Numerieke lineaire algebra methoden voor grondwaterstromingen

Kees Vuik

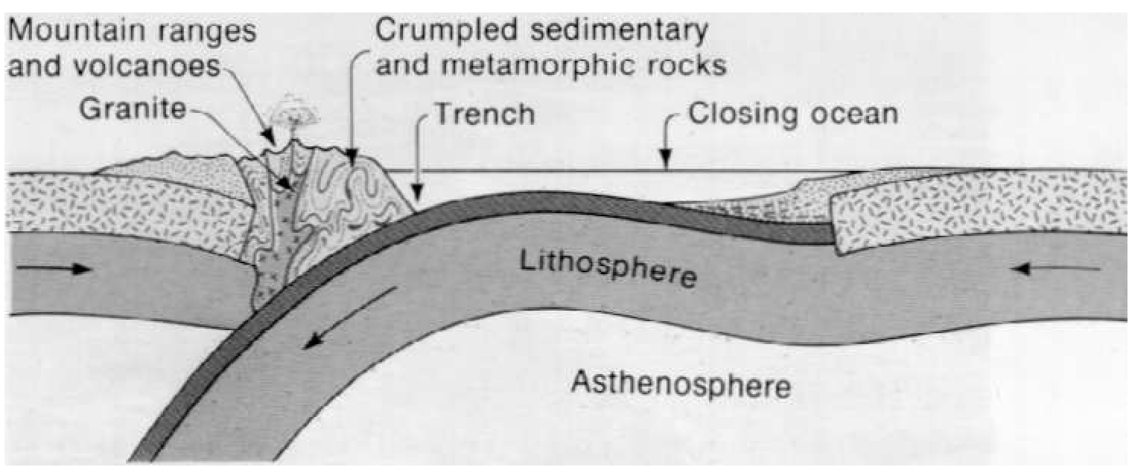
Machazine, 4(1), pp. 22-24, 1999

Nadat lineaire algebra behandeld is in het eerste studiejaar zou de indruk kunnen bestaan dat de lineaire algebra min of meer af is. Men kan een stelsel oplossen, eigenwaarden kunnen bepaald worden etc. Niets is echter minder waar, de numerieke lineaire algebra is nog steeds erg in ontwikkeling. De reden hiervoor is dat het oplossen van zeer grote stelsels (afmeting oplosvector groter dan 10^6)vaak een bottleneck is voor het simuleren van fysische, biologische of economische verschijnselen.

In dit artikel zal alleen iets gezegd worden over het oplossen van een stelsel vergelijkingen met behulp van een iteratieve methode. Ook op dit gebied zijn veel recente ontwikkelingen zoals: robuuste multigrid methoden, parallelle iteratieve methoden, methoden voor indefiniete stelsels (bijvoorbeeld afkomstig uit stromingsproblemen), methoden voor slecht geconditioneerde stelsels enzovoorts.

In dit artikel zal een methode besproken worden voor het iteratief oplossen van een slecht geconditioneerd stelsel. We zullen eerst het fysische probleem schetsen. Daarna laten we zien hoe dit probleem numeriek opgelost kan worden. Hierbij stuiten we op een probleem: de iteratief berekende oplossing wijkt sterk af van de exacte oplossing. De recente ontwikkelingen om dit probleem op te lossen worden geschetst. Het resultaat hiervan is een benaderende oplossing die goed overeenkomt met de exacte oplossing.

Het oorspronkelijke probleem is afkomstig van Shell International Exploration and Production in Rijswijk.



Figuur 1: Schematische weergave van de aardkorst

Voor een oliemaatschappij is het van zeer groot belang om de vloeistofdrukken te weten in de ondergrond. Deze kennis kan gebruikt worden voor het voorspellen van olie- en gasvoorraden en is heel belangrijk voor de veiligheids- en milieuaspecten tijdens het boren van een put. Een wiskundig model om deze drukken te voorspellen is gebaseerd op het behoud van massa en de wet van Darcy, die stroming in poreuze media voorspelt. Na een aantal vereenvoudigingen blijkt dat we de diffusievergelijking

$$-\text{div}(\sigma \nabla p) = 0, \tag{1}$$

moeten oplossen met geschikte randvoorwaarden. Hierbij is p de vloeistofdruk en σ de permeabiliteit. De aardkorst heeft vaak een gelaagde structuur (zie Figuur 1) waarbij hoog permeabele lagen (bijvoorbeeld zandsteen, $\sigma = 1$) afgewisseld worden door bijna ondoorlatende lagen (bijvoorbeeld leisteen, $\sigma = 10^{-7}$).

Om de oplossing te benaderen wordt (1) gediscretiseerd met behulp van de eindige elementen methode. Het resulterende lineaire stelsel moet daarna opgelost worden, met behulp van een numerieke lineaire algebra methode. In de praktijk hebben we het over zeer grote 3 dimensionale gebieden (horizontaal 10-100 km, verticaal 1-10 km). Dit betekent dat er veel elementen gebruikt moeten worden, zodat de oplosvector meer dan 1 miljoen componenten kan bevatten. Het oplossen van zo'n groot stelsel met Gauss eliminatie is onmogelijk. Het benodigde computergeheugen is er niet. Bovendien zou het oplossen veel te lang duren. Daarom worden deze stelsels opgelost met een iteratieve methode.

