Verifikation und Validierung im wissenschaftlichen Rechnen

Sandra Schröder

Arbeitsbereich Wissenschaftliches Rechnen
Fachbereich Informatik
Fakultät für Mathematik, Informatik und Naturwissenschaften
Universität Hamburg

2012-12-17

Frage Wie sehr können wir den Ergebnissen einer komplexen mathematischen Berechnung "vertrauen"?

Frage Wie sehr können wir den Ergebnissen einer komplexen mathematischen Berechnung "vertrauen"?

Antwort Wir vertrauen nicht, wir verifizieren und validieren das mathematische Modell.

Gliederung

1 Einleitung

2 Definitionen

3 Verifikation

4 Validierung

5 Zusammenfassung

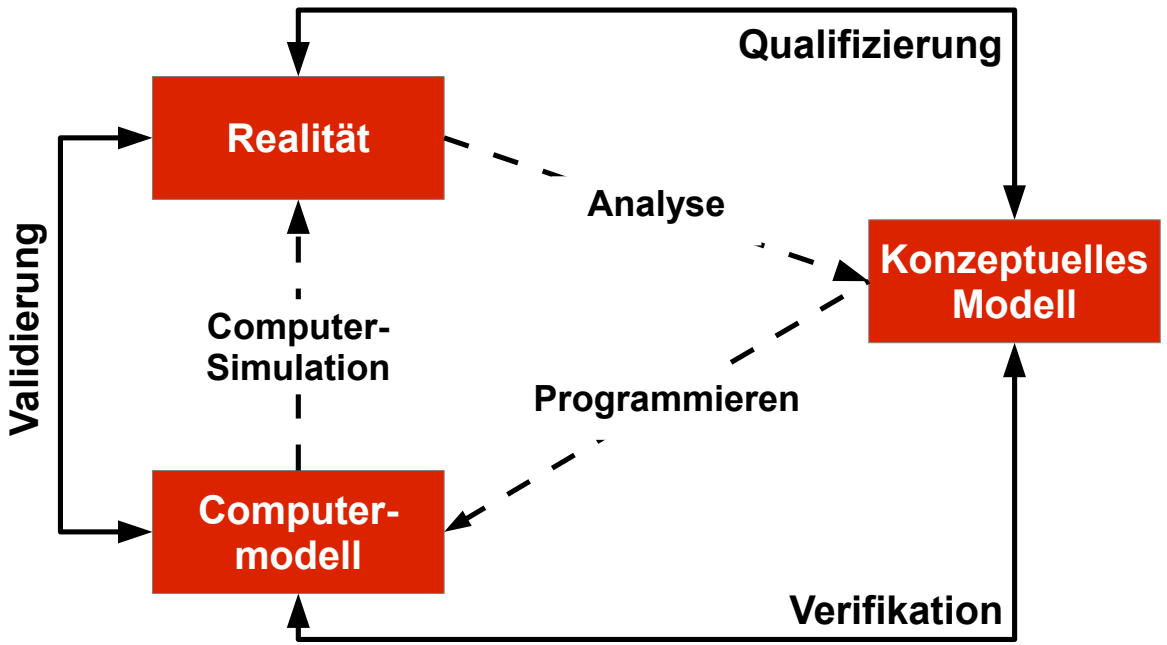


Figure : Verifikation und Validierung in der Modellierung und Simulation (Nachzeichnung aus [OR])

Definition bisher

Verifikation

Substantiation *that a computerized model* **represents a conceptual model** *within specified limits of accuracy.*

Validierung

Substantiation *that a computerized model within its domain of applicability possesses a satisfactory range of accuracy* **consistent with the intended application** *of the model.*

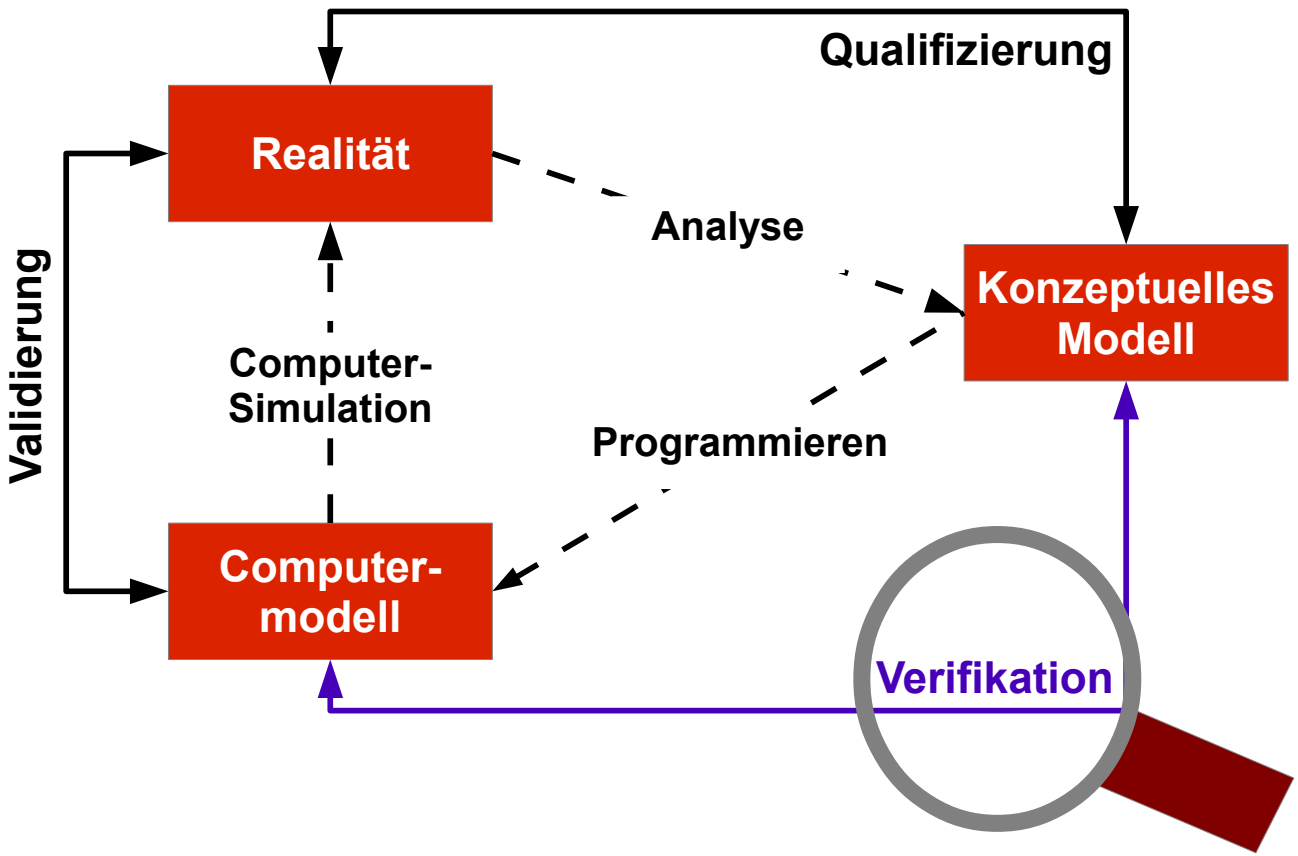
Definition nach American Institute of Aeronautics and Astronautics (1998)

