

Von der Gleichung zum Fortran-Programm

Peter Korn

Max-Planck-Institut für Meteorologie
Hamburg



Inhalt

- Fixieren des Ausgangspunktes
- Transformation I: Kontinuierlich → Diskret
Mathematik & Physik
- Transformation II: Diskret → Code
Mathematik & Computer Science
- Subskalenschliessung
- Was sollte die Zukunft bringen ?



Inhalt

- **Fixieren des Ausgangspunktes**
- Transformation I: Kontinuierlich → Diskret
Mathematik & Physik
- Transformation II: Diskret → Code
Mathematik & Computer Science
- Subskalenschliessung
- Was sollte die Zukunft bringen ?



- **Wir haben**

- Physikalisches System, repräsentiert durch Zustandsvektor
- Evolutionsgleichung für Zustandsvektor
- Modelparameter
- Externa: Geometrie, Anfangs- und Randwerte

- **Wir wollen**

- Lösung der Evolutionsgleichung/Modellgleichung
Wert des Zustandsvektors für Zeit nach Anfangswert
- Analyse der Lösung: Physikalische Kennzahlen extrahieren, die das System charakterisieren

Reduktion der Freiheitsgrade

- Zustandsvektor/Prognostische Variable

- Definiert das physikalische System“, impliziert Auswahl repräsentierter Phänomene
- Wahl des Zustandsvektors ist nicht-eindeutig:
Thermodynamische Mehrdeutigkeiten

- Evolutionsgleichung – Modellgleichung

- Abgeleitet aus “1st-Principles” - aber kein 1st-Principle
*Navier-Stokes Glg. folgt aus Impulserhaltung
Kontinuumshypothese
Navier Stokes als Limit der Boltzmann-Glg.*
- “Vereinfachte” makroskopische Beschreibung
- Modellgleichung als “Filter”
 - *Bsp: Inkompressibilität entfernt Schallwellen*



- **Bestandteile des kontinuierlichen Modells**

- Dynamischen Kern: Dynamik *(PDE-part)*
- Parametrisierungen: Physik *(Nicht-PDE)*
- Externen Daten

- **Gekoppelte Modelle**

- Atmosphären-Ozean-Land als eigene Modelle
mit eigenem Dynamischen Kern/Parametrisierung/Daten
- Kommunikation der Modelle über Randwerte

Inhalt

- Fixieren des Ausgangspunktes
- **Transformation I: Kontinuierlich → Diskret**
Mathematik & Physik
- Transformation II: Diskret → Cod
Mathematik & Computer Science
- Subskalenschliessung
- Was sollte die Zukunft bringen ?



Grundlage der Diskretisierung

- **Analyse der kontinuierlichen Modellgleichungen**
 - Struktur der Gleichungen und der Lösungen
Symmetrien, Erhaltungsgrößen, Wellen
Mathematische Wohlgestelltheit etc
 - Dominierende Raum-Zeitskalen

- **Hydrodynamische Spezialitäten**
 - Nicht-Linearität & Multiskalenproblem
 - Sensitivität gegenüber Anfangswerten

Diskretisierungsprozess

Projektion des 4-dim. Raum-Zeit-Kontinuums auf Raum-Zeit-Gitter

- 3D Raum \rightarrow Gitter: $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_j$
- Zeit: $t \rightarrow t_n$
- Zustandsvektor
Funktion \rightarrow Diskreten Vektor: $\mathbf{F}(\mathbf{x},t) \rightarrow \mathbf{f}(\mathbf{x}_j,t_n)$
- Evolutionsgleichung:
Partielle Differential Glg. \rightarrow Algebraische Glg.
 \rightarrow Reduktion der Freiheitsgrade des Systems
Kompression des Phasenraums



Strukturerhaltende Diskretisierung

- **Ziel:** Erhalt mathematischer/physikalischer Strukturen im Diskretisierungsprozess
 - *Bsp: Energieerhaltung, diskreter Attraktor*
- **Fundamentales Dilemma**
Kont.-Strukturen \gg # Disk.-Strukturen
- **Problem:** Welche Strukturen sind relevant ?
Wie können wir sie erhalten ?

