

Fach: Systemsimulation – 8 SWS Diplomprüfung
Vorlesungen: 4 SWS Simulation und wissenschaftliches Rechnen I
4 SWS Simulation und wissenschaftliches Rechnen II
Prüfer: Prof. Rüde
Note: 1.3

Einstieg: Etwas Smalltalk zum Einstieg, relativ wenig (“Na, sind Sie nervös?” - “Oh ja, aber das ist wahrscheinlich jeder Prüfling.” - “Ja, aber sehen jetzt nicht sehr nervös aus.” ...so in der Art). Insgesamt lockere Atmosphäre. Prof. Rüde gibt einem immer Feedback zu dem was man gesagt hat, also ob das in die richtige Richtung geht oder nicht, und sitzt nicht nur ausdruckslos da. Es werden auch Antworten positiv gewertet, die nicht 100 % dem Wortlaut des Skripts oder der Fachliteratur entsprechen (sprich: auch etwas schwammig formulierte Antworten waren ok. Mit Nachfrage sollte man dann schon auf eine genauere Antwort kommen). Formeln sind teilweise nötig, allerdings dann mehr Grundlagen. Man sollte unter Umständen auch eigene Beispiele parat haben (vor allem Performance Optimierung und so) oder Code hinschreiben können. Prof. Rüde behandelt nicht viele Themen, aber diese relativ intensiv. Deshalb sollte man sich in den Gebieten durchaus auskennen. Als Informatiker vor allem bei dem Thema, dass auch ich als erstes hatte.

Fragen:

SiwiR I

- Skizzieren Sie stichpunktartig den Inhalt der beiden Vorlesungen
 - SiwiR I: Performance Optimierung, Finite Differenzen, Iterative Löser (Jacobi, Gauss-Seidel, CG, GMRes), Parallelisierung (OpenMP, MPI), ODEs
 - SiwiR II: Molecular Dynamics, Lattice-Boltzmann, Finite Elemente, Multigrid
- Als Informatiker ist für Sie das Thema Performance Optimierung natürlich besonders wichtig. Erzählen Sie uns doch mal was über den Speicher.
 - RAM langsam
 - Latenz vs. Bandbreite (Was bedeuten die Begriffe?).
 - Cache als kleinerer, schnellerer Speicher (sowohl Latenz als auch Bandbreite besser)
- Skizzieren Sie uns bitte mal so eine Speicher-Struktur in einem modernen Rechner.
 - Wusste nicht genau was gewollt war, darum das Bild Von-Neumann Computer Architecture gezeichnet. Dann sollte ich einzeichnen wo nun da der Cache eine Rolle spielt.
 - Wichtig zu erwähnen, dass es heutzutage mehrere Cache-Level gibt.
- Welche wichtigen Aspekte gibt es nun, wenn man so einen Cache benutzt? Welche grundlegenden Unterscheidungen?
 - War mir grad entfallen, darum hab ich einfach mal Instruction-Cache vs. Data-Cache gesagt. Wurde auch als richtig gewertet.
- Eines dieser Aspekte ist auch die Cache-Line, z.B. Kennen Sie noch einen Aspekt?
 - Da hats dann klick gemacht, was er will: Assoziativität. Also “full associative”, “direct mapped”, “set associative” als Kompromiss. Jeweils erklärt. Bei “set associative” wurde nachgefragt, wollte auf das “tag-address-word” Schema raus, also wie man dann einen Datensatz in so nem Cache findet.
- Wie kann man diese Cache-Line jetzt möglichst gut ausnutzen?
 - temporal vs. spatial locality; bisschen was dazu erzählt.
- Angenommen Sie wollen für die 1. oder 2. Semester ein ganz einfaches Beispiel machen, wo

Sie zeigen, welchen Einfluss das Ausnutzen der Cache-Line hat, was könnten Sie dann machen? Skizzieren Sie das mal mit etwas Code.

- Meine Reaktion war: Code in Prüfungen liegt mir meist nicht so... :) Dementsprechend hats dann auch bissl gedauert, bis ich drauf kam, was man machen kann. Als Vorgabe meinte Prof. Rüde, man hat eine Cache-Line in die z.B. 4 Datenwörter passen, jedes Datenwort 4 Byte.

```
int a[ ]
for i = 0, ..., w; i += 4
{
    sum += a[i]
}
```

- Bei welcher Datenstruktur kommt dieser Cache-Line-Effekt denn stark zum tragen?
 - Er wollte einfach Matrix hören, ich hab stattdessen gesagt, mir fällt grad nur ein Verfahren ein, nämlich Matrix-Transponierung.

SiwiR II

Das war's, was mir zu SiwiR I einfällt. Nach ziemlich genau 15 Minuten meinte er dann:

