



中国石油大学
CHINA UNIVERSITY OF PETROLEUM

JET 101

石油工程数值分析及数据可视化方法

王斌

石油工程学院 水射流实验室

邮箱: binwang.0213@gmail.com

CUPB

厚积薄发，开物成物

Python科学计算

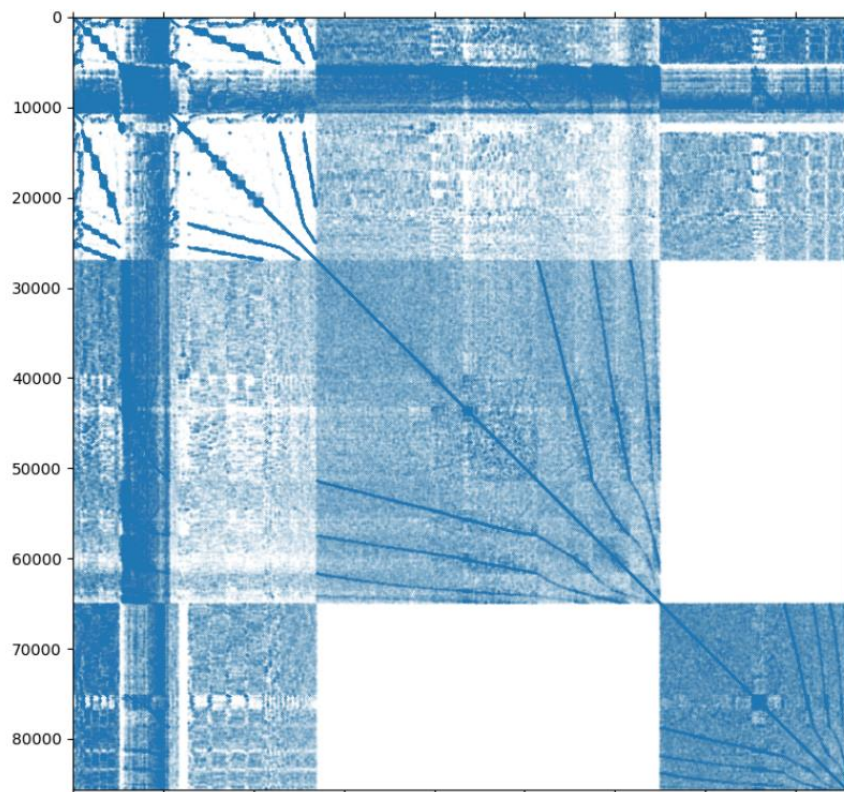
□ 学习目标

学习目标	学习成果	效果考察	课程活动
应该掌握哪些知识？	应该能够做哪些事情？	怎么考察学生？	应该怎么学习？
1. 实战线性方程组解法 <ul style="list-style-type: none">• 数学算法回顾• Scipy库的使用 2. 中期Project答疑 3. 期末Project的Proposal	1. 能够针对数学算法自行编程求解 2. 可以找到对应的库进行求解计算	1. 测试学生是否能编程二分法解非线性方程 2. 测试学生能否寻找并使用scipy 3. 课堂测验简单问题 <ul style="list-style-type: none">• 期末Proposal	1. 完成期中Project 2. 完成作业11, 14 3. 完成期末Project（下学期）

