

Welchen Einfluss besitzen Modellparameter?

Wie bewegt sich Wasser, wenn man es in einer sich drehenden Schüssel herumschwenkt? Jeder von uns hat dieses „Experiment“ sicher schon einmal vollzogen, ohne aber den Effekt von Änderungen im „Versuchsaufbau“ auf das Verhalten des Wassers wirklich vorherzusagen zu können. Eine solche Vorhersage erlauben beispielsweise die Grundgleichungen der Strömungsmechanik, die nach dem französischen Physiker Claude Navier (1785-1836) und dem irischen Mathematiker George Stokes (1819-1903) benannt sind. Diese Gleichungen beschreiben die Geschwindigkeit einer Strömung und die Verteilung des Drucks in Flüssigkeiten und Gasen.

Nach der Modellierung eines zu untersuchenden Problems müssen robuste und effiziente numerische Verfahren zur Lösung der kontinuierlichen Gleichungen gefunden werden. Hierzu wird mit einer so genannten Diskretisierung die Lösung einer kontinuierlichen Gleichung mit Hilfe einer endlichdimensionalen Konstruktion approximiert. Typische Vertreter von solchen Diskretisierungstechniken sind zum Beispiel die Methoden der finiten Elemente oder finiten Volumina sowie die Randelement-Methode. Letztendlich entsteht schließlich unter Wahl von geeigneten Algorithmen und Datenstrukturen sowie softwaretechnischen Umsetzungsstrategien ein Computermodell zur Berechnung von technisch-naturwissenschaftlichen Vorgängen. Ein Beispiel ist das Softwarepaket FLUENT™, das die Navier-Stokes-Gleichungen auf Basis der Methode der finiten Volumina löst. Es besteht aus einer Folge von etwa 1,6 Millionen Zeilen von Befehlen der Programmiersprachen Fortran 77, Fortran 90 und C. Bild 1 zeigt in den ersten beiden Spalten die Ergebnisse der numerischen Simulation einer Strömung von Wasser und Luft in einer sich drehenden Schüssel mittels FLUENT™.

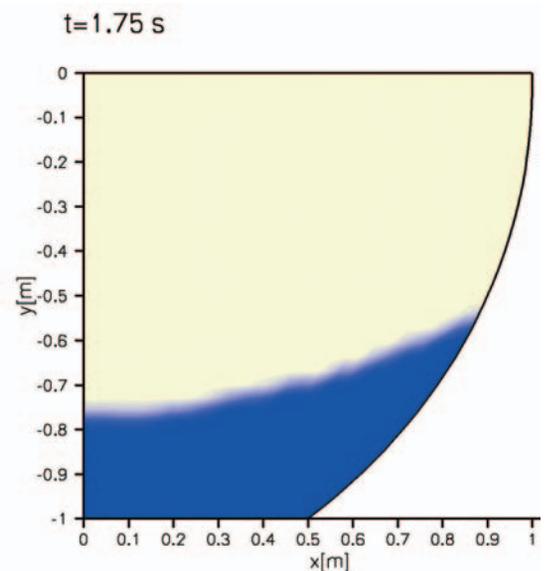
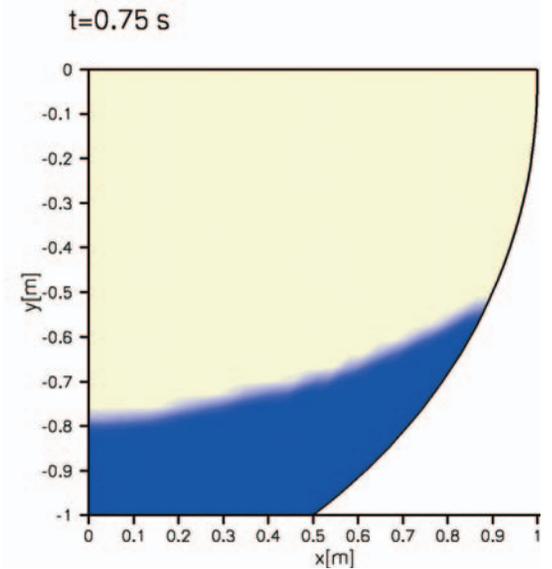
Die im Allgemeinen recht aufwändige Erstellung eines Computermodells ist aber typischerweise nur der erste Schritt.

