
Abstract

The numerical solution of strongly coupled systems of partial differential equations (PDE systems) is commonplace in many simulation codes. Typically, large sparse matrix equations arise in the corresponding simulation runs. A serious bottleneck in performing realistic, large-scale simulations is the speed by which these matrix equations can be solved. If they exceed a certain size, they can no longer be solved efficiently with standard numerical solvers, simply because these solvers are not scalable.

Classical algebraic multigrid (AMG) approaches are known to provide robust and efficient, *scalable* solvers or preconditioners for large classes of matrices as those typically arising from *scalar* PDE systems. However, because classical AMG is based on a so-called variable-based approach which does not distinguish between physical unknowns, extensions of classical AMG are required to efficiently solve *systems* of PDEs. In general, many important types of PDE systems have not been tackled by any AMG approach yet. Moreover, an “AMG software” suitable for many industrially relevant problems has been missing so far. This PhD thesis makes the following important contributions.

We develop a general AMG methodology which is suitable for important classes of industrially relevant PDE systems. Our AMG methodology extends classical AMG by a straightforward unknown- and a particularly powerful point-based strategy. In particular, a general concept for point-based approaches is introduced, which employs a primary matrix to construct a point-based coarsening. Several possibilities for selecting a primary matrix and for constructing the interpolation are discussed from a theoretical and, with special emphasis, a practical point of view.

We realize our AMG methodology within the product-quality solver library SAMG. In particular, we demonstrate that, in practice, all (accelerated) AMG approaches being part of SAMG are scalable if applied to proper classes of applications. Memory requirements are reasonable compared to the requirements of standard one-level preconditioners such as ILU(0). SAMG can easily be plugged into existing simulation codes and provides a rich environment allowing for many different AMG approaches.

We demonstrate the generality and flexibility of the proposed AMG methodology as well as the efficiency of concrete SAMG approaches for a variety of PDE systems. In particular, three important classes of applications arising in industrial semiconductor process and device simulation are discussed, namely stress analysis (linear elasticity problems), reaction-diffusion and drift-diffusion simulation. Reaction-diffusion and, in particular, drift-diffusion systems are numerically very challenging applications which have not been solved before by any AMG approach. For each application, it is shown by means of both heuristical justifications as well as numerical results that SAMG allows to construct robust and efficient AMG approaches even for cases, where state-of-the-art one-level solvers employed in standard simulation codes exhibit bad convergence or even fail.

Key words: algebraic multigrid (AMG), systems of partial differential equations (PDE systems), unknown-based approach, framework of point-based approaches, semiconductor process and device simulation, linear elasticity, stress analysis, reaction-diffusion systems, drift-diffusion systems.

Zusammenfassung

Die numerische Lösung stark gekoppelter Systeme partieller Differentialgleichungen (Systeme von PDGln.) ist allgegenwärtig in vielen Simulationscodes. Üblicherweise müssen sehr große dünnbesetzte Matrixgleichungen in den entsprechenden Simulationsläufen gelöst werden. Die Geschwindigkeit, mit der diese Gleichungen gelöst werden können, entscheidet wesentlich über die Größe und damit Wirklichkeitsnähe der Simulationen. Da Standardlöser nicht skalieren, sind sie aber nicht effizient für sehr große Matrizen.

Klassische algebraische Mehrgitterverfahren sind bekanntermaßen robuste und effiziente *skalierbare* Löser oder Vorkonditionierer für große Matrizenklassen, wie sie typischerweise von *skalaren* PDGln. herrühren. Da klassisches AMG auf einem sogenannten variablenbasierten Ansatz beruht, welcher nicht zwischen physikalischen Unbekannten unterscheidet, sind Erweiterungen nötig, um auch *Systeme* von PDGln. effizient lösen zu können. Generell sind AMG-Ansätze für viele wichtige Systeme von PDGln. noch nicht erfolgreich gewesen. Überdies fehlte bisher eine "AMG-Software", die sich für viele industriell relevante Probleme eignet. Diese Dissertation liefert folgende wichtige Beiträge.

Wir entwickeln eine generelle AMG-Methodologie, die sich auf viele relevante Systeme von PDGln. anwenden lässt. Unsere Methodologie erweitert klassisches AMG durch eine naheliegende unbekanntens- sowie eine besonders wirkungsvolle punkt-basierte Strategie. Insbesondere wird ein generelles Konzept für punkt-basierte Ansätze eingeführt, welches eine primäre Matrix zur Konstruktion einer punkt-basierten Vergrößerung verwendet. Mehrere Möglichkeiten für die Auswahl der primären Matrix und der Interpolation werden sowohl von einem theoretischen als auch - schwerpunktmäßig - einem praktischen Standpunkt diskutiert.

Wir realisieren unsere AMG-Methodologie in der marktreifen Löserbibliothek SAMG. Insbesondere demonstrieren wir, dass in der Praxis alle (beschleunigten) AMG-Verfahren für geeignete Problemklassen skalieren. Der Speicherverbrauch ist dabei sehr moderat im Vergleich zu Standard-Einlevel-Vorkonditionierern wie etwa ILU(0). SAMG lässt sich einfach in existierende Simulationsprogramme einbauen und bietet eine sehr variantenreiche AMG-Umgebung.

Wir demonstrieren die Allgemeinheit und Flexibilität der vorgeschlagenen AMG-Methodologie sowie die Effizienz konkreter SAMG-Verfahren für eine Vielzahl von Systemen von PDGln. Insbesondere werden drei wichtige Anwendungen aus der industriellen Halbleitersimulation diskutiert, nämlich Stress-Analyse (lineare Elastizität), Reaktions-Diffusions- und Drift-Diffusions-Systeme. Die letzten zwei und hierbei insbesondere die letzte Anwendung stellen große numerische Herausforderungen dar und wurden bisher noch nicht erfolgreich mit AMG-Verfahren gelöst. Für jede Anwendung zeigen wir anhand von Heuristika und numerischen Resultaten, dass SAMG die Konstruktion robuster und effizienter AMG-Verfahren erlaubt, und das sogar für Fälle, wo die typischerweise in Standard-Simulationsprogrammen eingesetzten Einlevel-Löser schlecht konvergieren oder sogar fehlschlagen.

Schlagwörter: algebraisches Mehrgitter (AMG), Systeme partieller Differentialgleichungen, unbekanntensbasierter Ansatz, Umgebung für punkt-basierte Ansätze, Halbleiter-Prozess- und Device-Simulation, lineare Elastizität, Reaktions-Diffusions-Systeme, Drift-Diffusions-Systeme.