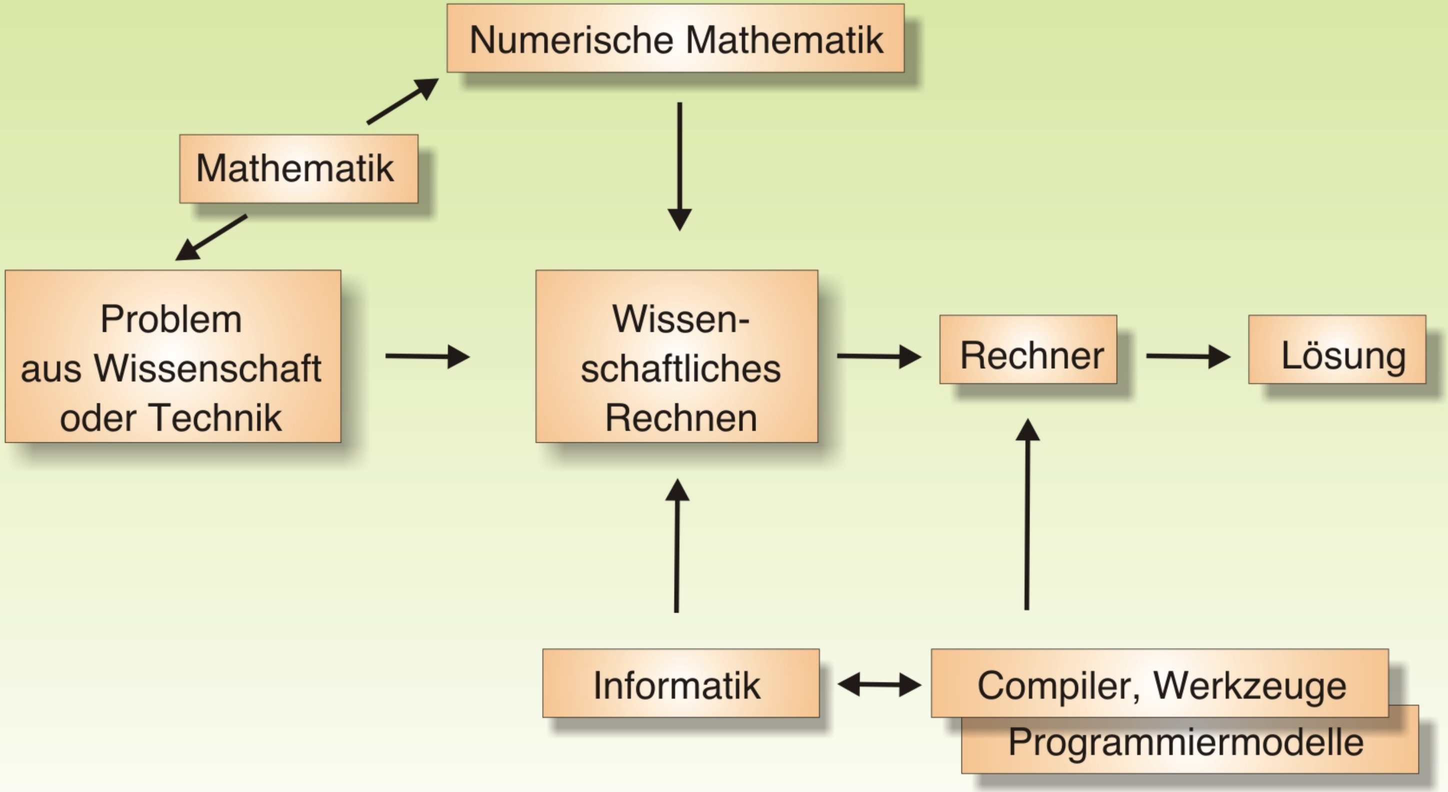
Wissenschaftliches Rechnen

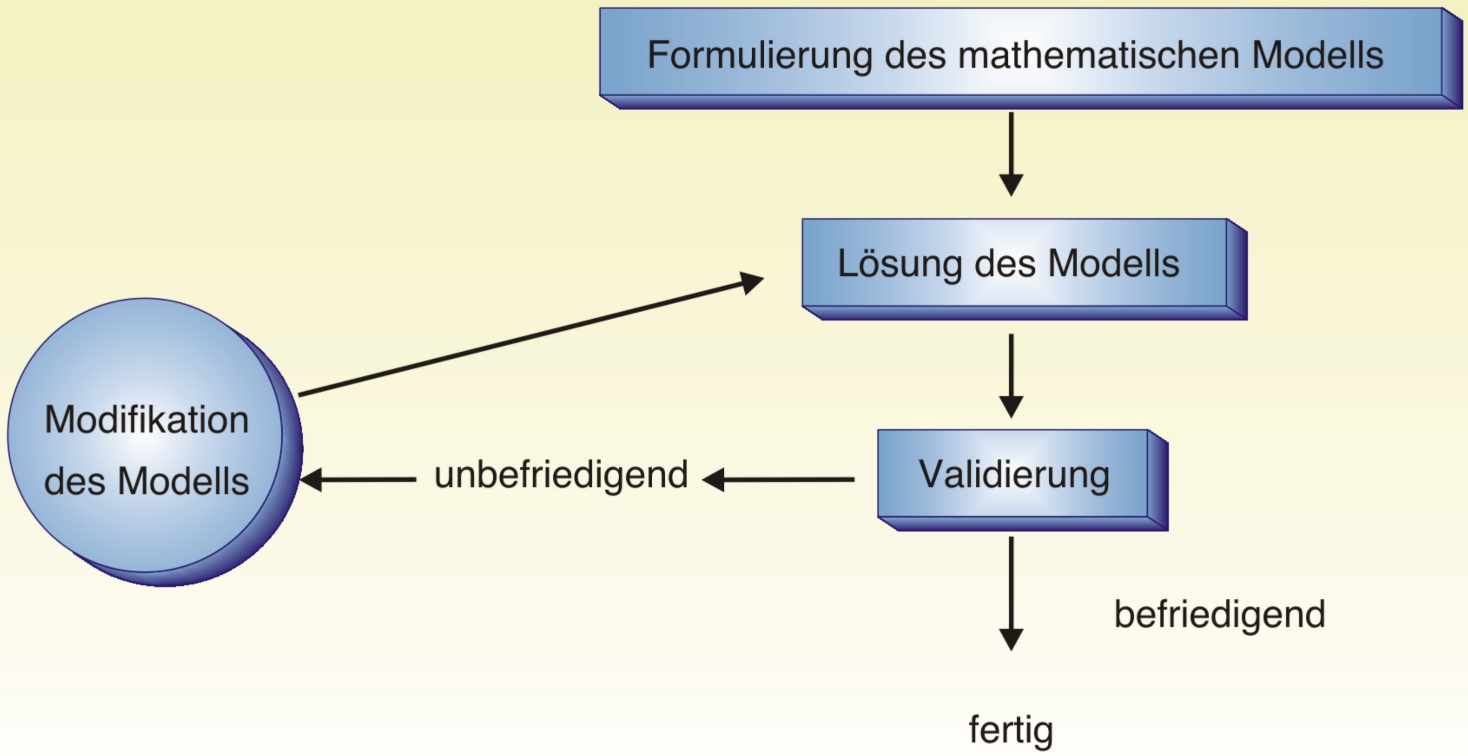
Kap 1. ***Einführung:"Die Begriffe und das Konzept des wissenschaftlichen Rechnens"***