Zum einen haben Computermodelle meistens Modellparameter, die man mittels einer so genannten Parameterschätzung anpassen muss, um zum Beispiel experimentelle Messdaten bestmöglich zu replizieren und so die Gewissheit zu haben, dass beim Ändern von durch den Nutzer beeinflussbaren Größen wie der Gestalt der Schüssel oder der Viskosität der Flüssigkeit die Vorhersage der Computersimulation gültig ist. Auch ist es wichtig herauszufinden, welche Modellparameter das Verhalten des Computermodells am meisten beeinflussen, oder ob es Abhängigkeiten zwischen den Parametern gibt. Da man viele Parameter nicht hundertprozentig genau messen kann, ist auch die Frage wichtig, wie das nächste Experiment geplant ist, um die Unsicherheit in den Modellparametern zu minimieren.

Verfahren zur Beantwortung dieser Fragestellungen beruhen wesentlich auf der Verfügbarkeit von Änderungsraten, die auch Ableitungen genannt werden. Ableitungen beantworten die Frage nach der Änderung einer Größe bei Variation eines Parameters. Mathematisch ist die Ableitung einer Funktion f in Bezug auf einen Parameter x definiert als der Grenzwert von $(f(x+h)-f(x))/h$, wobei die Schrittweite h gegen Null geht. Am Beispiel der mit Wasser gefüllten, sich drehenden Schüssel interessiert man sich zum Beispiel für den Einfluss eines Modellparameters, der die Turbulenz der Strömung im Kontext des so genannten $k-\epsilon$ -Turbulenzmodells beschreibt. In mathematischer Notation wird hier die Ableitung $\frac{\partial u}{\partial C_{1\epsilon}}$, also die Änderung des Geschwindigkeitsfeldes u mit Variation des Turbulenzparameters $C_{1\epsilon}$ gesucht. Die Schwierigkeit besteht nun darin, dass die Geschwindigkeit u nicht als Formel in Abhängigkeit des Modellparameters $C_{1\epsilon}$ darstellbar ist, sondern FLUENT™ nach Eingabe eines Wertes für den Turbulenzparameter $C_{1\epsilon}$ die resultierende Geschwindigkeit u berechnet. Numerisches Differen-

zieren bietet in diesem Falle die Möglichkeit, die Ableitung $\frac{\partial u}{\partial C_{1\epsilon}}$ durch mehrfaches Aufrufen des Programms FLUENT™ mit leicht geänderten Werten für $C_{1\epsilon}$ zu berechnen. Allerdings handelt es sich dabei lediglich um eine Approximation, deren Güte stark von der gewählten Perturbation in $C_{1\epsilon}$ vergleichbar der Schrittweite h abhängt und im besten Fall die Hälfte der signifikanten Ziffern der Vorwärtsrechnung als Genauigkeit erreichen kann. Hier bieten Techniken des so

genannten Automatischen Differenzierens Abhilfe. Dabei wird ein Computerprogramm durch ein Transformationswerkzeug in ein neues Computerprogramm transformiert, das die gewünschten Ableitungen berechnet. Am Lehrstuhl für Informatik 12 (Hochleistungsrechnen) werden im Rahmen des Sonderforschungsbereichs „Modellgestützte experimentelle Analyse kinetischer Phänomene in mehrphasigen fluiden Reaktionssystemen“ Techniken des Automatischen Differenzierens ent-



