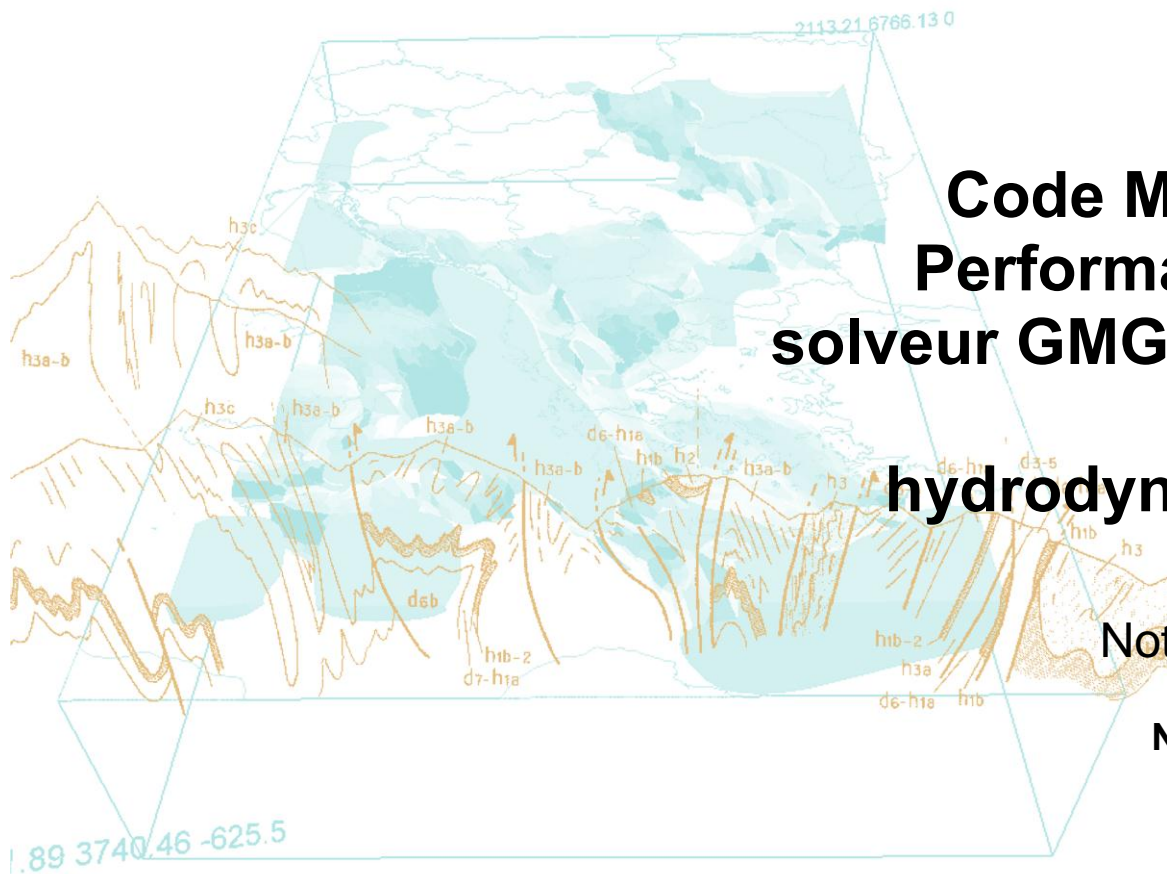


Document public



Code MARTHE : Performances du solveur GMG pour les calculs hydrodynamiques

Note technique

NT EAU 2005/03
juin 2005

Dominique THIÉRY



Géosciences pour une Terre durable

brgm

Synthèse

Dans le code de calcul MARTHE v7.4 il est possible de choisir parmi 3 solveurs utilisant la méthode des gradients conjugués pour réaliser les calculs hydrodynamiques de charges hydrauliques. Cette note présente une comparaison des performances de ces différents solveurs sur un certain nombre de cas pratiques. Elle s'intéresse en particulier au solveur GMG (Geometric Multi Grid) décrit par Wilson et Naff (2004) dont le code source peut être obtenu auprès de l'USGS.