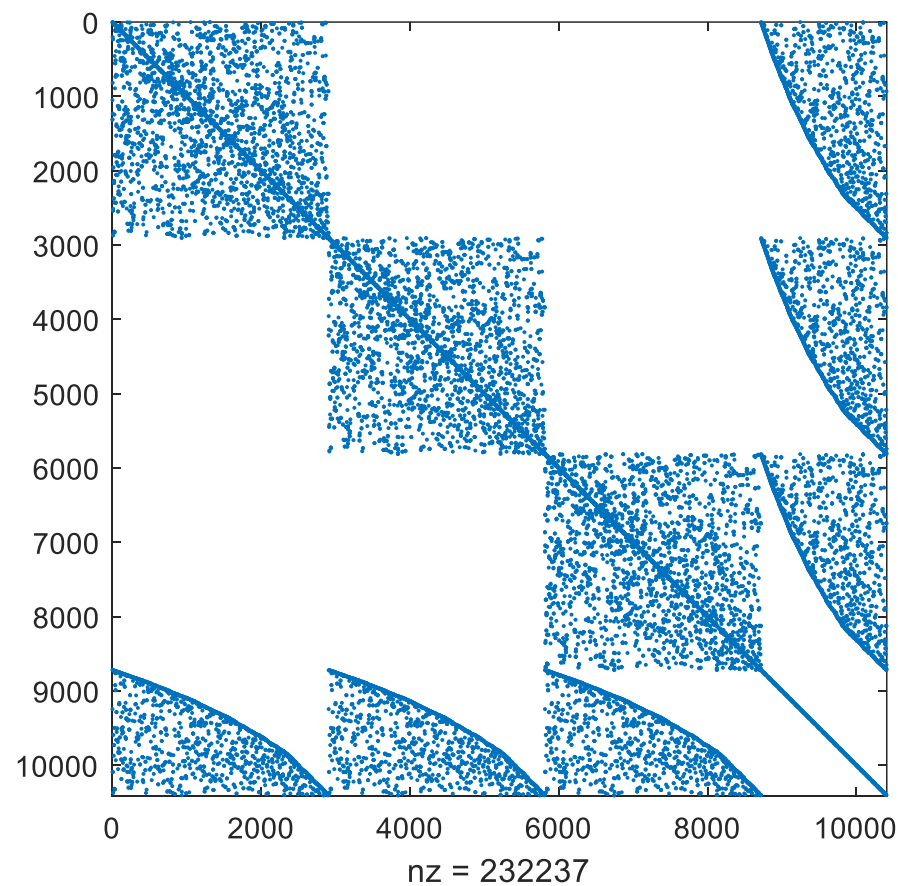


Python科学计算

$$Ax = b$$



3D Poisson Problem



3D Stokes Problem



□ 线性方程组解法

$$Ax = b$$

Direct methods / Direct solver

- Cholesky factorization (LLT)
- Bunch-Kaufman factorization (LDLT)
- LU factorization (LU)

矩阵类型	解法
Symmetric positive definite	LLT 分解
Symmetric indefinite system	LDLT 分解
Unsymmetric	LU 分解

Iterative methods / Iterative solver

- Conjugate gradient
- GMRES
- BiCGStab
- Bi-Conjugate gradient
- IDR(s)