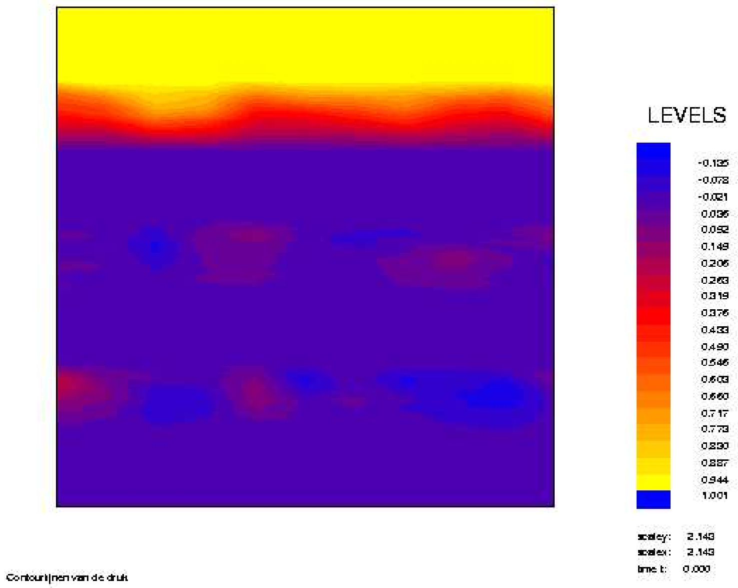
Bij een iteratieve methode is de convergentiesnelheid en het verschil tussen de berekende en de exacte oplossing van groot belang. Beide aspecten hangen af van de eigenwaarden van de matrix. Omdat σ veel verschilt in de zand- en leisteenlagen betekent dit dat de verhouding tussen de grootste en de kleinste eigenwaarden van de orde 10^7 is. Dit leidt tot

Figuur 2: Geometrie van een eenvoudig probleem

trage convergentie en een grote fout in de benaderende oplossing.

Ter illustratie beschouwen we een eenvoudig probleem: De geometrie van het probleem staat in Figuur 2 We hebben de randvoorwaarden zo gekozen dat de exacte oplossing constant 1 is.

Het probleem wordt eerst opgelost met de standaard iteratieve methode. We stoppen de berekening als $\|b - Ax_k\|_2 \leq 10^{-2}\|b\|_2$. De berekende oplossing is niet goed, zoals blijkt uit Figuur 3. De druk is alleen gelijk aan 1 in de bovenste zandsteenlaag. In de daarop-

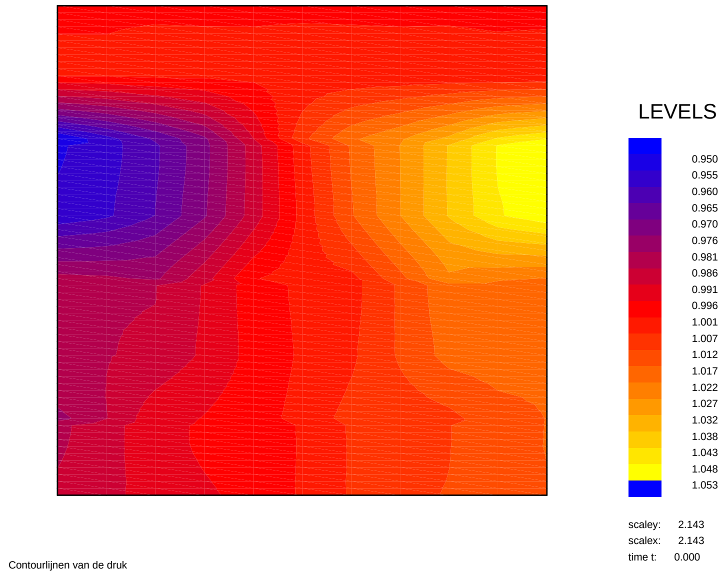


Figuur 3: De oplossing bepaald met de oude methode

volgende leisteenlaag zakt de druk naar 0. In de lagen daaronder blijft de druk ongeveer 0. De afwijking van de exacte druk wordt veroorzaakt door 3 kleine eigenwaarden van de discretisatie matrix. Hoe kunnen we dit probleem oplossen? Het idee is om het stelsel zo aan te passen, dat de 3 kleine eigenwaarden geen rol meer spelen. We hebben dit gedaan met behulp van een deflatie met de eigenvectoren behorend bij de kleine eigenwaarden. Een deflatie is een projectie. Het toepassen van een deflatie op een vector zorgt er voor dat de componenten in de richting van de 'kleine' eigenvectoren verdwijnen. Combinatie van de deflatie en de iteratieve methode leidt tot een goede oplossing (zie Figuur 4, waarbij opgemerkt moet worden dat de verschillende kleuren waarden aangeven tussen 0.95 en 1.05).

Dit idee werkt blijkbaar goed maar is het ook efficiënt? Hiervoor hebben we een methode gevonden om de 'kleine' eigenvectoren te benaderen met vectoren, die veel nullen bevatten. Dit geeft een robuuste en efficiënte oplosmethode. Het idee voor de benaderende eigenvectoren is gebaseerd op fysische argumenten.

Bij dit onderzoek is actief meegewerkt door een aantal afstudeerstudenten in samenwer-



Figuur 4: De oplossing bepaald met de nieuwe methode

king met onderzoekers van Shell. De methode en de resultaten zijn gepresenteerd in een tijdschriftartikel en op een aantal internationale conferenties. Dit laatste was spannend omdat andere onderzoekers ook bezig zijn met dit probleem. Het bleek dat onze groep net iets voorliep. Onlangs hebben onderzoekers in Leuven onze methode toegepast op een elektro-statisch probleem. De resultaten waren verbluffend goed volgens hen. Verder blijkt de methode ook gebruikt te kunnen worden bij het modelleren van elektriciteitsnetwerken, grondwaterstroming, halfgeleiders en elektromagnetische verschijnselen.

We hopen dat dit artikel heeft laten zien dat de numerieke lineaire algebra nog steeds springlevend is.