Cette note met en évidence que le solveur GMG présente un intérêt certain pour les très grands maillages (de plusieurs centaines de milliers de mailles) réguliers (c'est à dire sans gigognes ni courts-circuits de couches), généralement linéaires (captifs) et en régime permanent.

1 Introduction

Trois solveurs par gradients conjugués sont disponibles dans le code MARTHE pour réaliser les calculs hydrodynamiques :

- Le solveur par la méthode Cholesky incomplète (décrit par Hill 1990-2003)
- Le solveur par la méthode Eisenstat
- Le solveur par la méthode GMG Geometric Multi-Grid (développé par l'USGS)

Parmi ces solveurs, le solveur Eisenstat permet une résolution compacte en traitant dans le solveur uniquement les mailles actives (en déstructurant les matrices). Dans la version 7.4 de MARTHE cette résolution compacte a été introduite uniquement dans le solveur Eisenstat et elle est opérationnelle pour les écoulements monophasiques, en Zone saturée (ZS) ou en Zone Non Saturée (ZNS) y compris avec des rivières, pour toutes les géométries, 3D, multicouche, gigognes.

Le solveur GMG est opérationnel uniquement pour les maillages « réguliers » c'est à dire : sans gigognes ni drains-conduits. Pour les maillages 3D ou multicouches : il ne doit pas avoir de courts-circuits entre couches.

2 Condition des tests réalisés

Les calculs ont été réalisés sur des maillages de 200 000 mailles à 1000 000 de mailles, en régime permanent ou en régime transitoire. Les temps CPU, obtenus en 2005, correspondent à un système d'exploitation Windows 2000 avec un processeur de 2.8 GHz et 512 Mo de mémoire. En pratique on ne s'intéresse qu'aux comparaisons de temps d'exécution d'un solveur à l'autre et non pas à la valeur absolue de ce temps d'exécution (temps CPU). Dans tous les cas le système était monoprocesseur. Pour permettre une comparaison objective, on s'est efforcé d'obtenir avec chaque solveur un taux de convergence comparable, avec un débit résiduel d'erreur (interne) de l'ordre de 0.5 %.

3 Performances obtenues

Pour chaque cas on indique le gain par rapport au solveur de référence (méthode de Cholesky incomplète).

Tous ces exemples se rapportent à des nappes captives, donc à des systèmes linéaires.

- Exemple monocouche en régime permanent avec : 223 000 mailles (Rocky_Huge) en régime permanent. Nappe captive ; toutes les mailles sont actives.

	Solveur Cholesky	Solveur Eisenstat	GMG	Facteur accélération
CPU Charges (secondes)	12.5	27.1	3.4	3.7
dont CPU Solveur	11.7	26.3	2.7	4.3

- Exemple monocouche en régime permanent avec : 571 200 mailles (Rocky_Huge_2) en régime permanent. Nappe captive ; toutes les mailles sont actives.

	Solveur Cholesky	Solveur Eisenstat	Solveur GMG	Facteur accélération
CPU Charges (secondes)	40.3	102	9.0	4.5
dont CPU Solveur	38.3	100	7.0	5.5

Pour cet exemple le solveur Cholesky est plus rapide que le solveur Eisenstat, ce qui est rare. Le solveur GMG est cependant largement plus rapide.

- Exemple multicouche en régime permanent : 4 couches de 40 000 mailles soit au total 160 000 mailles (Huge_3D_6) en régime permanent. Nappe captive ; toutes les mailles sont actives.

	Solveur Cholesky	Solveur Eisenstat	Solveur GMG	Facteur accélération
CPU Charges (secondes)	13.6	10.1	4.5	3.0
dont CPU Solveur	12.9	9.3	3.8	3.4

- Exemple multicouche en régime permanent : 4 couches de 90 000 mailles soit au total 360 000 mailles (Huge_3D_7) en régime permanent. Toutes les mailles sont actives.

