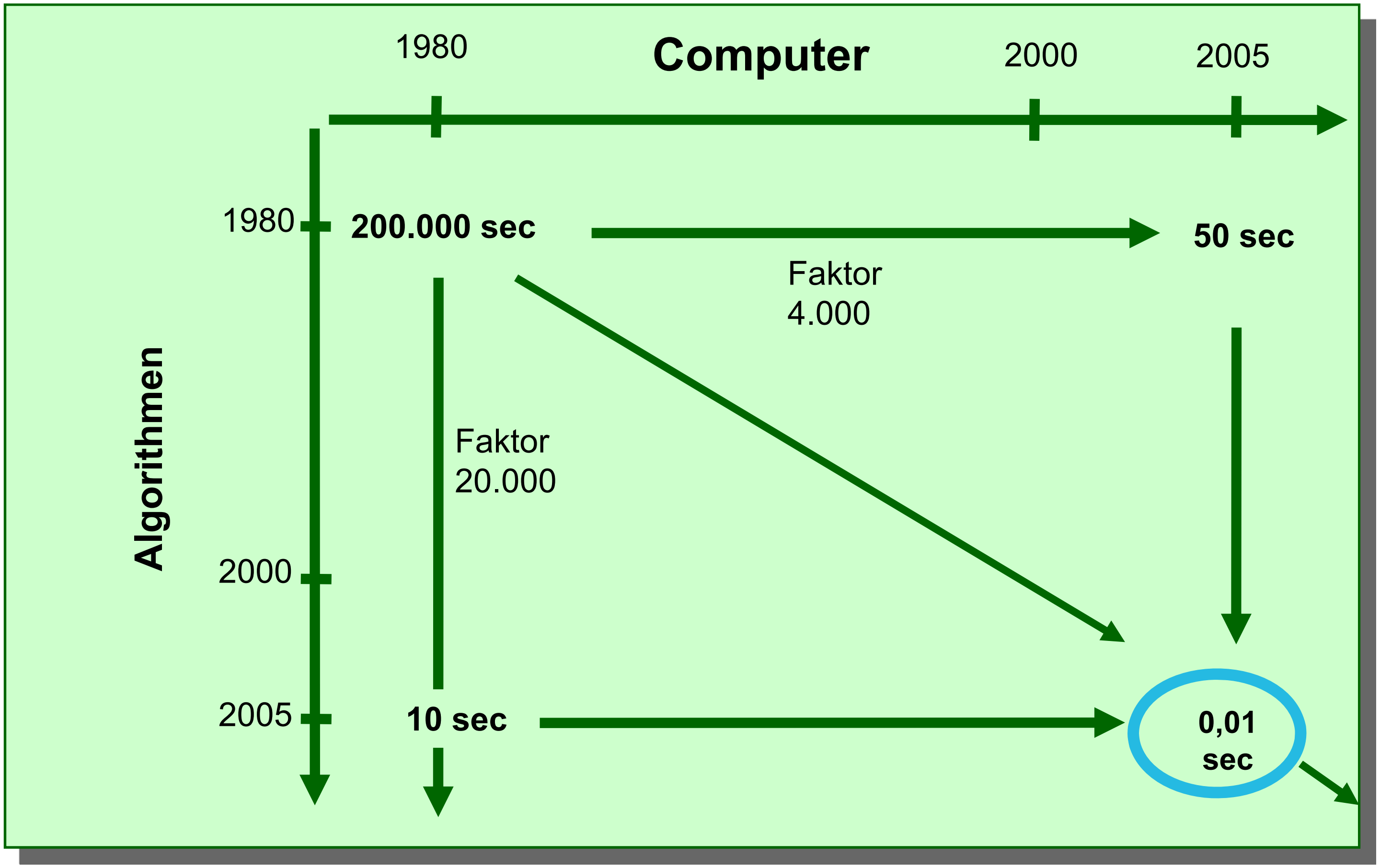
Große Gleichungssysteme

Eine Einführung in Anwendungen und die Bedeutung schneller Algorithmen

Anton Schüller, Ulrich Trottenberg

Fraunhofer Institut
Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI

Algorithmen versus Hardware



Beispiel: Lösung eines großen Gleichungssystems, das bei der Diskretisierung einer Poisson-artigen Differentialgleichung entsteht

Fraunhofer
SCAI

Lösung großer linearer Gleichungssysteme

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + a_{13}x_3 &= b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + a_{23}x_3 &= b_2 \\ a_{31}x_1 + a_{32}x_2 + a_{33}x_3 &= b_3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 8x_1 - 3x_2 + 3x_3 &= 1 \\ 7x_1 + 9x_2 + 2x_3 &= 1 \\ 2x_1 + 3x_2 - 5x_3 &= 1 \end{aligned}$$

oder kurz
Ax = b

Wozu braucht man schnelle Lösungsverfahren?

Wettervorhersage

Euler-Gleichungen

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\rho u)+\frac{\partial}{\partial y}(\rho v)=0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u)+\rho u^2+\frac{\partial}{\partial x}p+\frac{\partial}{\partial y}(\rho uv)=0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v)+\frac{\partial}{\partial x}(\rho uv)+\frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2+p)=0$$

$$\frac{\partial E}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}((E+p)u)+\frac{\partial}{\partial y}((E+p)v)=0$$

$$p-(\gamma-1)\left(E-\frac{1}{2}\rho\left(u^2+v^2\right)\right)=0$$

Wozu braucht man schnelle Lösungsverfahren?