Verifikation

The **process of determining** *that a model implementation accurately represents the developer's conceptual description of the model* **and the solution** *of the model.*

Validierung

The **process of determining** *the degree to which a model is an accurate representation of the* **real world** *from the perspective of the intended use of the model.*


Qualifizierung
Realität
Analyse
Konzeptuelles Modell
Validierung
Computer-Simulation
Programmieren
Computer-modell
Verifikation

Aufgaben der Verifikation

- Untersuchung der numerischen Algorithmen und des Computercodes
  - Ist der Computercode eine gute Repräsentation des mathematischen Modells?
  - Code-Verifikation
  - Exakte Lösung des mathematischen Modells vorhanden
- Untersuchung der numerischen Lösung
  - Wie genau ist das Simulationsergebnis?
  - Lösungs-Verifikation
  - Exakte Lösung des mathematischen Modells ist nicht vorhanden

Der Übergang vom Kontinuierlichen zum Diskreten

Wärmeleitungsgleichung:

$$L(T) = \frac{\partial T}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0$$

Diskretisierung mit finiten Differenzen:

$$L_h(T) = \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t} - \alpha \frac{T_{i+1}^n - 2T_i^n + T_{i-1}^n}{(\Delta x)^2} = 0$$

$\Longrightarrow$ Wie bestimmen wir die Abweichung der Gleichungen?

Abbruchfehler und Diskretisierungsfehler

- Beziehung zwischen mathematischem Modell und diskreter Gleichung

$$\underbrace{L_h(u)}_{\text{diskrete Gleichung}} = \underbrace{L(u)}_{\text{mathematisches Modell}} + \underbrace{TE_h(u)}_{\text{Abbruchfehler}}$$

- Abweichung zwischen exakter Lösung der diskreten Gleichung von der exakten Lösung des mathematischen Modells

$$\epsilon_h = u_h - \tilde{u}$$

Analyse des Abbruchfehlers

- Taylorreihenentwicklung der *abhängigen* Variable
- Taylorreihe von e^x

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \dots$$

- Approximation von e^x durch die ersten drei Summanden ergibt

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + E(x)$$

- Je mehr Summanden, umso genauer die Approximation

Zusammenhang Abbruchfehler und Diskretisierungsfehler

$$L(\epsilon_h) = -TE_h(u_h)$$

$\Longrightarrow$ Theoretische Ordnung der Genauigkeit ist kleinster Exponent eines diskreten Parameters im Abbruchfehler $TE_h(u_h)$

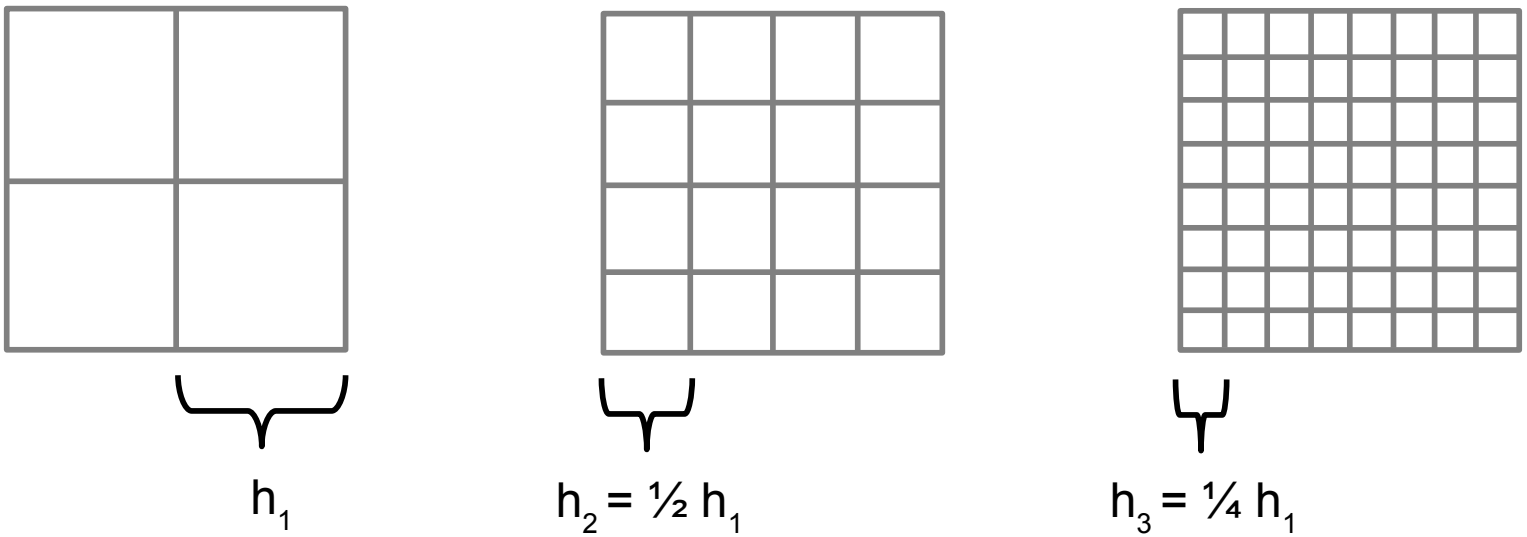
Beispiel: Theoretische Ordnung der diskreten Wärmeleitungsgleichung