	Solveur Cholesky	Solveur Eisenstat	Solveur GMG	Facteur accélération
CPU Charges (secondes)	41.2	33.7	10.2	4.0
dont CPU Solveur	39.7	32.1	8.8	4.5

- Exemple multicouche en régime permanent : 4 couches de 250 000 mailles soit au total 1000 000 de mailles (Huge_3D_1) en régime permanent. Toutes les mailles sont actives.

	Solveur Cholesky	Solveur Eisenstat	Solveur GMG	Facteur accélération
CPU Charges (secondes)	174	156	52.2	3.3
dont CPU Solveur	170	151	47.9	3.5

- Exemple multicouche en régime permanent : 8 couches de 250 000 mailles soit au total 2000 000 de mailles (Huge_3D_3) en régime permanent. Toutes les mailles sont actives.

	Solveur Cholesky	Solveur Eisenstat	Solveur GMG	Facteur accélération
CPU Charges (secondes)	592	319	85.9	6.9
dont CPU Solveur	583	309	76.8	7.6

N.B. Le schéma GMG totalement 3D, non présenté ici, est nettement moins performant (181 s CPU dans le solveur), ce qui est logique compte tenu du faible nombre de couches

- Exemple multicouche en régime permanent : 12 couches de 250 000 mailles soit au total 3000 000 de mailles (Huge_3D_5) en régime permanent. Nappe captive ; toutes les mailles sont actives.

	Solveur Cholesky	Solveur Eisenstat	Solveur GMG	Facteur accélération
CPU Charges (secondes)	871	(Mémoire virtuelle)	110	7.9
dont CPU Solveur	858	(Mémoire virtuelle)	95.8	9.0

N.B. Même pour cet exemple avec 12 couches, le schéma GMG totalement 3D, non présenté ici, est deux fois moins performant (191 s CPU dans le solveur) que le schéma GMG avec lissage uniquement dans les plans.

- Exemple multicouche permanent : 90 couches de 16 900 mailles soit au total 1521 000 de mailles (Huge_3D_8) en régime permanent. Nappe captive ; toutes les mailles sont actives.

	Solveur Cholesky	Solveur Eisenstat	GMG	GMG 3D	Facteur accélération
CPU Charges (secondes)	213	105	47.9	25.4	8.4
dont CPU Solveur	206	97	41.4	18.8	11.0

Pour cet exemple réellement 3D (90 couches) le schéma GMG total (3D), non présenté ici, est 2 fois plus rapide que le schéma GMG avec lissage uniquement dans les plans.

Récapitulation

Nom du Test	Nombre de Mailles (millions)	Mémoire suppl. allouée (Mo)	Critère Débit résiduel GMG (Unité débits)	Débit résiduel Marthe (Unité débits)	Nombre d'itérations GMG
Rocky_Huge	0.223	19	$8.1 \cdot 10^{-2}$	$9.1 \cdot 10^{-3}$	3
Rocky_Huge_2	0.557	51	0.28	0.12	3
Huge_3D_6	0.16	14	0.15	$4.0 \cdot 10^{-2}$	4
Huge_3D_7	0.36	32	$1.2 \cdot 10^{-2}$	$4.8 \cdot 10^{-3}$	5
Huge_3D_1	1.0	89	$1.3 \cdot 10^{-2}$	$5.4 \cdot 10^{-3}$	10
Huge_3D_3	2.0	178	$5.7 \cdot 10^{-2}$	$4.7 \cdot 10^{-2}$	7
Huge_3D_5	3.0	268	$3.1 \cdot 10^{-2}$	$3.1 \cdot 10^{-2}$	6
Huge_3D_8	1.521	114	$1.9 \cdot 10^{-2}$	$3.6 \cdot 10^{-3}$	3

4 Conclusions

Ces exemples ont montré que :

- Le solveur Eisenstat est le plus souvent plus rapide que le solveur Cholesky (solveur choisi par défaut par MARTHE). Les gains de temps CPU sont généralement d'environ 20% à 50%
- Le solveur GMG (Geometric Multi Grid) est beaucoup plus rapide pour les très gros maillages (150 000 à 3 millions de mailles). Ce solveur est selon les cas de 4 fois à 11

fois plus rapide que le solveur Cholesky de référence. Pour les maillages plus petits (inférieurs à 100 000 mailles) le solveur GMG est généralement moins rapide que les autres solveurs.