Das Wetter kann mit Hilfe der Euler-Gleichungen modelliert werden:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\rho u)+\frac{\partial}{\partial y}(\rho v)=0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u)+\rho u^2+\frac{\partial}{\partial x}p+\frac{\partial}{\partial y}(\rho uv)=0$$

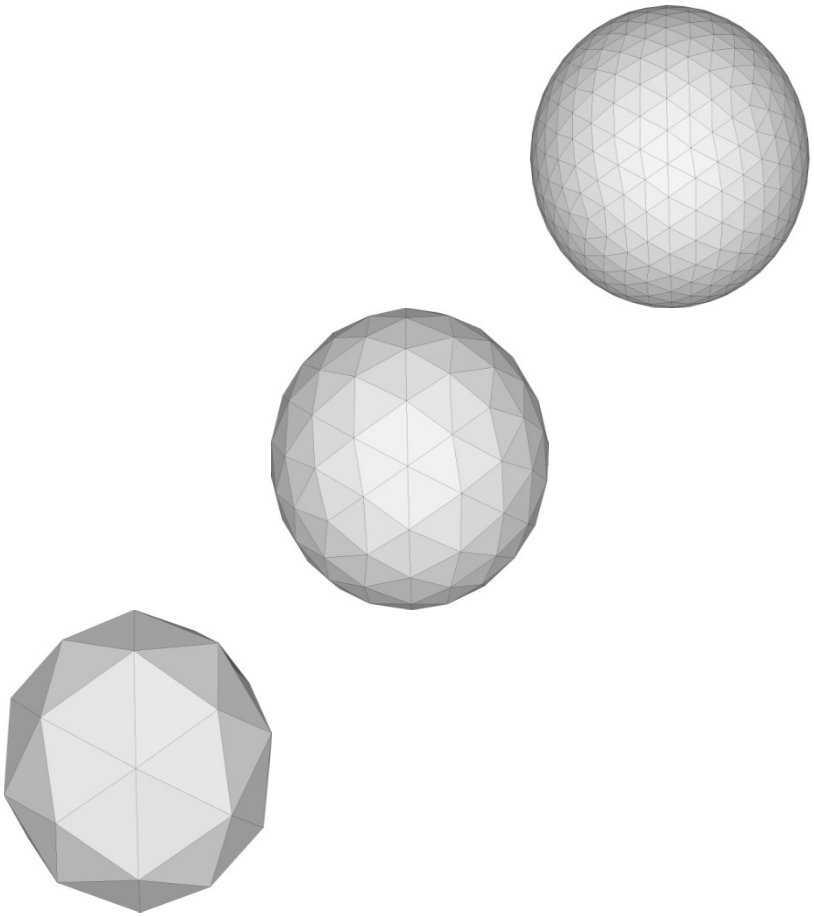
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v)+\frac{\partial}{\partial x}(\rho uv)+\frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2+p)=0$$

$$\frac{\partial E}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}((E+p)u)+\frac{\partial}{\partial y}((E+p)v)=0$$

$$p-(\gamma-1)\left(E-\frac{1}{2}\rho\left(u^2+v^2\right)\right)=0$$

Wozu braucht man schnelle Lösungsverfahren?

Die Euler-Gleichungen können wir mit Ikosaeder-Gittern „diskretisieren“:



$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\rho u)+\frac{\partial}{\partial y}(\rho v)=0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u)+\rho u^2+\frac{\partial}{\partial x}p+\frac{\partial}{\partial y}(\rho u v)=0$$

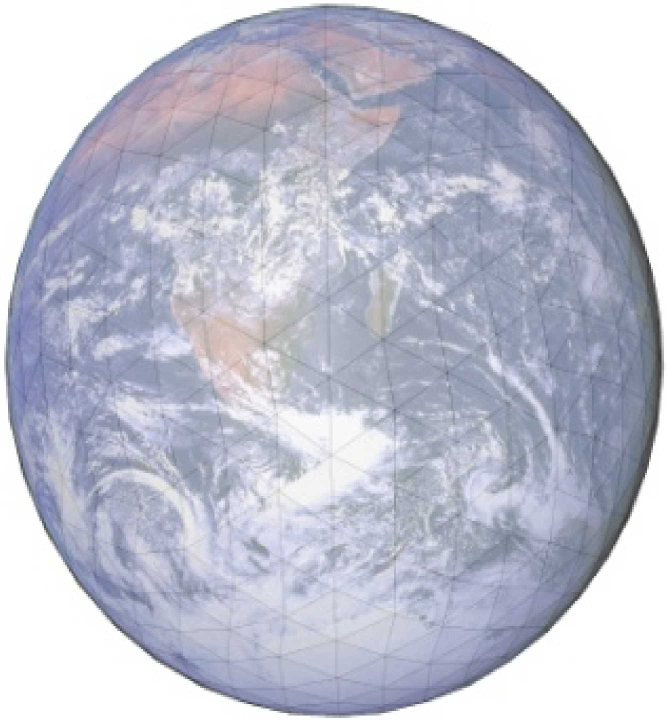
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v)+\frac{\partial}{\partial x}(\rho u v)+\frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2+p)=0$$

$$\frac{\partial E}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}((E+p)u)+\frac{\partial}{\partial y}((E+p)v)=0$$

$$p-(\gamma-1)\left(E-\frac{1}{2}\rho\left(u^2+v^2\right)\right)=0$$

Wozu braucht man schnelle Lösungsverfahren?