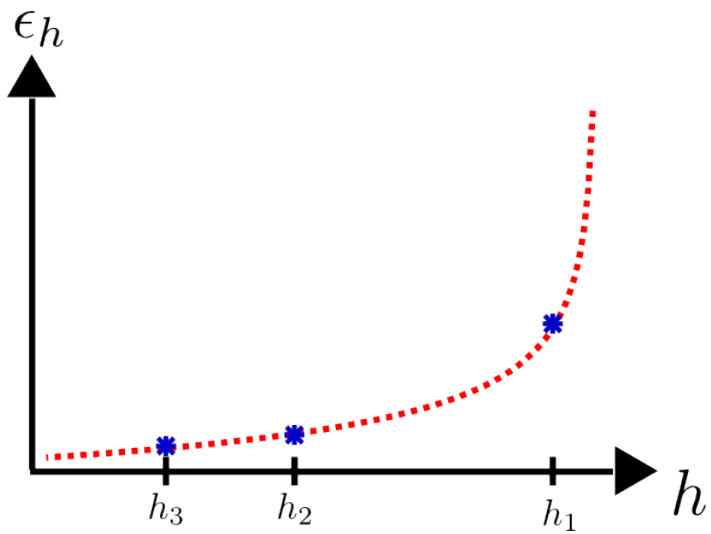
$$\underbrace{\frac{\partial \epsilon_h}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 \epsilon_h}{\partial x^2}}_{L(\epsilon_h)} = \underbrace{-A \cdot \Delta t - (-B) \cdot (\Delta x)^2 + O(\Delta t^2, \Delta x^4)}_{-TE_h(T_h)}$$

Grad der Genauigkeit - Order of Accuracy

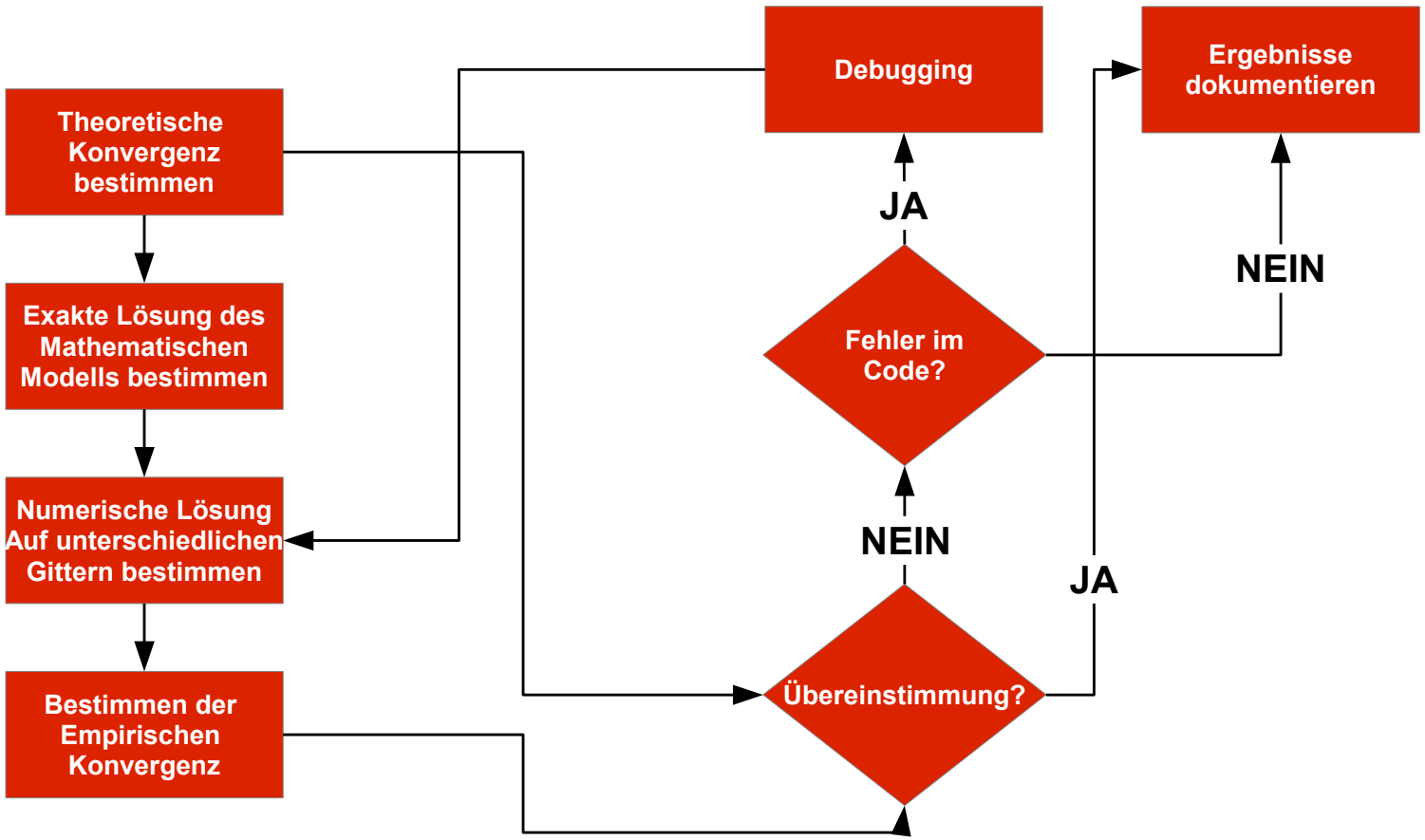
- Strenges Kriterium der Code-Verifikation
- Aufdecken von Implementierungsfehlern
- Theoretische Ordnung der Genauigkeit
  - *Formal Order Of Accuracy*
- Empirische Ordnung der Genauigkeit
  - *Observed Order Of Accuracy*

Empirische Ordnung der Genauigkeit





Anwendung: Aufdecken von Fehlern in der Implementierung



Verifikation der numerischen Lösung

- Bisher den Diskretisierungsfehler kennengelernt
- Weitere numerische Fehler:
  - Rundungsfehler
  - Iterativer Fehler
  - Statistischer Fehler
- Voraussetzung für die Analyse:
  - Wir haben keine Programmierfehler in unserem Code