- Nun haben wir das Thema ausführlichst besprochen. Deshalb können Sie sich für die verbleibenden 15 Minuten ein weiteres Thema von der Übersicht aussuchen.
 - Jedes? Müsste nicht mal aus SiwiR II sein?
- Ich schaffe es sowieso nicht, alles anzusprechen.
 - Gut, dann würde ich gerne was zu Mol. Dyn. erzählen.
- Na dann fangen Sie mal an. Um was geht es dabei?
 - Simulation von Partikeln, wobei Partikel vieles sein können: Galaxien, Sonnensysteme, Moleküle, ...; Man verwendet dabei die Newtonschen Bewegungsgleichungen, also vor allem $F = m a$; Die beiden wichtigsten Schritte sind performante Zeitintegration und Berechnung der Kraft.
 - Störmer-Verlet Verfahren für Zeitintegration erwähnt
- Wie macht man diese Kraftberechnung?
 - Mit Hilfe von Potenzialen. Kurzreichweitige, langreichweitige, erklärt was der Unterschied is.
- Beispiele?
 - Gravitation (lang), Lennard-Jones (kurz);
- Können Sie das Lennard-Jones Potenzial skizzieren?
 - Hab bissl rumgestochert, dass epsilon die "Tiefe" des Potenzials und sigma den "Nulldurchgang" beschreiben.
 - Eine mir bekannte Grafik aus einem der Lehrbücher skizziert, wie das Lennard-Jones-Potenzial für $\epsilon = \sigma = 1$ aussieht.
- Wenn Sie die Formel nicht auswendig können, reicht es, wenn sie erklären, welche Werte dabei eine Rolle spielen.
 - Naja, der Abstand (Radius) zwischen zwei Partikeln. Der geht einmal ϵ^6 und einmal ϵ^{12} in die Formel mit ein, wenn man $\sigma = \epsilon = 1$ wählt.
- Was bedeutet das?
 - Bissl ungenau ausgedrückt, dass die Partikel eben voneinander abgestossen werden... Selbst nachforschen! :)
- Was bedeutet es, wenn so ein Potenzial kurzreichweitig ist?

- Radius hat höhere Potenz als r^d ($d = \text{dimension}$)
- Gegenbeispiel?
 - Das genannte Gravitationspotenzial $G_{\text{konst}} \frac{m_i \cdot m_j}{r_{i,j}}$; da Kraft = Potenzialänderung ist, wird daraus $\frac{1}{r_{i,j}^2}$; In 2D also von gleichem Wachstum wie $\frac{1}{r^d}$;
- Und was hilft uns das?
 - r_{cut} einführen, also nur Partikel beachten, die innerhalb dieses Radius liegen
- Erklären Sie mit Hilfe dieses r_{cut} nun Link-Cell-Verfahren
 - Bild mit Zellen, jede Zelle mindestens ($r_{\text{cut}} \times r_{\text{cut}}$) groß, anhand eines Partikels in einer Ecke einer Zelle erklärt, was man dann weglassen darf (also unter Umständen auch die diagonalen Nachbarn)
- Wie kann man das parallelisieren?
 - Partitionierung des Gebietes in Stücke, am besten Oberflächen zwischen den Partitionen minimieren, damit möglichst wenig Kommunikation nötig ist, Ghost-Layer verwenden.
 - Erwähnt, dass man die bereits bearbeiteten Zellen nicht mehr anschauen muss, wenn man z.B. in einem Eck des Gebietes anfängt (wegen $F_{i,j} = -F_{j,i}$)
- Wie sollte man dieses Verfahren implementieren?
 - Mit Hilfe von verketteten Listen. Für jede Zelle eine Liste mit den enthaltenen Partikeln, dadurch kann man leicht Partikel zwischen den Zellen austauschen...
- Erklären Sie in den letzten 5 Minuten, wie Störmer-Verlet funktioniert.
 - $F_i^n = m_i a = m_i \ddot{x}$; Diese Ableitung kann man nun mit finiten Differenzen ausdrücken: $\frac{d^2 x}{dt^2} = \frac{x_i^{n+1} - 2x_i^n + x_i^{n-1}}{\delta t^2}$; das nach $x^{(n+1)}$ aufgelöst, usw... hab ihm das halt hergeleitet.
Dann erwähnt, was das Problem daran ist (also Rundungsfehler, weil ja der Term, der die Kraft enthält viel kleiner ist, als die beiden Ortsangaben...) und dass man stattdessen Leapfrog-Schema oder Geschwindigkeits-Störmer-Verlet verwenden kann (GSV hab ich noch kurz hergeleitet)
- Was ist an GSV speichertechnisch ein Nachteil?
 - Man braucht einen extra Vektor zum speichern der Alten Kräfte, damit man dadurch die Geschwindigkeit bestimmen kann.

Das war's, dann wurde ich rausgeschickt.

Vorbereitungsstil:

Wichtig ist es, die Konzepte der Verfahren verstanden zu haben. Ich weiß, dass wird immer gesagt, aber beim Lernen auf die Prüfung stellt man sehr schnell fest, dass es einfach zu viele Formeln und Beweise sind. Man sollte versuchen, sich die Grundlagen der Verfahren anzueignen, wo her sie kommen und worauf sie hinauswollen, welche Vor- und Nachteile sie haben. Nicht dass ich das immer hab. (An dieser Stelle Dank an meinen Hilfslehrer! :)) Damit man die Sachen allerdings versteht, sind Bücher meiner Meinung nach unersetzlich. Nur dort werden die Sachen Schritt für Schritt hergeleitet. Manche schaffen es, das Ganze auch nur aus den Folien und Mitschriften zu lernen. Ich zumindest nicht. Absolut empfehlen kann ich die Zusammenfassung von TheChip. Dank

geht deshalb auch an ihn!

Bücher:

Vor allem:

- Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler (Dahmen, Reusken) (Für Finite Elemente, ODEs, ...)
- Numerische Simulation in der Moleküldynamik (Griebel, Caglar, Knapek) (Für Mol. Dyn.)
- Wenn man Finite Elemente noch weiter treiben will (die Vorlesung geht nach dem Buch): An analysis of the finite element method (Strang, Fix)
- Ausserdem gut und wichtig: An Introduction to the Conjugate Gradient Method Without the Agonizing Pain (Jonathan Richard Shewchuk)