Bewertung und Auslegung von Computermodellen durch Automatisches Differenzieren

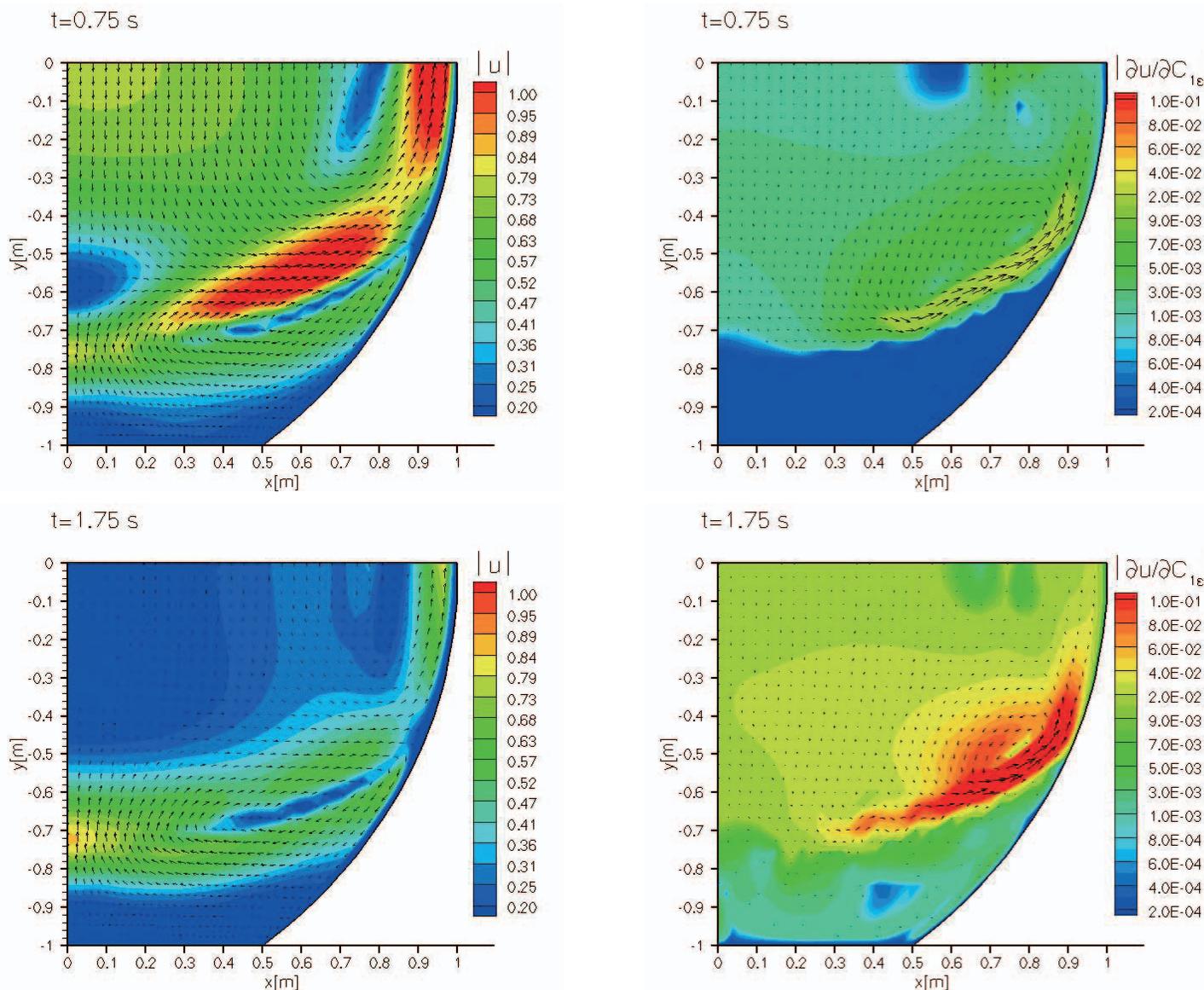


Bild 1: Ergebnisse der numerischen Simulation von Wasser und Luft in einer rotierenden Schüssel zu den Zeitpunkten $t=0.75$ s (oben) und $t=1.75$ s (unten). Die Spalten zeigen

(links) den Volumenanteil mit der Farbcodierung blau für Wasser und weiß für Luft. Die mittlere Spalte zeigt die Strömungsgeschwindigkeit, die rechte Spalte die Sensitivität

der Strömungsgeschwindigkeit bezüglich eines Modellparameters mit jeweils der Farbkodierung rot für hohe und blau für niedrige Werte.

wickelt und angewendet. Das Programm FLUENT™ konnte mit dem Software-Werkzeug zum Automatischen Differenzieren ADIFOR erfolgreich in eine „differenzierte Version“ transformiert werden, die aus etwa 2,2 Millionen Programmzeilen besteht. Die letzte Spalte in Bild 1 zeigt die so gewonnenen Ableitungen des Geschwindigkeitsfeldes nach dem Turbulenzparameter. Für den Zeitpunkt $t=1.75$ s erkennt man an der roten Farbe beispielsweise deutlich, dass dieser Turbulenz-

parameter den größten Einfluss auf die Geschwindigkeit im äußeren Schüsselbereich knapp oberhalb der Wasseroberfläche besitzt.