Die Erde im Ikosaeder-Gitter“:



$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}(\rho u)+\frac{\partial}{\partial y}(\rho v)=0$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u)+\rho u^2+\frac{\partial}{\partial x}p+\frac{\partial}{\partial y}(\rho uv)=0$$

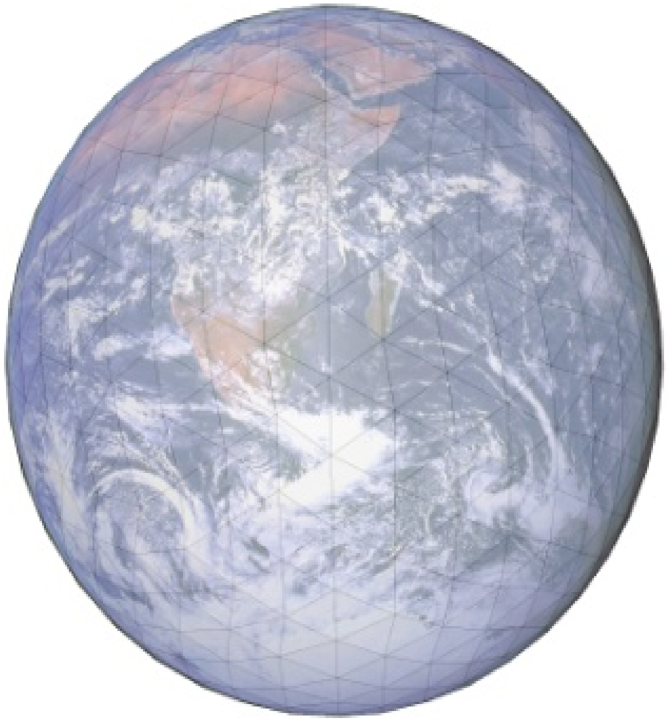
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho v)+\frac{\partial}{\partial x}(\rho uv)+\frac{\partial}{\partial y}(\rho v^2+p)=0$$

$$\frac{\partial E}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial x}((E+p)u)+\frac{\partial}{\partial y}((E+p)v)=0$$

$$p-(\gamma-1)\left(E-\frac{1}{2}\rho\left(u^2+v^2\right)\right)=0$$

Wozu braucht man schnelle Lösungsverfahren?

Die nicht-linearen Euler-Gleichungen …

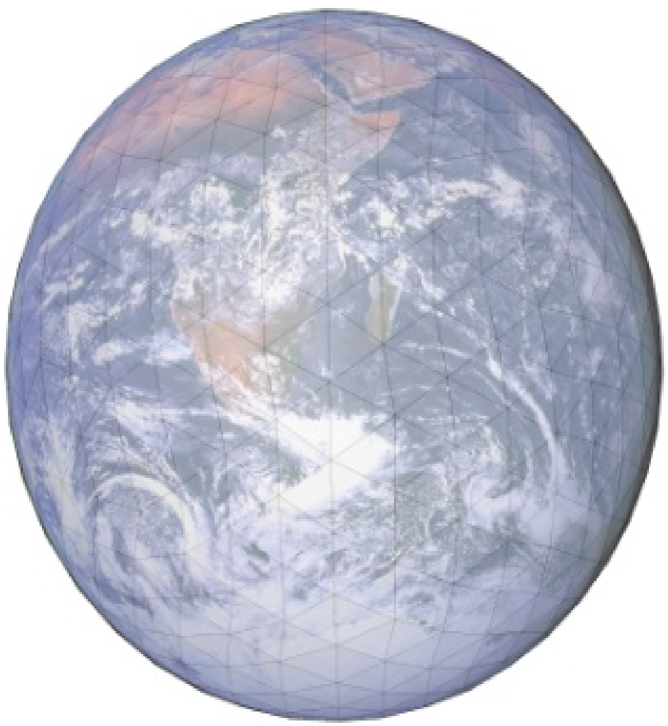


… können wir auf solchen Gittern
diskretisieren
und linearisieren
und erhalten damit

lineare Gleichungssysteme!

Idee der Diskretisierung:

Ersetze Ableitungen durch Differenzenquotienten



Einfachster Fall:

$f'(x) \approx (f(x+h) - f(x)) / h$

Diskretisierung führt Fehler ein!
(in der Regel ~ h*h)

Fehler ist um so kleiner, je kleiner h (der Abstand zwischen zwei Gitterpunkten) ist!

Fraunhofer SCAI

Wozu braucht man schnelle Lösungsverfahren?

Heutzutage:

Maschenweite von ca. 40 km ergibt ca. 400.000 Gitterpunkte.

In der Höhe 40 Schichten.

Insgesamt ca. 16 Millionen Gitterpunkte!