- Was ist wissenschaftliches Rechnen
- Mathematische Modellbildung
- Der numerische Lösungsprozeß
- Höstleistungrechner als Teil des Lösungsprozesses
  - Trends im Rechnerdesign & Rechnertechnologie
  - Grenzen des klassischen Rechendesigns (v. Neumannn Prinzip & seine Auswirkungen)
  - Einprozessor Architektur & inhärente Parallelität des Rechnerdesigns
    - Mehrfache Funktionseinheiten
    - Pipelining
    - Instruktionssatz: RiSC versus CiSC
- Nebenläufigkeit (Superskalaritätsprinzip)
- Vektor-Instruktionssatz (Vektorrechner)
- Haupt-Speicher Organisation & Cache Hierarchie
- Beispiele & Diskussion der inhärenten Parallelität bei Einprozessor System
  - Mehrprozessor Architektur
  - Programmier Modelle
  - Compiler und Basis-Libraries

Wissenschaftliches Rechnen



Die mathematische Modellbildung und der Lösungsprozeß



Wissenschaftliches Rechnen

Einführung

Was ist Wissenschaftliches Rechnen:

= Einsatz von **Rechnertechnologie, mathematischer Modellbildung** und **algorithmischem Design** (zur Effizienzsteigerung)
zur Lösung von Problemen aus Wissenschaft und Technik

=> Verfahren die solche Lösungen liefern sind Bestandteil des Gebiets des wissenschaftlichen Rechnens

Allgemein gilt:

Wissenschaftliches Rechnen umfasst alle Werkzeuge & Algorithmen (auch Hilfmittel, Fertigkeiten, Theorien,..) zur effizienten Lösung von Problemen aus Wissenschaft & Technik mittels Mathematischer Modellbildung und Lösung auf einem (Höchstleistungs-) Rechnersystem

Einführung

Modellbildung:

Für viele Probleme lassen sich die zugrunde liegenden physikalischen Gesetzmäßigkeiten in Form einer (z.B. elliptischen) Differenzialgleichung darstellen (s. §2)

Z. B. a) Wärmeleitungsgleichung (in elektrischer Spule)

$$\frac{\delta^2 u}{\delta x^2} + \lambda \frac{\delta^2 u}{\delta y^2} = \frac{q}{K}$$

u = Temperatur

K = Leitfähigkeit $\frac{\text{Wärmefluss}}{}$

q = Anzahl Einheiten $\frac{\text{Wärme/Fläche}}{s}$

b) Bewegungsgleichung für Strömungsmechanik

$$\frac{\delta \tilde{u}}{\delta t} + \frac{\delta F(\tilde{u})}{\delta x} = 0$$

$\tilde{u}, \tilde{F}$ - Funktional

3D Strömungsfeld $\tilde{u} = \begin{pmatrix} u_x \\ u_y \\ u_z \end{pmatrix}$

Wissenschaftliches Rechnen

Einführung

Validierung des Modells

Die Überprüfung des mathematischen Modells eines z.B. physikalischen Sachverhalts stellt sicher, dass die Lösung mit hinreichender Genauigkeit das gestellte Problem erfüllt.

Fehlerquellen:

a) numerische Rechenfehler durch
- Diskretisierungsgenauigkeit und
- Abbruchfehler bei iterativen Verfahren (Konvergenzfehler, stagnierende Residuen, ...)
- Fehlerakkumulation bei zeitlicher Vorwärts-Integration

b) ggfs unzulässige
- Vereinfachung des Modells, nicht ausreichende räumliche/zeitliche Diskretisierung,..
- Dazu Modellverifikation :
- Vergleich mit Daten (zur Überprüfung der Modellgenauigkeit mit Experimentdaten, Beobachtungsdaten,...)
- Parametrisierung nicht aufgelöster Prozesse,...

Nach Analysen der Fehlerquellen erfolgt Modifikation des Modells (mathematische Modellgleichungen) und ggfs. Verbesserungen der numerischen Verfahren. Bei komplexen Problemen auch *Parallelisierung* um Rechenzeit zu senken.