Aus Sicht der Informatik handelt es sich beim Automatischen Differenzieren um eine Programmtransformation. Bild 2 stellt schematisch den Aufbau des am Lehrstuhl für Informatik 12 (Hochleistungsrechnen) entwickelten Werkzeugs ADiMat dar. Dieses Werkzeug implementiert Automatisches Differenzieren für Programme in der

Programmiersprache MATLAB, die besonders im technisch-wissenschaftlichen Bereich breite Verwendung findet. Ein gegebenes MATLAB-Programm wird von ADiMat unter Einbeziehung von gewissen Verarbeitungsparametern zunächst eingelesen, in eine interne Repräsentation umgewandelt und dann analysiert, wobei zusätzliche Datenstrukturen angelegt werden, um diese Information zu speichern. Auf Basis dieser strukturierten Darstellung des Programms werden gewisse

Programmkonstrukte umgeschrieben, welche für die anschließend folgende Ableitungsberechnung problematisch wären. In diesem Kernschritt wird die Kettenregel der Differentialrechnung auf diese interne Repräsentation angewendet, wobei über eine Datenbasis die Ableitungsregeln für Elementarfunktionen von MATLAB, zum Beispiel Lösung linearer Gleichungssysteme, zur Verfügung gestellt werden. Nach einer Optimierung wird schließlich ein neues MATLAB-

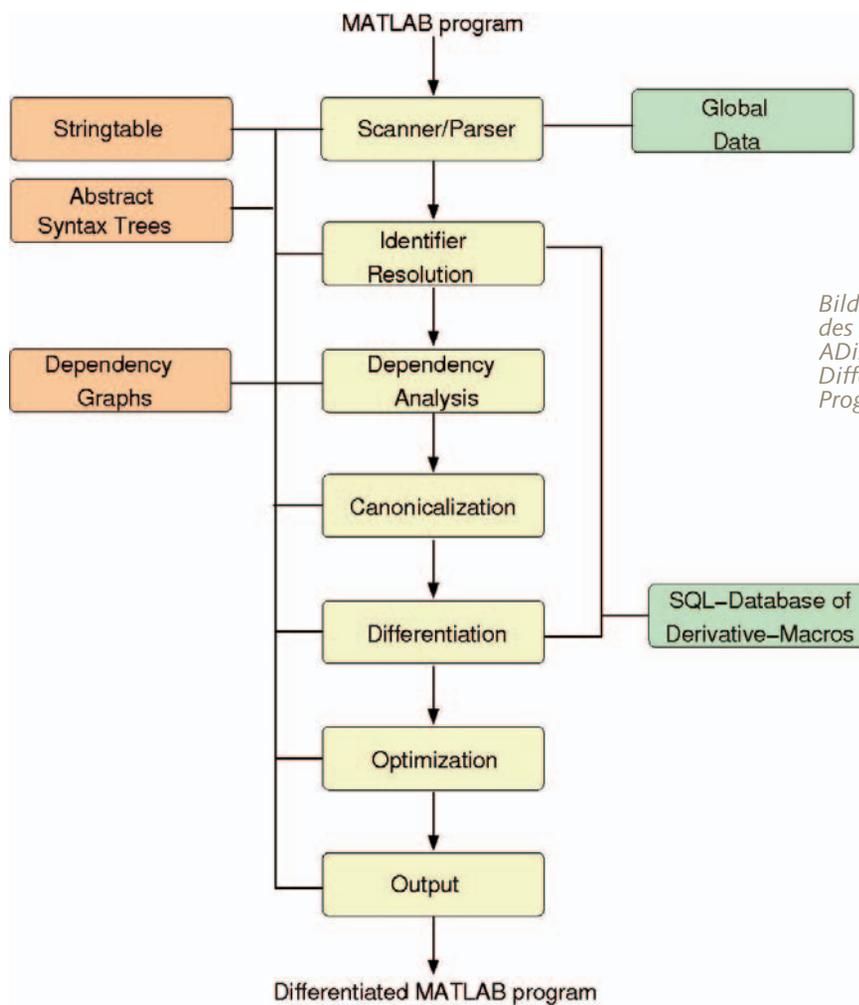


Bild 2: Schematischer Aufbau des Software-Werkzeugs ADiMat zum automatischen Differenzieren von MATLAB-Programmen.