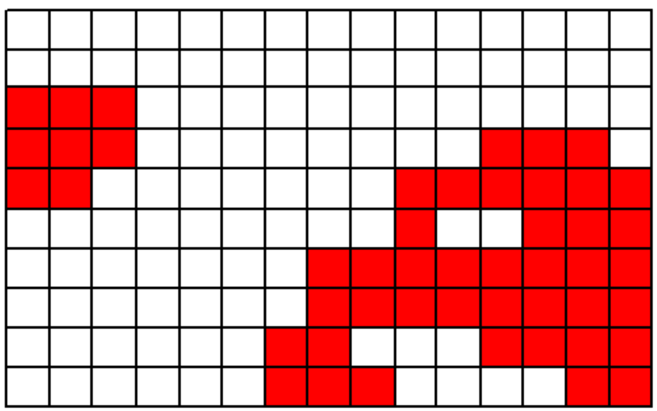
Zu lösen sind letztlich in jedem Zeitschritt:

lineare Gleichungssysteme mit ca. 16 Millionen Unbekannten!

Ca. 6.500 Zeitschritte für 10-Tages-Wettervorhersage

Wozu braucht man schnelle Lösungsverfahren?

Numerische Klimavorhersage

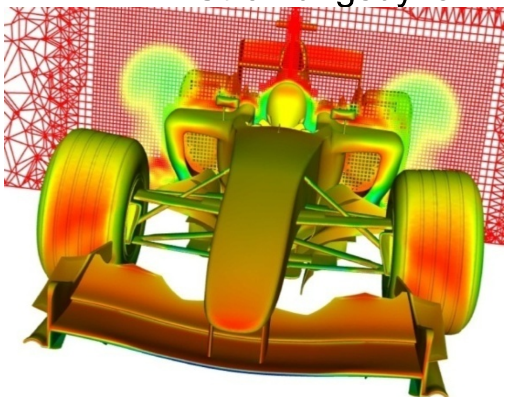


EUROPA im 600 km Gitter

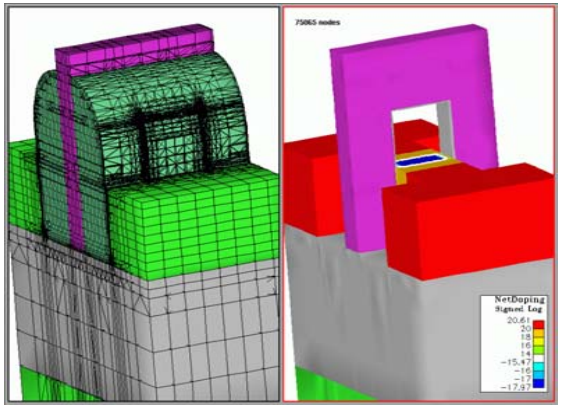
Zeitskalen:	**Jahrzehnte** **statt 10 Tage**
Auflösung:	**???**
Rechenzeit:	**Monate**
(Un)genauigkeit:	**2° - 5° C Unsicherheit** **bei globaler Erwärmung**