- Il convient cependant de remarquer que pour les calculs en régime transitoire ces résultats ne sont pas aussi nets. En effet, comme les variations d'un pas de temps au suivant sont généralement faibles, il suffit de quelques itérations pour résoudre le système d'équation. La méthode GMG qui effectue un faible nombre d'itérations, chaque itération nécessitant un plus grand temps machine, n'est alors pas toujours plus rapide. Ceci est également valable pour les systèmes fortement non linéaires (nappes libres, calculs en Zone Non Saturée) pour lesquels la résolution nécessite de nombreuses itérations externes, avec peu d'itérations internes à chaque fois.
- Ces exemples ont également montré également qu'il était possible de gérer facilement des maillages de 250 000 à 3000 000 mailles avec un ordinateur PC de bureau classique.
- Pour résumer : Le solveur GMG présente un intérêt certain pour les très grands maillages réguliers, généralement linéaires (captifs) et en régime permanent.

Annexe

Mise en œuvre dans le code MARTHE

Pour utiliser le solveur GMG dans le code MARTHE, il suffit de définir quelques paramètres dans le « **fichier des paramètres** [.mar] » dans le paragraphe « **Contrôle de la Résolution Hydrodynamique** »

7=Solveur [0=Gradients Conjugés/Cholesky ; 6=Eisenstat ; 7=GMG]
Le solveur GMG est le solveur n°7 de MARTHE

0.5=Débit résiduel maximal pour convergence interne du solveur GMG [Def=1e-4]
C'est le critère d'arrêt de la résolution matricielle du solveur GMG : Les calculs itératifs de la résolution interne s'arrêtent quand la norme des débits résiduels est inférieure à ce seuil (exprimé en unités de débits du modèle)

0=Index de lissage de grille du solveur GMG [Def=0]
C'est le type de lissage du solveur GMG sur une grille plus grossière :
0 = Dans toutes les directions (Colonnes, Lignes, et Plans) : pour les maillages monocouches ou bien pour les maillages en 3D total
1 = Sur les Colonnes et les Lignes (conseillé en 3D avec peu de couches)
2 = Sur les Lignes et les Couches (usage spécial)
3 = Sur les Colonnes et les Couches (usage spécial)
4 = Aucun lissage (=> dégénère en Gradients Conjugés classiques => pour mémoire : sans intérêt pratique)

0=Index de Pré-conditionnement du solveur GMG [Def=0]
0 = Pré-conditionnement ILU (Incomplete Lower Upper) : Conseillé
1 = Pré-conditionnement SGS (Symmetric Gauss Seidel)
(La méthode SGS nécessite un peu moins de mémoire mais elle est moins robuste et peut échouer)

En pratique, après avoir choisi le solveur n°7, il est uniquement nécessaire de définir le second paramètre « Débit résiduel maximal » et il suffit de le laisser les 2 autres égaux à 0.

Références bibliographiques

Hill, M. C. (1990) - Preconditioned Conjugate-Gradient 2 (PCG2), a computer program for solving ground-water flow equations. *U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations Report 90-4048 (Second Printing, 2003)*. 25 p.

Wilson, J. D., Naff, R. L. (2004) - The U.S. Geological Survey Modular GroundWater Model – GMG Linear Equation Solver Package. *U.S. Geological Survey OpenFile Report 20041261*. 47 p.

Thiéry, D. (2004) - Code MARTHE : Performances des solveurs pour les calculs hydrodynamiques. *Note technique NT EAU 2004*.