Python科学计算

□ 线性方程组解法

$$Ax = b$$

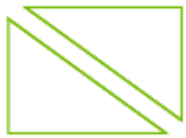
Direct methods / Direct solver

PARDISO

MUMPS: MULTifrontal Massively

Parallel sparse direct Solver

**SPOOLES 2.2 : SParse Object Oriented
Linear Equations Solver**



cuSOLVER



SuperLU

Iterative methods / Iterative solver

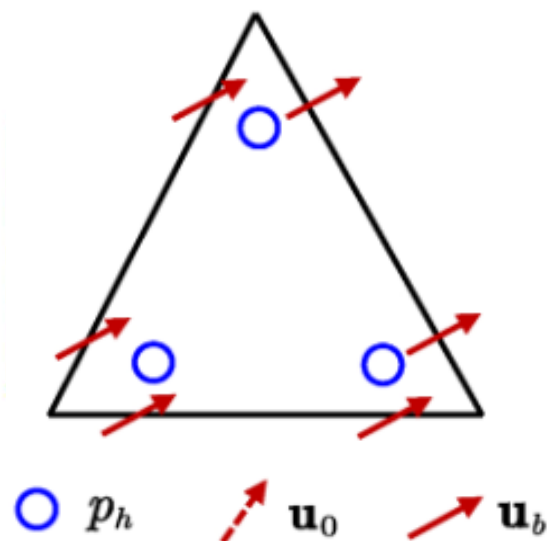
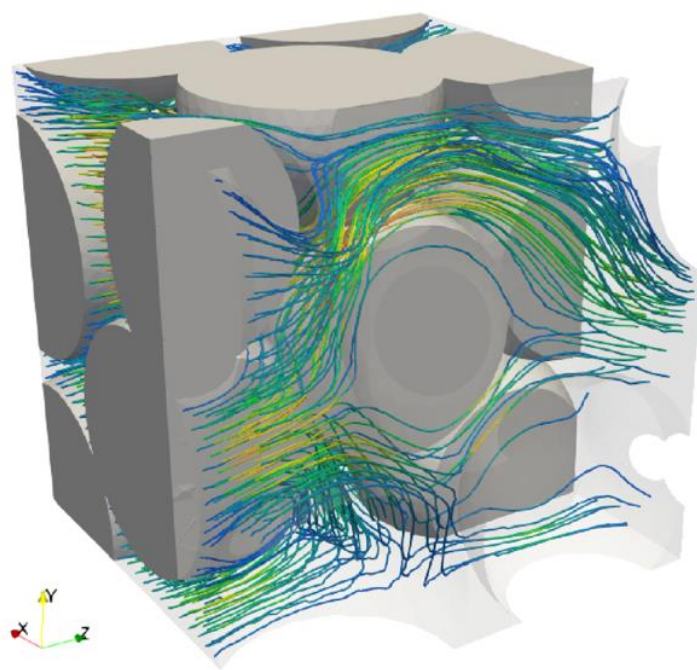
 **PETSc**