Anwendungen, in denen große Gleichungssysteme auftreten

Strömungsdynamik

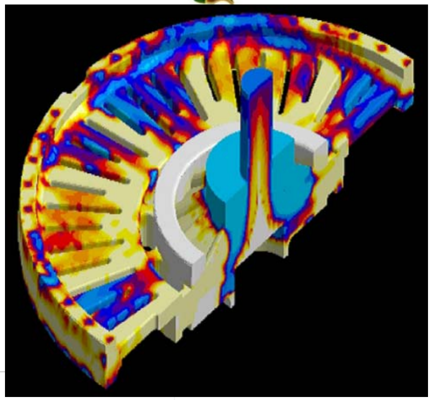


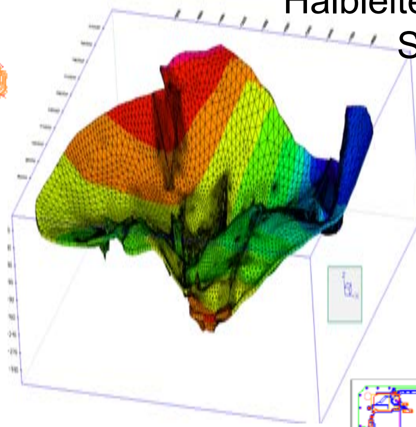
Öl&Gas-
Reservoir-
Simulation



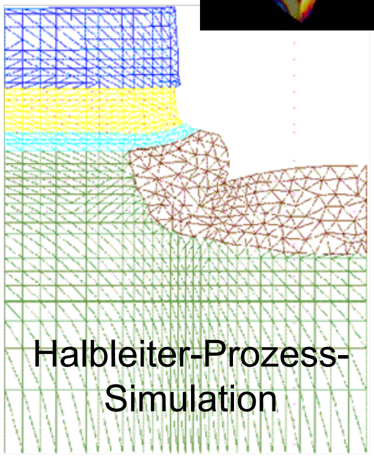
Halbleiter-Bauelemente-
Simulation

Struktur-
Mechanik /
Gieß-
simulation

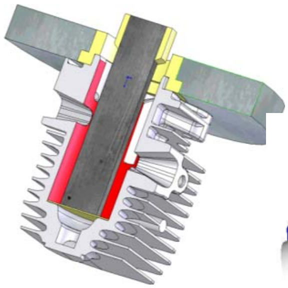




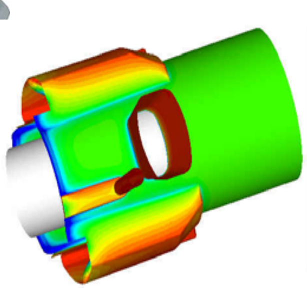
Grundwasser-
Simulation,
Geophysik



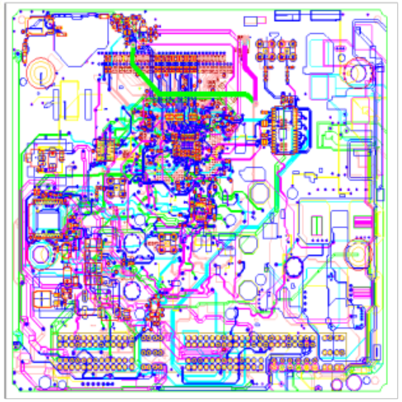
Halbleiter-Prozess-
Simulation