Rundungsfehler

- Eingeschränkte Genauigkeit der Computer:

$$3.0 \cdot (1.0/3.0) = 0.9999999$$

- Genauigkeit von Fliesskommazahlen hängt ab von
  - der Programmiersprache
  - dem Compiler
  - der Hardware

Anwendungsabhängige Fehler

- Statistischer Fehler
  - Modellierung stochastischer Prozesse
- Iterativer Fehler
  - Lösen von Gleichungssystemen
  - Schrittweise Approximation der Lösung
  - Beispiel: Näherungsweises Bestimmen von Nullstellen

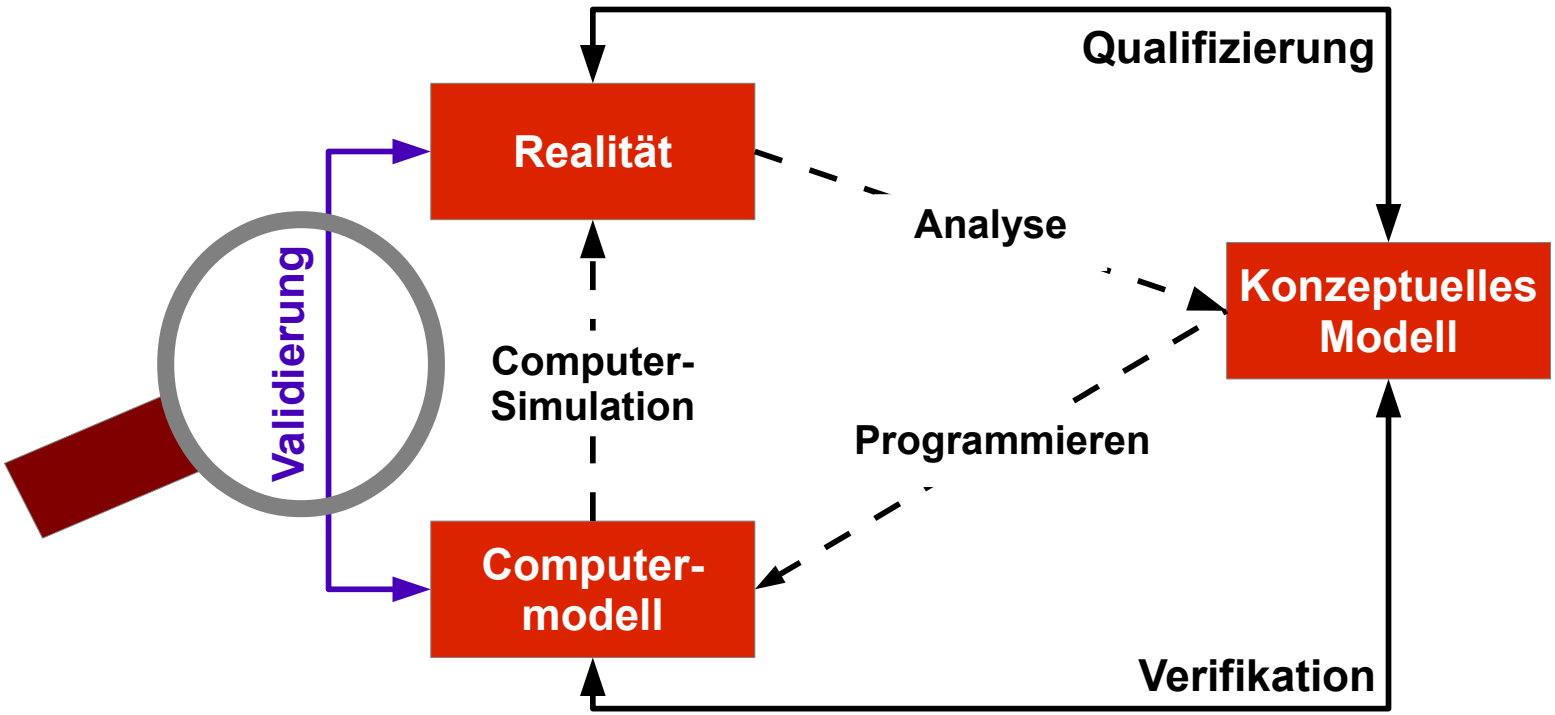
Abschätzung des Diskretisierungsfehlers

- Konnte bis jetzt einfach bestimmt werden
- Schwierig wird es, wenn keine Referenzlösung vorhanden ist
- Abschätzung der exakten Lösung des mathematischen Modells
- Richardson's Extrapolation

Zwischenfazit

"solving the equations right"

- Code Verifikation
  - Funktionieren die Algorithmen so wie man sich es vorstellt?
  - Grad der Genauigkeit des Algorithmus
- Verifikation der Lösung
  - Ist die Simulation genau genug für einen bestimmten Zweck?
  - Analytische Lösung nicht für den Vergleich der Ergebnisse vorhanden
  - Fehler muss abgeschätzt werden


Qualifizierung
Realität
Analyse
Konzeptuelles Modell
Validierung
Computer-Simulation
Programmieren
Computer-modell
Verifikation

Die drei Aspekte der Validierung

"solving the right equations"

- Vergleich der mit dem Computermodell berechneten Ergebnisse mit dem Experiment
- Vorhersage-Fähigkeit des Modells überprüfen
- Vergleich der tatsächlichen Genauigkeit mit den Anforderungen an Genauigkeit