AmgX



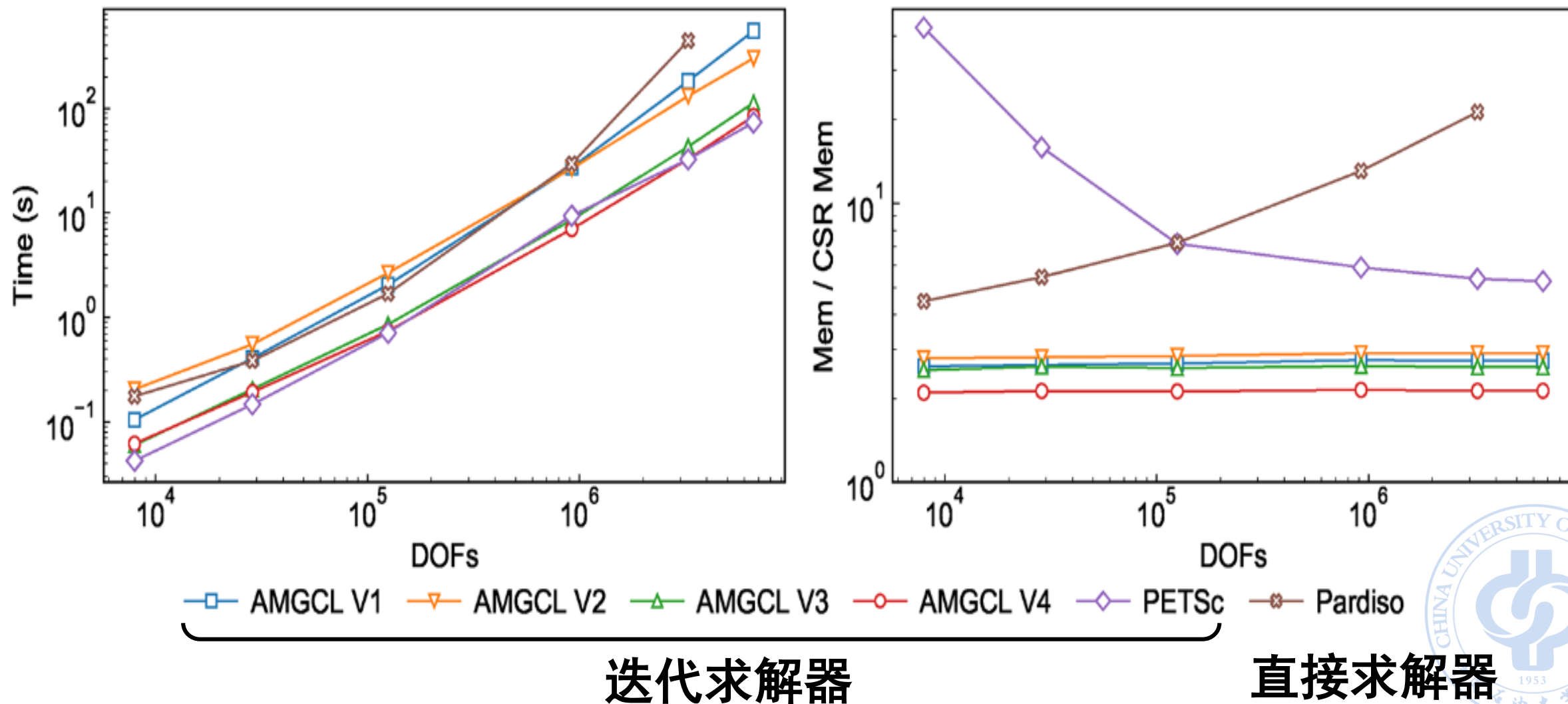
□ 线性方程组解法



Cells	DOFs	CSR memory
9487	238 810	176.87 Mb
19 373	483 509	397.01 Mb
36 430	896 257	687.07 Mb
63 382	1 537 891	1.18 Gb
100 255	2 405 788	1.87 Gb
259 009	6 089 212	4.90 Gb
404 019	9 420 534	7.96 Gb

Python科学计算

□ 线性方程组解法



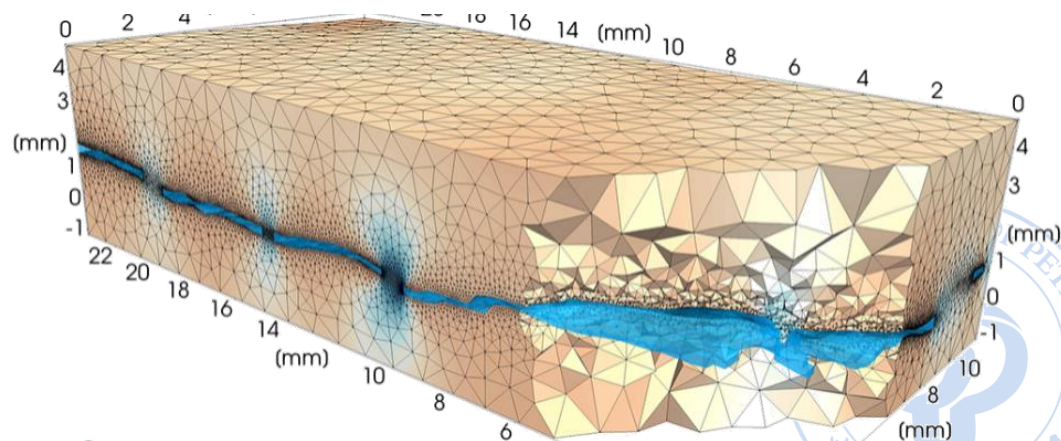
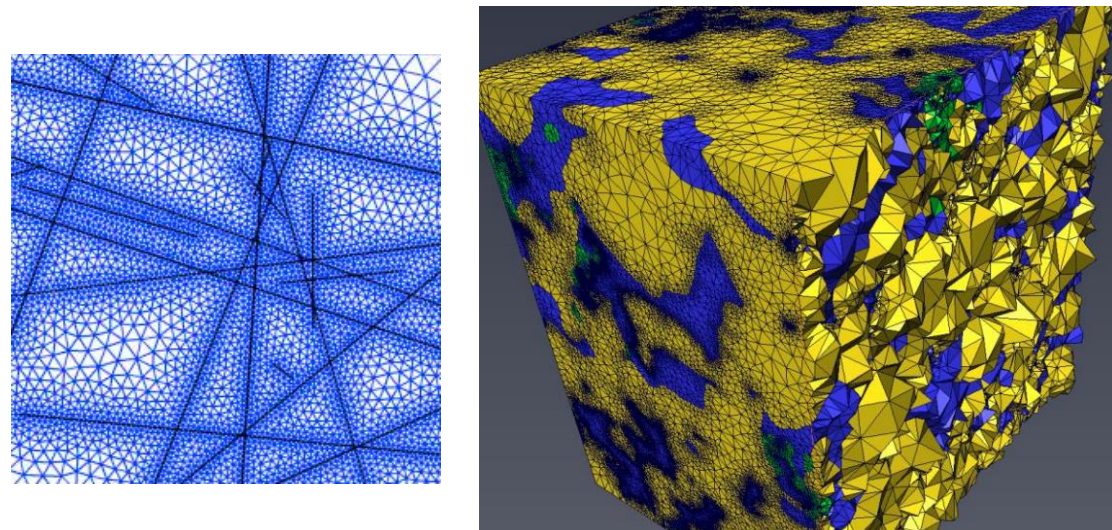
□ 线性方程组解法