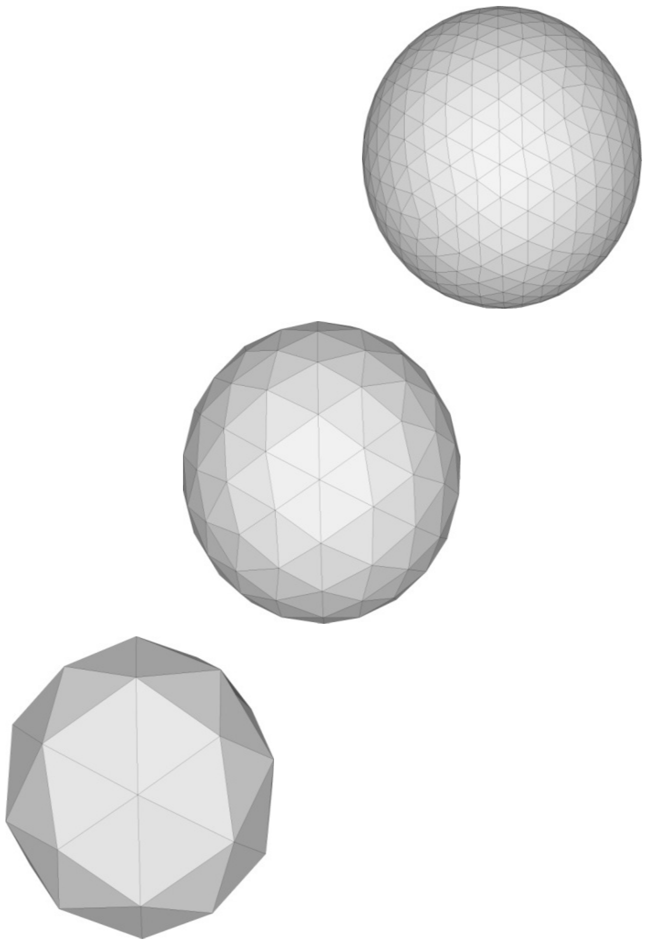
Elektrochemie

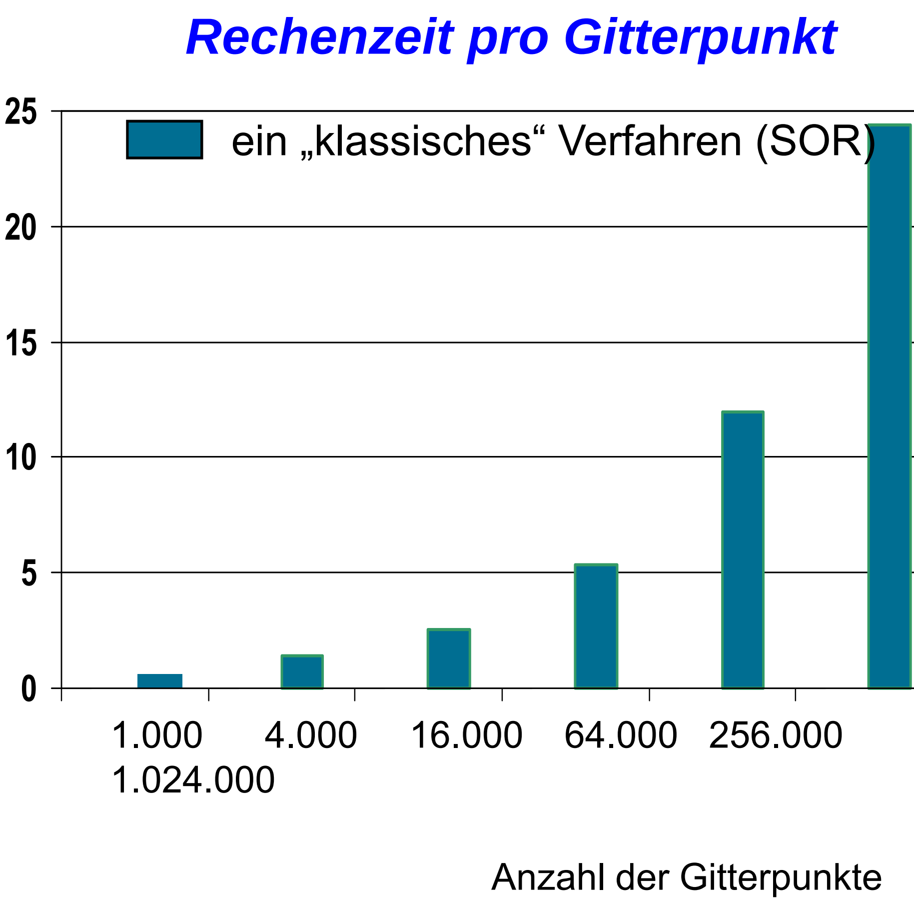


Schaltungs-
simulation,
Elektromagnetische
Verträglichkeit

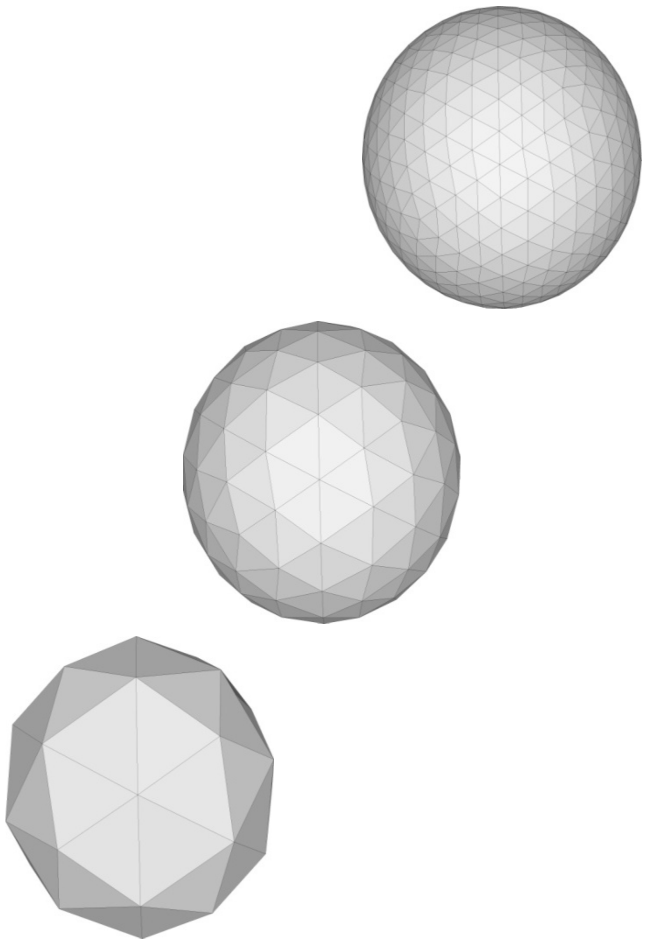


Bedeutung der Optimalität

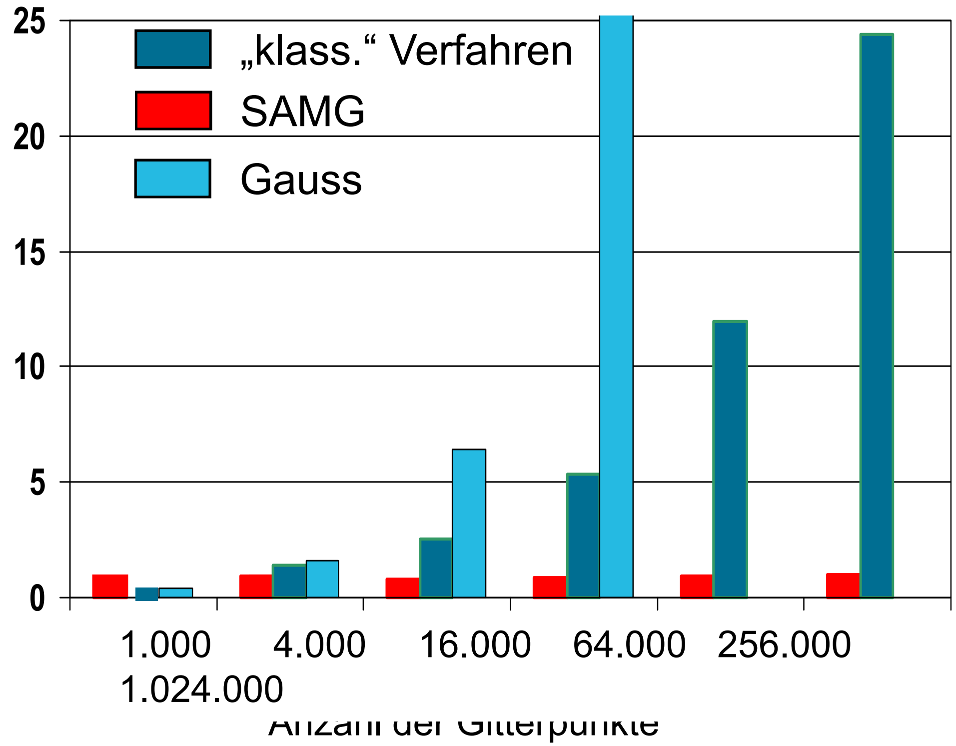




Bedeutung der Optimalität



Rechenzeit pro Gitterpunkt



Wozu braucht man schnelle Lösungsverfahren?

Heutzutage:

Maschenweite von ca. 40 km ergibt ca. 400.000 Gitterpunkte.

In der Höhe 40 Schichten.

Insgesamt ca. 16 Millionen Gitterpunkte!