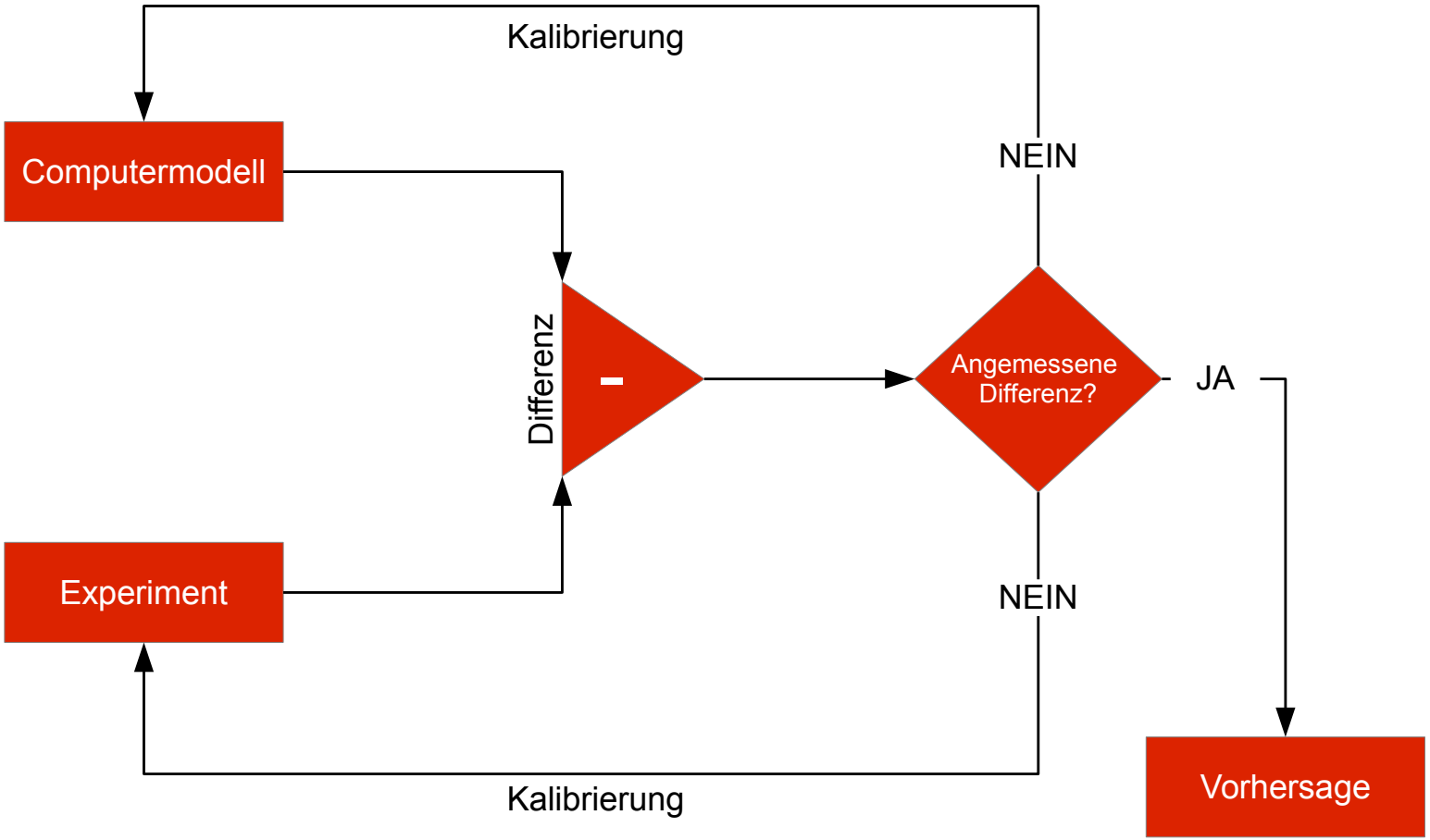


Figure : Validierung im Überblick (Nachzeichnung aus [OR])