Direct methods / Direct solver

- 百万自由度以下问题（2D，简单物理问题）
- 不需要调整参数
- 内存要求高（10GB/MDOFs）

Iterative methods / Iterative solver

- 大规模问题（3D，多物理场）
- 不同问题需要研究针对性的求解器
- 收敛性不能够保证



<https://doi.org/10.5194/adgeo-49-95-2019>

Python科学计算

□ 线性方程组解法 – 高斯消元

$$A \mathbf{x} = LU \mathbf{x} = L(U \mathbf{x}) = \mathbf{b} \quad L \mathbf{y} = \mathbf{b}, U \mathbf{x} = \mathbf{y}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & -1 \\ 3 & -1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & -1 \\ 3 & -1 & -1 \end{bmatrix} \xrightarrow{E_2 - 2E_1} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 3 & -1 & -1 \end{bmatrix} \xrightarrow{E_3 - 3E_1} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & -4 & -1 \end{bmatrix} \xrightarrow{E_3 - 4E_2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} = U$$

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{E_3 + 4E_2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{E_3 + 3E_1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{E_2 + 2E_1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{bmatrix} = L$$



Python科学计算

□ 线性方程组解法 – 高斯消元

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 2 & -2 & 3 & -3 \\ 1 & -1 & 4 & 3 \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} -8 \\ -2 \\ -20 \\ 4 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 2 & 4 \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} -8 \\ 6 \\ -4 \\ 12 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{x} = [-7 \quad 3 \quad 2 \quad 2]$$

- 运算中，共计算了多少次乘法和加法？

Steps	
1	For $i = 1, \dots, n$ do Step 4
4	For $j = i + 1, \dots, n$ do Steps 5-6
5	set $m_{ji} = a_{ji}/a_{ii}$
6	Perform $E_j = (E_j - m_{ji}E_i)$
7	Set $x_n = a_{n,n+1}/a_{nn}$
8	For $i = n - 1, \dots, 1$ do Step 9
9	$x_i = \left(a_{i,n+1} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j \right) / a_{ii}$