Ansätze zur Strukturerhaltung

- **Finite Elemente/Spektralmodelle**
 - Grosser Suchraum für Lösung durch hoch-dimensionale Darstellung des Zustandsvektors
 - Aufwändig: Effizienz durch Adaption
- **Finite Differenzen**
 - Cleveres Variablen-Staggering & Interpolieren
- **Geometrische Ansätze:** Hamiltonisch & Variationell
- **Mimetische Methoden & Discrete Exterior Calculus**
- **Stand der Forschung:**
Kontrolle/Verständniss des Diskretisierungsprozesses unzureichend für explizite Strukturerhaltung



Inhalt

- Fixieren des Ausgangspunktes
- Transformation I: Kontinuierlich → Diskret
Mathematik & Physik
- **Transformation II: Diskret → Code**
Mathematik & Computer Science
- Subskalenschliessung
- Was sollte die Zukunft bringen ?



Vom Diskreten Modell zum Algorithmus

- **Codierung**
 - Transfer des diskreten Modells zu Quellcode
 - Zerlegung des Modells in kommunizierende Module
 - *Löse Glg. A nach X*
 - *Benutze X in Glg. B um Y zu ermitteln.....*
- **Organisation des Algorithmus**
was brauche ich wann für was ?

Vom Diskreten Modell zum Algorithmus

- **Algorithmische Design**
 - Effizienz
 - Transparenz
 - Erweiterbarkeit
 - ...

Übrigens: Es gibt “schöne” Algorithmen und hässliche



Quellcode-Produktion

- **Der menschliche Makel**
 - Codierung durch Humanoide
 - Komplexer Code mit langer Lebensdauer
 - Teams: Arbeitsteilung/Organisation

- **Recycling**
 - Wiederverwendung erprobter Module
 - Libraries
 - Never re-invent the wheel !

Modellvalidierung

- **Verifikation des Codes**
 - Prinzipien guter Software-Entwicklung
4-Augen-Prinzip, Komponententest...
 - Code ausführbar
- **Verifikation des Modells**
 - Ist die Modellrechnung korrekt ?
 - Klimamodelle: kaum Referenzlösungen verfügbar
 - Qualitativer Vergleich mit anderen Modellen
 - Sind physikalische Phänomene “plausibel”
wiedergegeben ?

Informationskompression

Vom Kontinuierlichen Modell zum Code

- **Diskretisierung**
Reduktion der Dimension des Phasenraums des System von ∞ auf “n”
- **Codierung**
Darstellung reeller Zahlen durch Arithmetik begrenzter Genauigkeit

Inhalt

- Fixieren des Ausgangspunktes
- Transformation I: Kontinuierlich → Diskret
Mathematik & Physik
- Transformation II: Diskret → Code
Mathematik & Computer Science
- **Subskalenschliessung**
- Was sollte die Zukunft bringen ?



- **Annahme:** Kontinuierliche Modellgleichungen sind diskretisiert & korrekt implementiert
 - Der PDE-Teil des Klimamodells ist vollständig
 - Diskretes Modell operiert auf Gitter endlicher Auflösung
- Was passiert innerhalb einer Gitterzelle ?
Und warum ist das wichtig ?