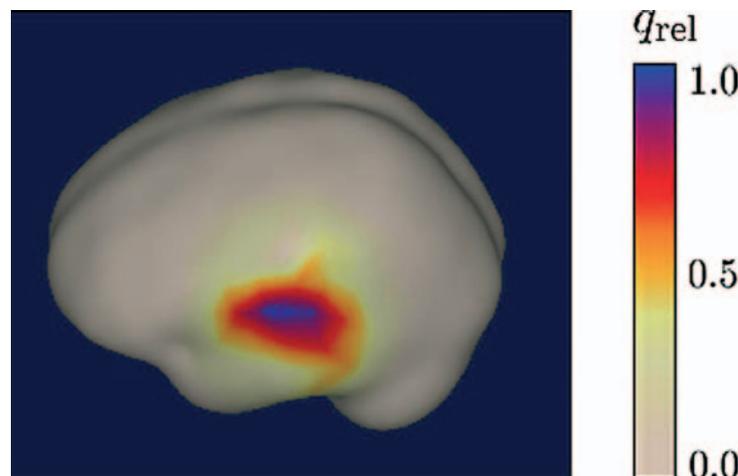


Bild 3: Lokalisation abnormer Hirnaktivitäten.

Programm mit der Funktionalität der Ableitungsberechnung erzeugt.

Die Kettenregel ist assoziativ und erlaubt bei einem nicht-trivialen Code viele mögliche Anwendungsszenarien, die sich nicht im berechneten Ergebnis, wohl aber im hierfür benötigten Rechen- und Speicherbedarf unterscheiden. Algorithmen, welche unter Einbeziehung von Information über den zugrundeliegenden Quellcode hier gute Transformationsstrategien berechnen, sind mit eines der Kernstücke von Werkzeugen des Automatischen Differenzierens. Aktuelle Forschungsarbeiten befassen sich mit der Transformation von parallelen Programmen und der Ausnutzung

von Parallelismus in den generierten Programmen, da parallele Programme aufgrund des nachhaltigen Trends zu Parallelarchitekturen, zum Beispiel mit so genannten multi-core Chips, zukünftig eher die Regel als die Ausnahme sein werden. Abschließend sei eine Anwendung des Automatischen Differenzierens in der Medizininformatik erwähnt. Magnetoenzephalographie ist ein nicht-invasives Verfahren zur Messung des Magnetfeldes, das durch die neuronale Aktivität des menschlichen Gehirns verursacht wird. Die sehr präzisen Messungen werden durch Sensoren vorgenommen, die an einem helmartigen Körper angebracht sind. Ziel der neurologi-

schen Untersuchungen ist es, diejenigen Hirnregionen innerhalb des Kopfes zu bestimmen, die ein Magnetfeld außerhalb des Kopfes verursachen. Aus der beobachteten Wirkung, dem Magnetfeld im Außenraum des Kopfes, wird auf dessen Ursache, der neuronalen Aktivität im Innenraum des Kopfes, zurückgeschlossen und abnorme Aktivitäten, die zum Beispiel durch einen Hirntumor verursacht werden, identifiziert. Bild 3 zeigt die akkurate Lokalisation von neuronaler Aktivität mit Hilfe der BESATM-Software unter Einbeziehung von mittels Automatischen Differenzierens berechneten Gradienten.

www.sc.rwth-aachen.de

Autoren:

Univ.-Prof. Christian H. Bischof, Ph.D., ist Inhaber des Lehrstuhls für Informatik 12 (Hochleistungsrechnen) und Leiter des Rechen- und Kommunikationszentrums. Privatdozent Dr.-Ing. H. Martin Bucker ist Akademischer Oberrat am Lehrstuhl für Informatik 12 (Hochleistungsrechnen).