

Seminar zu Wissenschaftliches Rechnen I, WS 25/26

Christoph Pflaum

Konzept

Vorlesung: 2 SWS Donnerstag 12.15 – 14.00

Übung: (Niklas Heidenreich):

Dienstag 16:15 - 17:45 (Tafel)

Dienstag 12:15 - 13:45 (Computer)

Seminar: (Raum 01.255)

Mittwoch 8.15 Uhr – 10.00 Uhr

Dienstag 14.15 Uhr bis 16.00 Uhr

Bestehen desModul

- 1) Hausaufgaben 13 von 20 Punkten
- 2) Vortrag im Seminar
- 3) Schriftliche Prüfung

Termine

Mögliche Termine: 3 Vorträge pro Termin,
Termine sind:

Dienstag 14.15 Uhr bis 16.00 Uhr

- 11.Nov
- 18. Nov
- 2. Dez
- 9. Dez
- 16.Dez
- 13. Jan
- 20. Jan
- 27. Jan
- 3. Febr

Mittwoch 8.15 Uhr – 10.00 Uhr

- 12.Nov
- 19. Nov
- 26. Nov
- 3. Dez
- 10. Dez
- 17.Dez
- 7. Jan
- 14. Jan
- 21. Jan
- 28.Jan
- 4. Febr

Themen Vergabe

- Bis 26. Oktober per Email an
christoph.pflaum@fau.de
drei mögliche Themen angeben (mit Priorität).
- Bis 26. Oktober angeben ob Termin Dienstag oder Mittwoch oder ob beide Termine geeignet sind.
- Endgültige Themenvergabe am 28. Oktober um 14:15 – 15:00

Performance Optimization

1) Bibliothek Boost .

Literature: www.boost.org

2) BLAS (Basic Linear Algebra Subprograms).

Literature: www.netlib.org/blas/

3) SIMD (Single instruction, multiple data)

Literatur: software.intel.com/sites/landingpage/IntrinsicsGuide

-> **and additional literature!!**

Finite Difference Discretization

4) FD for convection diffusion equation.

Literatur: Großmann / Roos

Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen

5) FD-discretization of Neumann boundary's

6) Shortley-Weller FD

Literatur: Hackbusch:

Theorie und Numerik elliptischer Differentialgleichungen

7) Introduction Talk: Some PDE's (by C.Pflaum)

➤ Poisson's equation

$$-\Delta u = f \text{ on } \Omega \quad \text{and} \quad u|_{\partial\Omega} = 0$$

➤ Convection-Diffusion equation

$$-\Delta u + \nabla u \circ \vec{b} = f \text{ on } \Omega \quad \text{and} \quad u|_{\partial\Omega} = 0$$

➤ Helmholtz equation

$$-\Delta u - c u = f \text{ on } \Omega \quad \text{and} \quad u|_{\partial\Omega} = 0$$

where, $c > 0$.

Assume $\Omega = [0,1]^2$ and a FD discretization.

- What are the eigenvalues of Poisson's equation and Helmholtz equation?
- Is the discretization matrix symmetric or not?

Iterative Solvers of $Ax = b$

- 8) Conjugate gradient method, cg
- 9) GMRES, generalized minimal residual method
- 10) MINRES, minimum residual method
- 11) BiCGSTAB, Biconjugate gradient stabilized method

At the end of your talk:

- describe advantages and disadvantages of your method
- how does it work for
 - ❖ Poisson's problem
 - ❖ convection-diffusion problem
 - ❖ Helmholtz problem

Literatur: Axelson, Iterative Solution Methods

Parallelization

12) Domain partitioning and load balancing

For example: ParMETIS

13) **GPU Programmierung mit OpenMP**

(Literatur: Programming your GPU with OpenMP, T. Deakin and T. Mattson)

14) **USING OpenMP The Next Step**

(Literatur: USING OpenMP The Next Step, van der Pas, E.Stotzer, C.Terboven)

15) Ncuda Programmierung

ODE Solvers

16) Runge-Kutta methods

17) Step size control

18) Gear's method

Literatur: - Hairer Wanner, Solving Ordinary Differential Equations
- Stoer/Bulirsch, Numerische Mathematik

Sparse Grids

19) Interpolation of sparse grids

Literatur: Zenger, Sparse grids.

20) Combination technique of sparse grids.

*	*	*	*	*						
*		*		*		$n/2$		$n/4$	$n/4$	
*	*	*	*	*	n					
*		*		*		$n/2$		$n/4$	$n/4$	
*	*	*	*	*						

dünnes Gitter: $O(n \log(n)^{d-1})$ Gitterpunkte

volles Gitter: $O(n^d)$

Ray Tracing (nur wenn zu wenig Vorträge)

21) Ray tracing in Computer Graphics

22) Ray tracing in optics

Buch: Hecht und anderes.

(-> Differentielles Raytracing)