Wissenschaftliches Rechnen

Einführung

Numerischer Lösungsprozess:

Nach mathematischer Modellbildung zuerst Suche nach analytischen Lösungen des Modells (ggfs. auch Vereinfachung des Modells auf Elementare Form suchen)

Dies sind Kontrollfälle, die das allgemeine Modell erfüllen muss.
(Nullte Ordnungs-Lösungen)

−Numerische Empfindlichkeit des Modells auf Störungen
(evtl.schlecht konditioniertes Problem)

−Ill-posed problem (numerische Lösung ist entweder so instabil, dass sie sinnlos wird, oder existiert nur auf Teilmenge des Lösungsgebiets, Pseudolösungen, grosse Bandbreite von Correct – zu Ill-posed Problem und Inverses Problem,..)

−Diskretisierungsfehler/Abschneidefehler, Auslöschungsfehler,..

−Iterative Verfahren/Konvergenzprobleme,

−- Rechenkomplexität des Modells (Speicheranforderung, Algorithmische Komplexität)

Einführung
Algorithmische Effizienz

−Struktur: sequentiell / Parallel

−algorithmische Komplexität: Speicher / Operationelle — Komplexität

Beispiel: Cramersche Regel zu Lösung LGS

(Kern: Bilde viele Quotienten von Determinanten)

=> n x n Matrix : n! Produkte von Matrixelementen

$$\left.\begin{array}{r}\text{schon bei } n = 20\\ 1\ \text{Op/us}\end{array}\right\} \Rightarrow\ > 10^6 a\ \text{Rechenzeit!}$$

Gauß Verfahren => $5.10^{-3} s$ Rechenzeit!

Fluch der Dimension (Golub und Ortega 1992)

Poisson Problem 2D

$$u_{xx} + u_{yy} = f \ \ \mathrm{int}\,\Omega \quad \textbf{und} \quad u_{xx} + u_{yy} = g(x,y) \ \ \partial\Omega$$

Diskretisierung durch finite Differenzen (Five-Point stencil) auf dem Einheitsquadrat.

Dies führt auf ein Gleichungssystem n $(N+2)^2$ Unbekannten der Form:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} & & & \mathbf{S} \\ T & -I & & \\ -I & \ddots & \ddots & \\ & \ddots & \ddots & -I \\ & & -I & T \end{bmatrix}}_{\mathbf{A}} \begin{bmatrix} u_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ u_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 & -h^2 f_1 \\ & \\ & \\ b_N & -h^2 f_N \end{bmatrix}$$

Mit T, I $\in R^{NxN} \Rightarrow A \in R^{N^2 x N^2}$

Man kann zeigen: A ist eine Bandmatrix mit 5 nichtverschwindenden Diagonalelementen.

Die Bandbreite von A ist dabei N.

Fluch der Dimension

Poisson Problem in 3D

$$u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} = f \quad \text{int}\,\Omega$$

und $u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} = g(x,y,z) \quad \partial\Omega$

Diskretisierung durch finite Differenzen führt auf analoges Gleichungsystem

mit N^3 **Unbekannten. Die Bandbreite von A ist** N^2

LU Zerlegung für Bandmatrizen operationelle Komplexität (Golub Formel)

Für nxn **Bandmatrizen der halben Bandbreite** β **werden für die LU Zerlegung**

$$\sum (Add + Mult) = n\beta^2 - \frac{2}{3}\beta^3$$

Rechenoperationen benötigt.

Fluch der Dimension

Anwendung auf das Poisson Problem:

2D: $\beta = N$ **und** $n = N^2 \Rightarrow \sum(Add + Mult) = n\beta^2 - \frac{2}{3}\beta^3 = O(N^4)$

Falls $N = 100$ **: D.h.** $N^2 = 10^4$ **und** $A \in R^{10^4 x 10^4}$

Mit 1 Gflop/s Rechenleistung schnell lösbar.

3D: $\beta = N^2$ **und** $n = N^3 \Rightarrow \sum(Add + Mult) = n\beta^2 - \frac{2}{3}\beta^3 = O(N^7)$

Falls $N = 100$ **:** $O(N^{14})$ **Operationen und** $A \in R^{10^7 x 10^7}$

Mit 1 Gflop/s wird bereits etwa $10^5 Sek \cong 28h$ **Rechenzeit benötigt.**