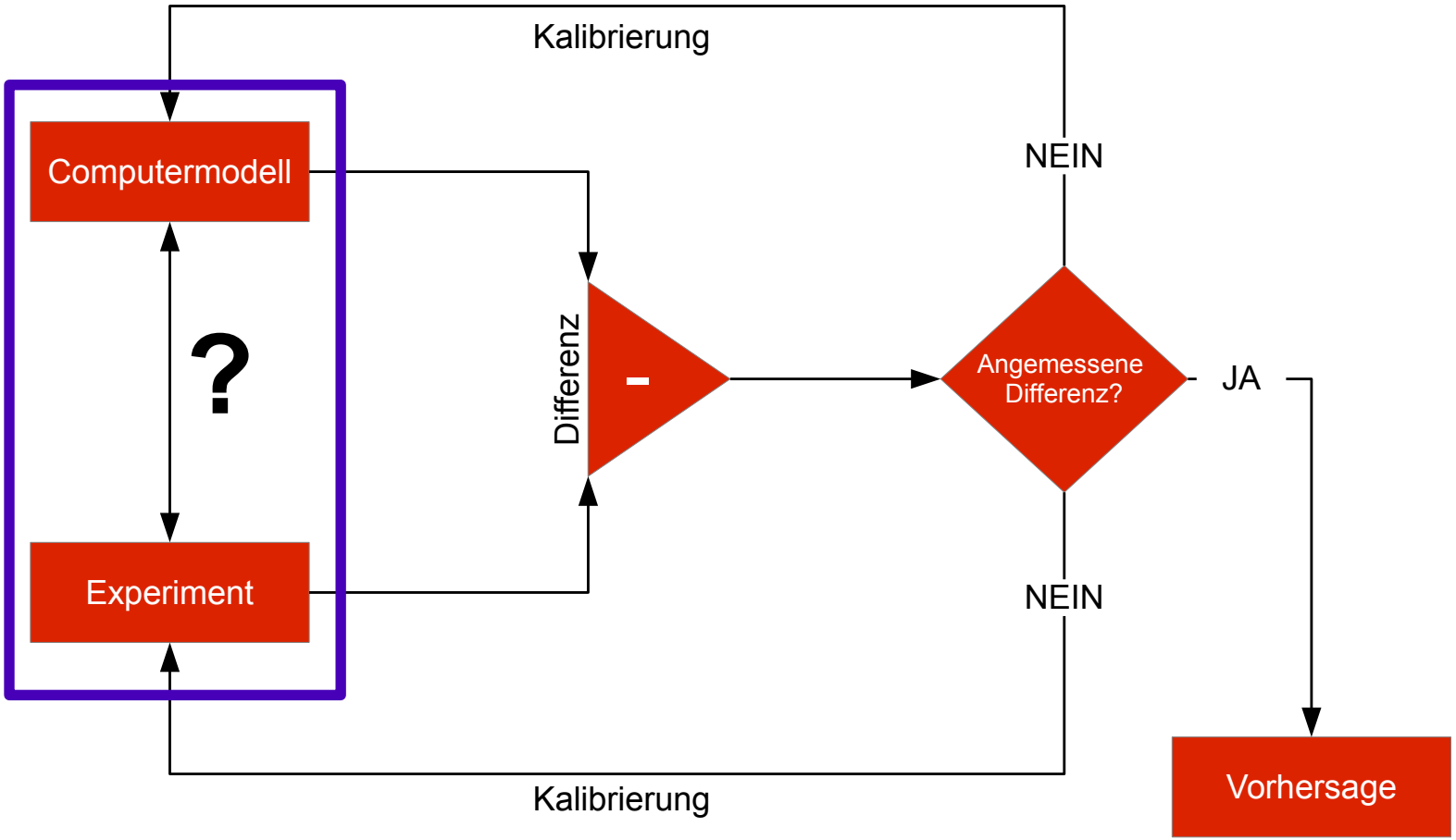


Figure : Validierung im Überblick (Nachzeichnung aus [OR])

Richtlinien zur Entwicklung von Validationsexperimenten

1. Zusammenarbeit und Kommunikation
2. Wiedergabe der relevanten Physik, mit allen Randbedingungen
3. *Synergismus* zwischen Experiment und Simulation
4. Unabhängigkeit zwischen berechneten und experimentellen Ergebnissen
5. Erstellen einer Validationshierarchie
6. Analyse von Unsicherheiten im Experiment

Richtlinie 5: Validierung in kleinen Häppchen

- Validierung des Gesamtsystems ist zu komplex
- Unterteilung des Systems in Teilmodule
- Validierungshierarchie
- Besitzt grundlegend vier Ebenen
  - Gesamtsystem
  - Subsystem
  - Benchmark
  - *Unit*-Probleme

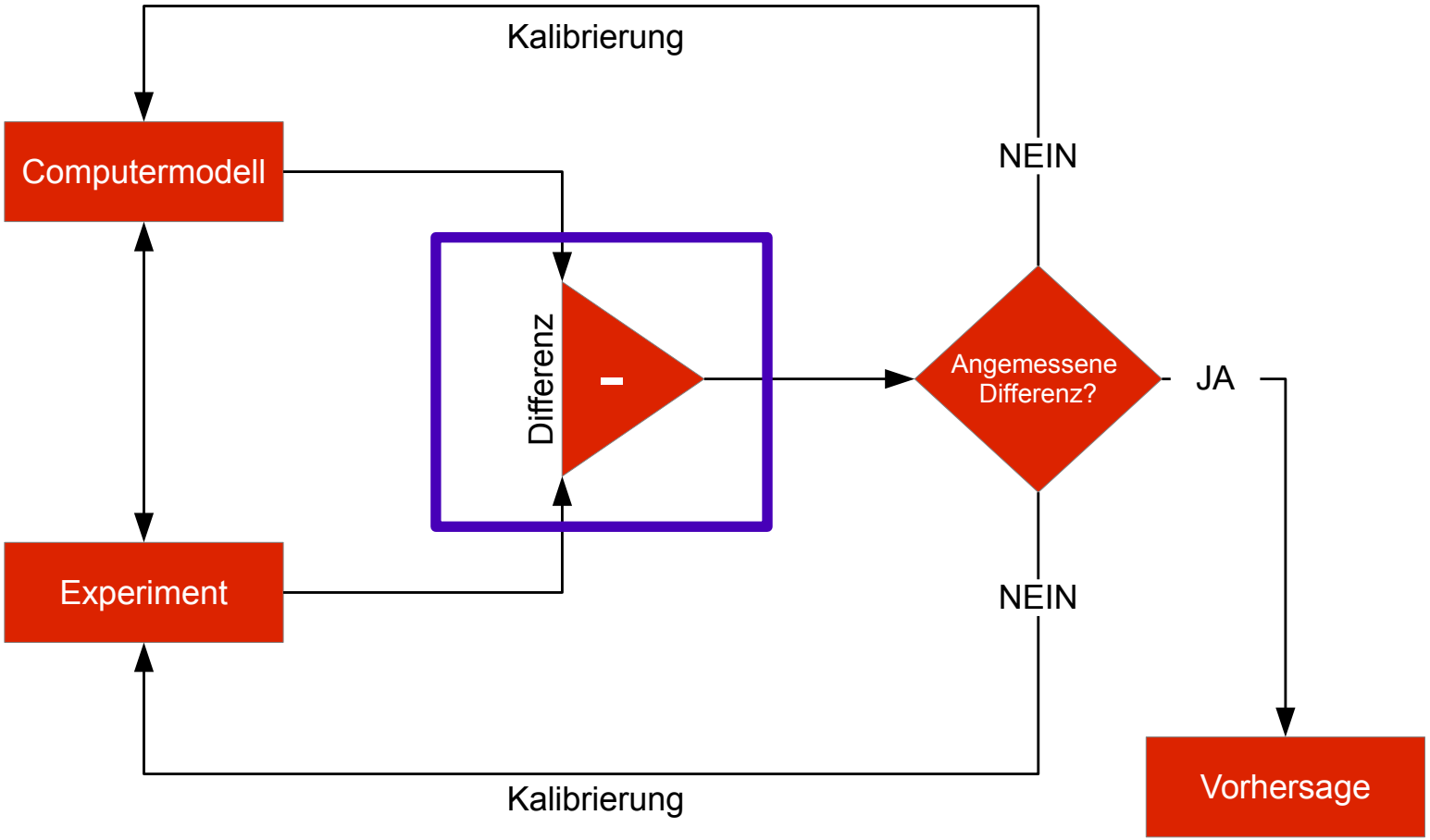


Figure : Validierung im Überblick (Nachzeichnung aus [OR])

Validationsmetrik

- Quantitativer Vergleich
- Wahl zwischen alternativen Modellen
- Eigenschaften einer Metrik

$$d(x, y) \geq 0 \tag{1}$$

$$d(x, y) = d(y, x) \tag{2}$$

$$d(x, y) + d(y, z) \geq d(x, z) \tag{3}$$

$$d(x, y) = 0, \quad \text{GDW.} \quad x = y \tag{4}$$

Was macht den Vergleich so schwierig?