Python科学计算

□ 线性方程组解法 – 高斯消元

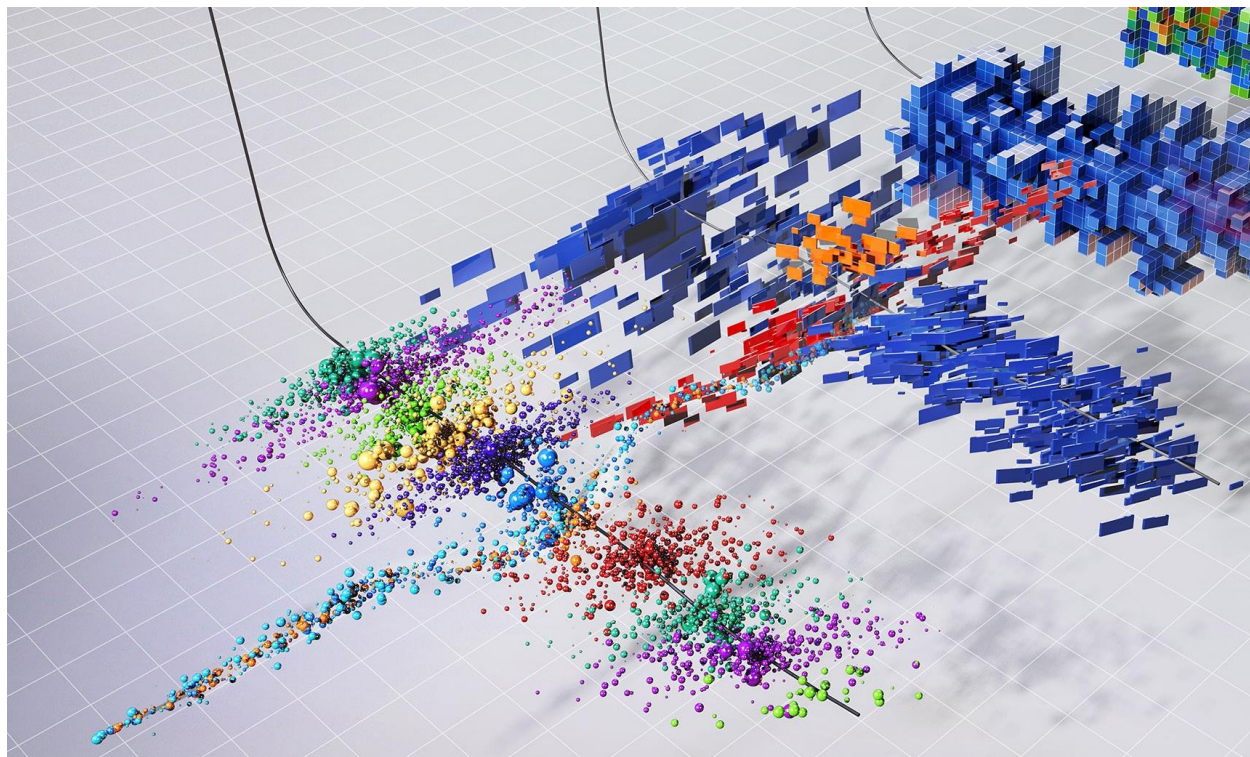
$$A = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 2 & -1 \\ 2 & -2 & 3 & -3 \\ 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & -1 & 4 & 3 \end{bmatrix} \quad \mathbf{b} = \begin{bmatrix} -8 \\ -20 \\ -2 \\ 4 \end{bmatrix}$$

Steps	
1	For $i = 1, \dots, n$ do Steps 2-4
2	Find p , where p is the largest number with $i \leq p \leq n$
3	If $p \neq i$, then exchange row i with row p
4	For $j = i + 1, \dots, n$ do Steps 5-6
5	set $m_{ji} = a_{ji}/a_{ii}$
6	Perform $E_j = (E_j - m_{ji}E_i)$
7	Set $x_n = a_{n,n+1}/a_{nn}$
8	For $i = n - 1, \dots, 1$ do Step 9
9	$x_i = \left(a_{i,n+1} - \sum_{j=i+1}^n a_{ij}x_j \right) / a_{ii}$