Relevanz von Subskalen-Phänomenen

- **Turbulenz**
 - Nichtlineare Modelle → Skalen-Interaktion
 - Energie-Transfer
 - *Gitterskala* → *Subskalen*
 - *Subskalen* → *Gitterskalen (backscatter)*
 - **Unaufgelöste Physikalische Prozesse**
Konvektion
 - **Turbulente Mischungsprozesse**
beschrieben durch Mischungskoeffizienten
- Effekt der Subskalen muss berücksichtigt werden
Wirkung des Nicht-Berechneten berechnen



Subskalen-Phänomene: Probleme & Praxis

- **Modellbildung** für subskaligen Prozess
 - Keine Theorie oder Gleichung vorhanden
Prozessverständnis unvollständig
 - Vielzahl subskaliger Prozesse
 - Sensitivität der Modellösung bzgl. Parameter
 - “Heuristische” Modellbildung d.h. physikalisches Plausibilitätsargument bzw. gebildetes Raten
- **Praxis der Subskalen-Modellierung**
 - Parameter-Tuning durch Erfahrung
 - Ziel: Übereinstimmung mit Beobachtungen
 - Konsequenz: “Magic numbers”



Vom kontinuierlichen Modell zum Code

Welche Übergänge beherrschen wir wie gut ?

- **Eigenschaften des kontinuierlichen Modells**
Aus Unwissenheit mit Bewährtem weiterwursteln
- **Übergang Kontinuum → Diskret**
Akzeptabel
- **Subskalen & Parameter**
Fragwürdig
- **Übergang Diskret → Code**
Technisches/organisatorisches Problem – kein grundlegendes
- **Validieren des Modells**
Fragwürdig



Inhalt

- Fixieren des Ausgangspunktes
- Transformation I: Kontinuierlich → Diskret
Mathematik & Physik
- Transformation II: Diskret → Code
Mathematik & Computer Science
- Subskalenschliessung
- **Was sollte die Zukunft bringen ?**



Mehr Abstraktion !

- **Hardware Constraints & Modellentwicklung**
 - Neuer Computer → Neue Architektur → Neues Modell
 - Optimierung für Architektur ist Teil der Modellierung
 - Trennung von Modellentwicklung und Optimierung

- **Software & Modellentwicklung**
 - Übersetzung von diskretem Modell in Quellcode ist langwierig/fehleranfällig/ineffizient
 - Direkte Verbindung zwischen Formel und Code



Grössere Rechenleistung

- **Simulationen höhere Auflösung**

- Cloud bzw. Eddy Resolving
- Theorie & Praxis der Parametrisierung fragwürdig
 - Parameteroptimierung-per-Hand ersetzen durch explizite Optimierung (*Goal-Oriented Optimization*)
 - Optimierung als Teil des Modells (*Bsp: Datenassimilation*)

- **Ensemble vs. Auflösung**

- Erzeugt Ensemble mehr Information als höhere Auflösung ?
- Statistische Modellierungsansätze
 - Ensemblegenerierung durch Modelvariationen (*aber wie?*)
 - Stochastische Subskalenschliessung
 - Bsp: Keine Bit-Reproduzierbarkeit mehr (Tim Palmer)*



Verlässlichkeit von Simulationen

- **Modell-Simulationen sind unvermeidlich “fehlerhaft”**
 - Fehler/Abweichung muss quantifiziert werden
 - Entwicklung von Verfahren zur Fehlerschätzung
- Ziel sind Aussagen der Form:
Meeresspiegel steigt um $x \pm \Delta x$ cm

Grundlegende Alternativen ?

- Klimasimulation jenseits PDE-Diskretisierung ?
- Statistische Modell anstelle phsikalischer Modelle
 - *Datenanalyse, Lernalgorithmen, Neuronale Netze etc.*
 - *Bestehende Ansätze:*
Proper orthogonal decomposition (POD, PIP, POP ...)



Schlussbemerkung

- **Zur Erinnerung:** Ziel der modellbasierten Simulation ist Verständniss der Natur nicht ihre Nachbildung
 - *Reduktion ist wesentlicher Bestandteil der Modellbildung*
 - *Für die Kunst des Weglassens gibt es keine Theorie*
- **Sprache** der modellbasierten Simulation ist Mathematik
 - *Mathematik erlaubt Information zu quantifizieren und macht sie algorithmischer Verarbeitung zugänglich*

Klimamodellierung := Formulierung einer möglichst präzisen & quantifizierbaren ***Metapher des Klimas.***