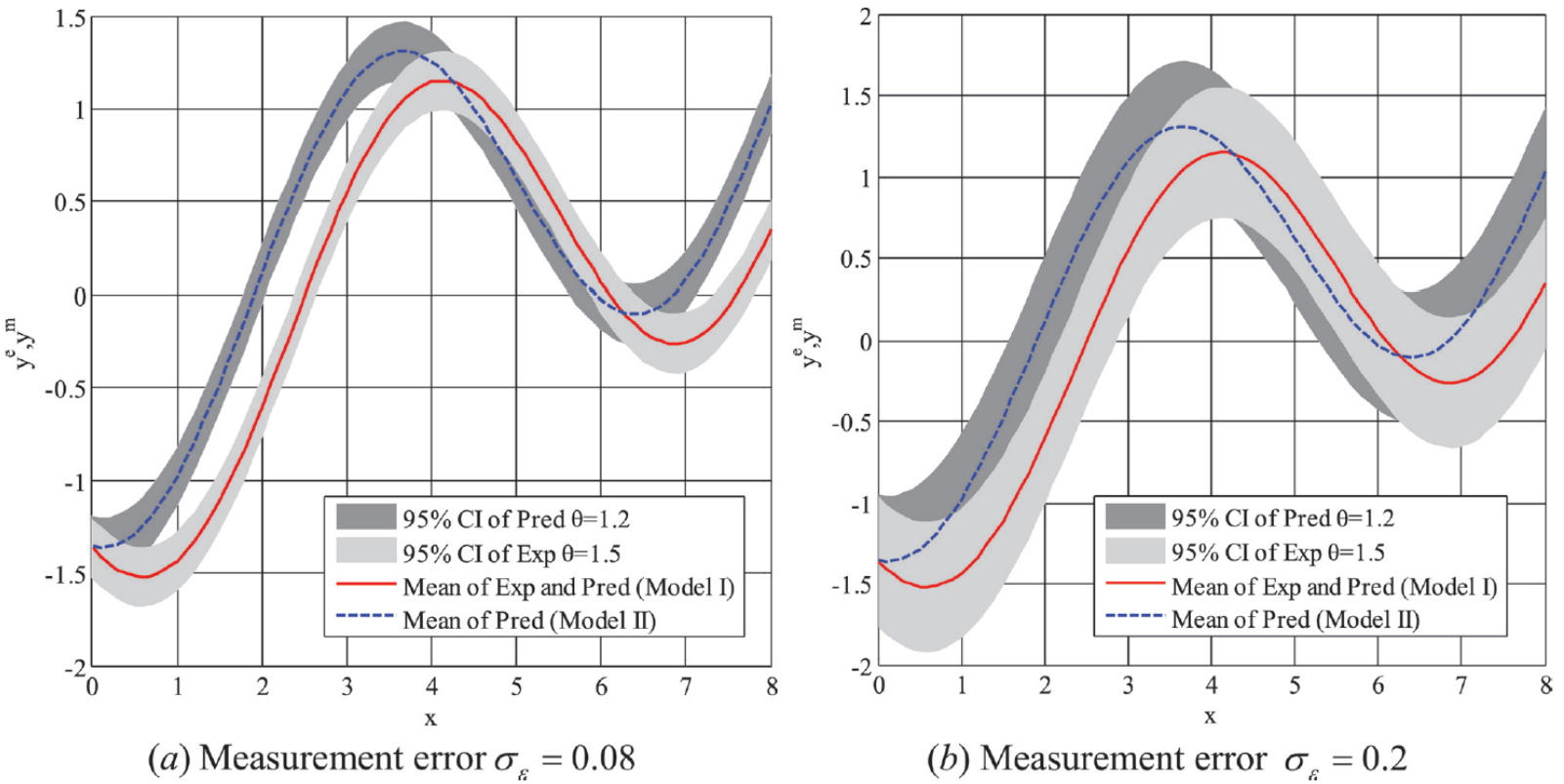
- Messunsicherheiten im Experiment
- Ergebnis liegt in einem bestimmten Intervall
  - Kein expliziter Wert, wie zum Beispiel $x = 5$
- Bekannte Ansätze (entnommen aus [LCAH11])
  - Classical Hypothesis Testing
  - Frequentist's Metric

Vergleich der Qualität der Metriken

- Künstliche Erzeugung von Messungen

$$y^e(x, \Theta) = \sin(x - 0.5\pi\Theta) + \cos(\Theta + 0.25\pi) + 0.2x + \epsilon_e$$

- mit $\Theta = 1.5$, $0 \leq x \leq 8$ und $\epsilon_e \sim N(0, \sigma_\epsilon^2)$
- Zwei Modelle für diese Beobachtungen:
  1. $\Theta = 1.5$
  2. $\Theta = 1.2$



(a) Measurement error $\sigma_\varepsilon = 0.08$ (b) Measurement error $\sigma_\varepsilon = 0.2$

Figure : Ergebnisse des Experiments vs. Vorhersage des Modells [LCAH11]