课程大作业

□ 期中大作业

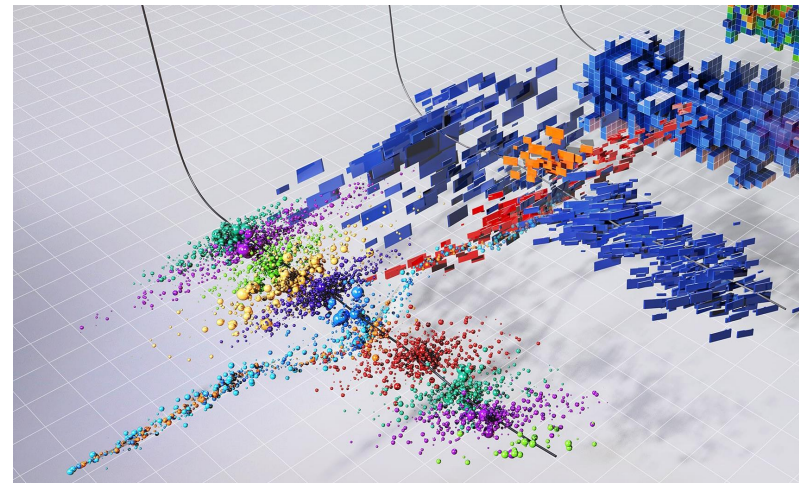
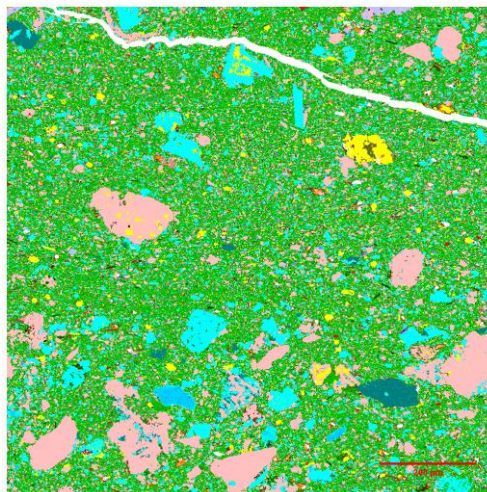
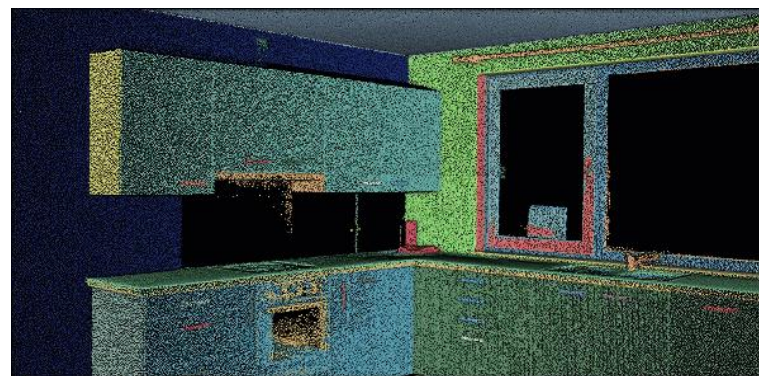
- 组队或者单人（不超过3人）
- OnePetro阅读文献，从一个角度
- xlwings读单井数据Excel
- Matplotlib画2D井眼轨迹
- Matplotlib微地震散点图
- PyVista三维画图（奖励任务）



课程大作业

□ 期末大作业选题

- QEMSCAN数字岩心矿物分割与分析
- 3D裂缝地层COMSOL网格转换
- 3D井眼轨迹与微地震数据可视化
- 3D微地震点云裂缝网重构*
- 超临界CO₂状态SW方程求解
-



*<https://www.freehowtos.com/how-to-automate-3d-point-cloud-segmentation-and-clustering-with-python/>

Python科学计算

□ 学习目标

学习目标	学习成果	效果考察	课程活动
应该掌握哪些知识？	应该能够做哪些事情？	怎么考察学生？	应该怎么学习？
1. 实战线性方程组解法 <ul style="list-style-type: none">• 数学算法回顾• Scipy库的使用 2. 中期Project答疑 3. 期末Project的Proposal	1. 能够针对数学算法自行编程求解 2. 可以找到对应的库进行求解计算	1. 测试学生是否能编程二分法解非线性方程 2. 测试学生能否寻找并使用scipy 3. 课堂测验简单问题 <ul style="list-style-type: none">• 期末Proposal	1. 完成期中Project 2. 完成作业11, 14 3. 完成期末Project（下学期）



Python科学计算

□ 线性方程组解法 – 高斯消元

$$A \mathbf{x} = LU \mathbf{x} = L(U \mathbf{x}) = \mathbf{b} \quad L \mathbf{y} = \mathbf{b}, U \mathbf{x} = \mathbf{y}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & -1 \\ 3 & -1 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 2 & 1 & -1 \\ 3 & -1 & -1 \end{bmatrix} \xrightarrow{E_2 - 2E_1} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 3 & -1 & -1 \end{bmatrix} \xrightarrow{E_3 - 3E_1} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & -4 & -1 \end{bmatrix} \xrightarrow{E_3 - 4E_2} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix} = U$$

$$I = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{E_3 + 4E_2} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{E_3 + 3E_1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{E_2 + 2E_1} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 2 & 1 & 0 \\ 3 & 4 & 1 \end{bmatrix} = L$$