Zu lösen sind letztlich in jedem Zeitschritt:

lineare Gleichungssysteme mit ca. 16 Millionen Unbekannten!

Ca. 6.500 Zeitschritte für 10-Tages-Wettervorhersage

Effizienz einiger Lösungsverfahren

Beispiel: 2D-Poisson-Gleichung, diskretisiert auf 1024 x 1024 Gitter
~> Gleichungssystem mit **$N \approx 1$ Mio. Unbekannten**

Lösungsverfahren	Anzahl von Operationen	Rechenzeit auf Standard-PC	Faktor zu Mehrgitter
Cramersche Regel (Formel)	**$\sim N!$**	**∞**	**∞**
Gauss-Elimination (für Bandmatrizen)	**$\sim N^2$**	**14 h**	**50000**
SOR	**$\sim N^{1.5}$**	**5 min**	**300**
Mehrgitter	**$\sim N$**	**1 sec**	**1**

Effizienz einiger Lösungsverfahren

Beispiel: 2D-Poisson-Gleichung, diskretisiert auf 4096 x 4096 Gitter
~> Gleichungssystem mit **$N \approx 16$ Mio. Unbekannten**

Lösungsverfahren	**Anzahl von Operationen**	**Rechenzeit auf Standard-PC**	**Faktor zu Mehrgitter**
Cramersche Regel (Formel)	**$\sim N!$**	**∞**	**∞**
Gauss-Elimination (für Bandmatrizen)	**$\sim N^2$**	**130 d**	**12 Mio.**
SOR	**$\sim N^{1.5}$**	**5 h**	**4800**
Mehrgitter	**$\sim N$**	**16 sec**	**1**

Wie funktionieren Mehrgitterverfahren?

Mehrgitterverfahren sind iterative Verfahren

Häufig: Iterative Lösungsverfahren sehr effizient
Iterative Verfahren in vielen Bereichen der Mathematik wichtig

Start mit irgendeiner Startnäherung für Unbekannten (im Zweifel 0)
Dann sukzessive Reduktion des Fehlers durch Iterationsvorschrift

Einfaches Beispiel: Heronsches Verfahren, mit dem man
näherungsweise die Quadratwurzeln
reeller Zahlen berechnen kann

Wie funktionieren Mehrgitterverfahren?

Das Heronsche Verfahren als Beispiel für ein iteratives Verfahren

Zu berechnen sei $x = \sqrt{y}$. Ausgehend von einer Startnäherung $x^{(0)}$ lautet die Iterationsvorschrift des Heronschen Verfahrens

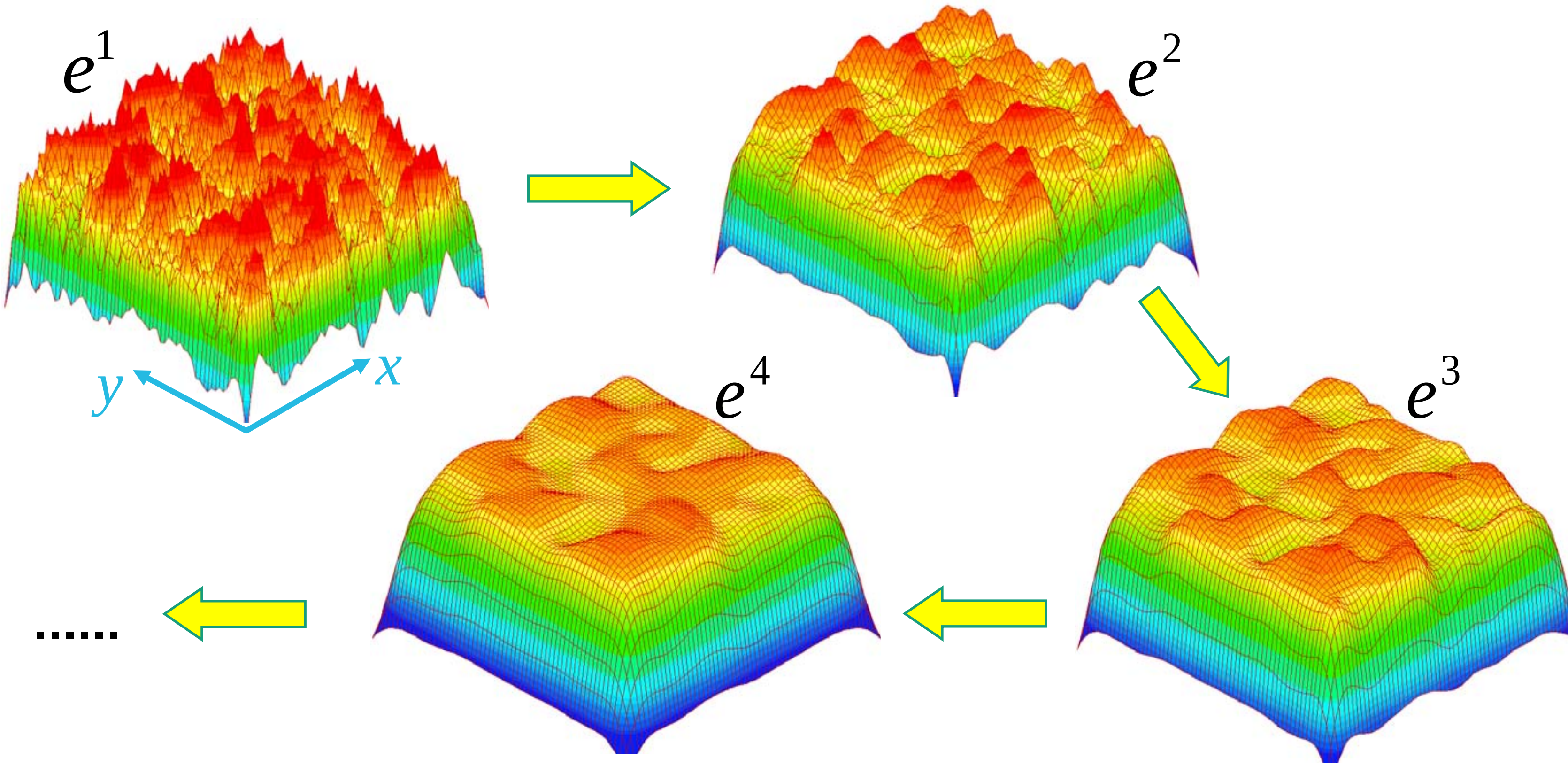
$$x^{(n+1)} = \frac{1}{2}\left(x^{(n)} + \frac{y}{x^{(n)}}\right) \qquad n = 0, 1, 2, 3, \ldots$$

