrera*, and Luis M. de la Cruz

Instituto de Geofísica

Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM)

Apdo. Postal 22-582, México, 14000 D.F.

Email: iherrera@unam.mx

Abstract

Mathematical models of many geophysical systems are based on the computational processing of large-scale algebraic systems. The most advanced computational tools are based on massively parallel processors. The most effective software for solving partial differential equations in parallel intends to achieve the DDM-paradigm. A set of four algorithms, the *DVS-algorithm*, which achieve it, and of very general applicability, has recently been developed and here they are explained. Also, their application to problems that frequently occur in Geophysics is illustrated.

Keywords: Computational-geophysics, Computational-PDEs, non-overlapping DDM, BDDC, FETI-DP

Resumen

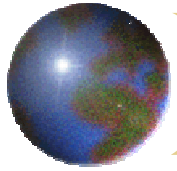
Los modelos matemáticos de muchos sistemas geofísicos requieren el procesamiento de sistemas algebraicos de gran escala. Las herramientas computacionales más avanzadas están masivamente paralelizadas. El software más efectivo para resolver ecuaciones diferenciales parciales en paralelo intenta alcanzar el *paradigma de los métodos de descomposición de dominio*, que hasta ahora se había mantenido como un sueño no alcanzado. Sin embargo, un grupo de cuatro algoritmos —los *algoritmos DVS*— que lo alcanzan y que tiene aplicabilidad muy general se ha desarrollado recientemente. Este artículo está dedicado a presentarlos y a ilustrar su aplicación a problemas que se presentan frecuentemente en la investigación y el estado de la Geofísica.

Keywords: Computational-geophysics, Computational-PDEs, non-overlapping DDM, BDDC, FETI-DP

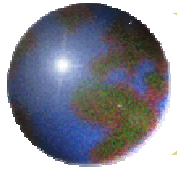
1. Introduction

Mathematical models of many systems of interest, including very important continuous systems of Earth Sciences and Engineering, lead to a great variety of partial differential equations (PDEs) whose solution methods are based on the computational processing of large-scale algebraic systems. Furthermore, the incredible expansion experienced by the existing computational hardware and software has made amenable to effective treatment problems of an ever increasing diversity and complexity, posed by scientific and engineering applications (PITAG, 2006).

Parallel computing is outstanding among the new computational tools and, in order to effectively use the most advanced computers available today, massively parallel software is required. Domain decomposition methods (DDMs) have been developed precisely for effectively treating PDEs in parallel (DDM Organization, 2012). Ideally, the main objective of domain decomposition research is to produce algorithms capable of 'obtaining the global



Trabajo futuro



Trabajo futuro ...

- Hacer una investigación sobre nuestros métodos no reportados en la literatura.
- Soportar condiciones de frontera generales para problemas Escalares y Vectoriales.
- Aplicar los métodos desarrollados y ampliar el código para soportar problemas:
 - Parabólicos e Hiperbólicos.
 - Lineales y no lineales.
- Implementar un mecanismo sencillo que permita definir ecuaciones o sistemas de ecuaciones, sus parámetros y condiciones de frontera que amplíe el código desarrollado.