Beispiel: Näherungsweise Berechnung von $\sqrt{2}$

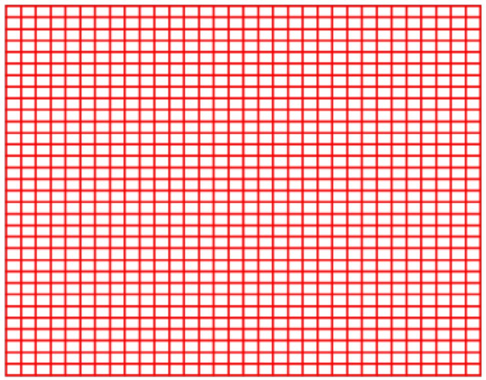
$$\begin{aligned}
x^{(0)} &= 1 \\
x^{(1)} &= \frac{1}{2}\left(1 + \frac{2}{1}\right) = \frac{3}{2} = \underline{1}.5 \\
x^{(2)} &= \frac{1}{2}\left(\frac{3}{2} + \frac{4}{3}\right) = \frac{17}{12} = \underline{1.41}666666.... \\
x^{(3)} &= \frac{1}{2}\left(\frac{17}{12} + \frac{24}{17}\right) = \frac{289 + 288}{2 \cdot 204} = \underline{1.41421}568627... \\
x^{(4)} &= \frac{1}{2}\left(\frac{577}{408} + \frac{816}{577}\right) = \frac{577^2 + 408 \cdot 816}{2 \cdot 577 \cdot 408} = \underline{1.41421356237}46899.....
\end{aligned}$$

Zum Vergleich: $\sqrt{2} = 1.4142135623730950 4.....$

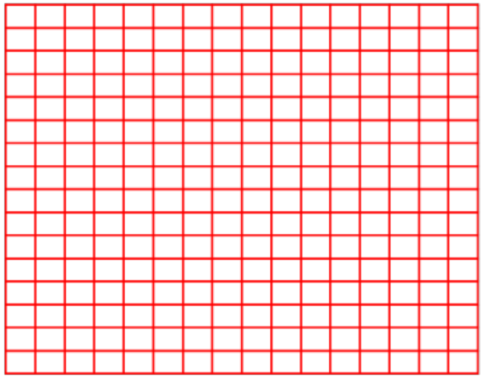
Mehrgitterprinzip I: Fehlerglättung durch klassische Verfahren



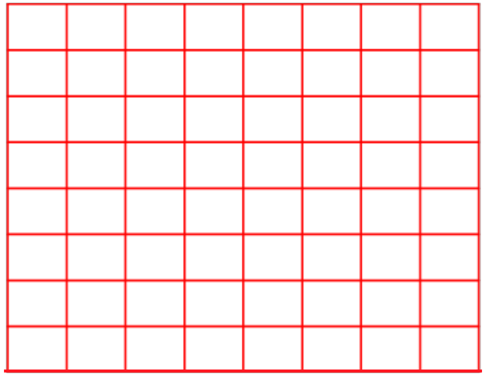
Mehrgitterprinzip II: Gittervergröberung, um glatte Fehler schnell zu berechnen (glatte Funktionen lassen sich schon auf groben Gittern gut darstellen)



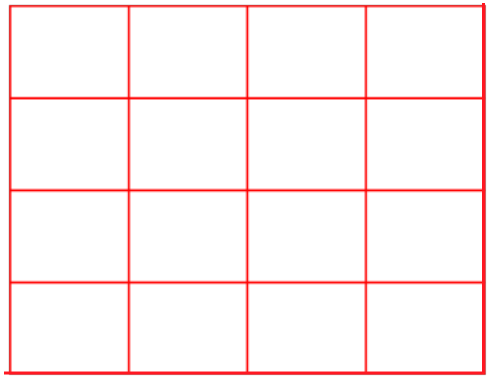
h-Gitter



2h-Gitter



4h-Gitter



8h-Gitter