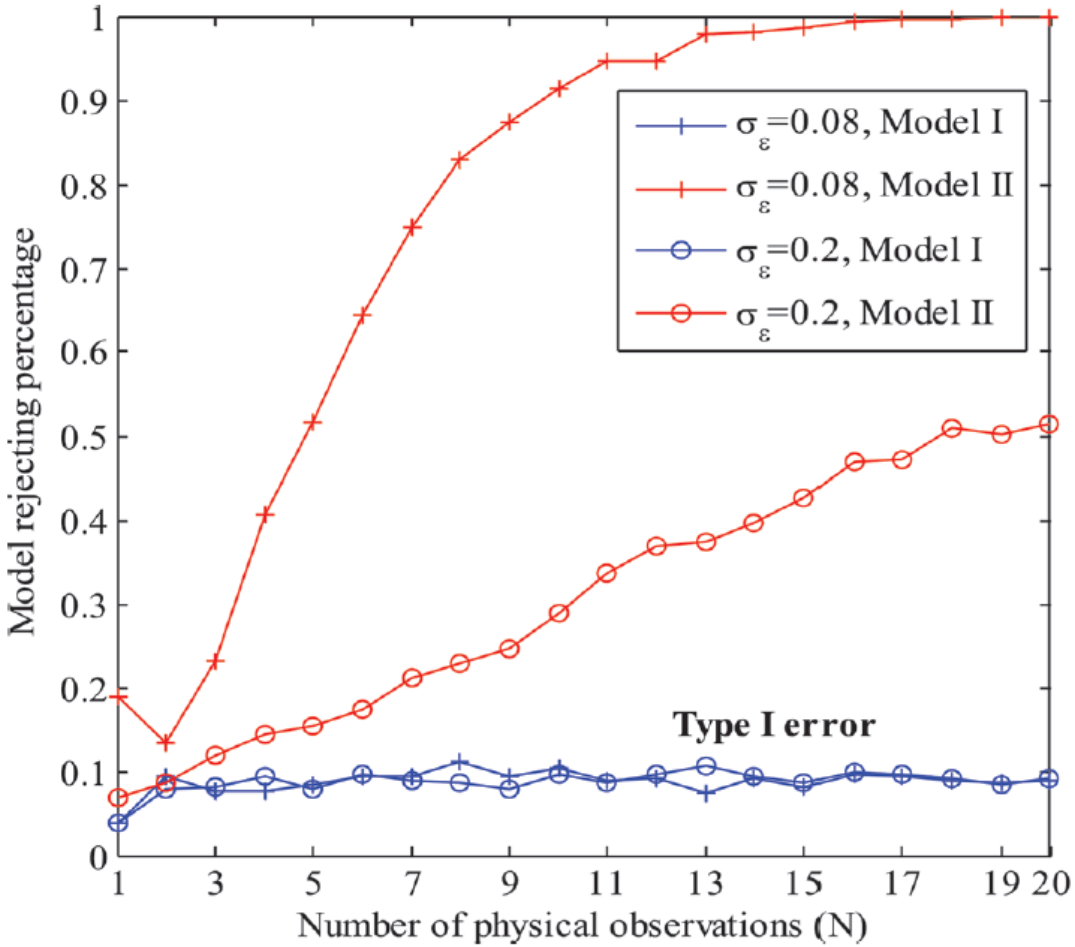


Figure : Ergebnis der Metrik *Classical Hypothesis Testing* [LCAH11]

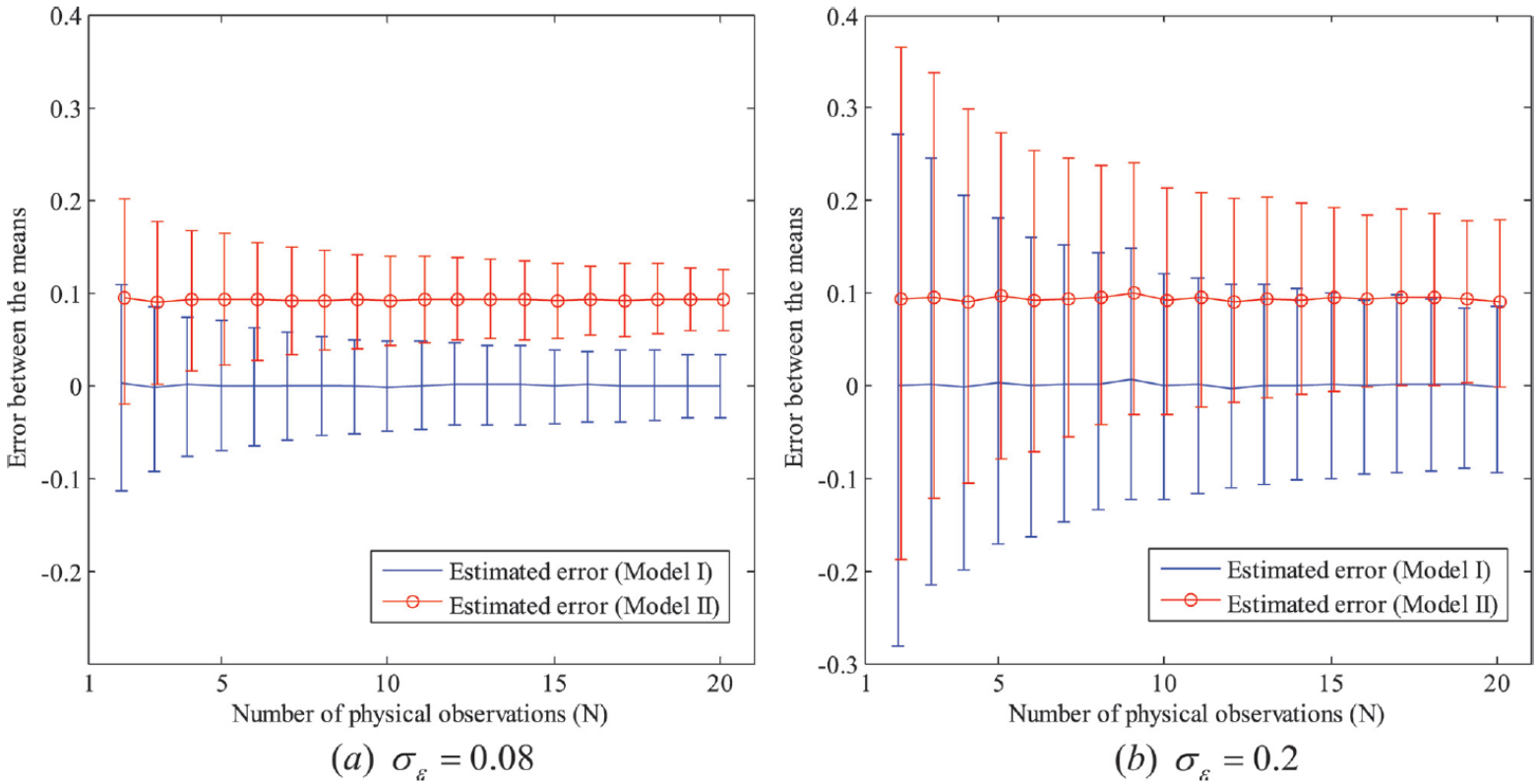


Figure : Ergebnis der Metrik *Frequentist's Metric* [LCAH11]

Zusammenfassung

- Einblick in die Aufgaben der Verifikation und Validierung
- Verifikation beschäftigt sich mit
  - Korrektheit der Algorithmen
  - Korrektheit des Codes
  - Abschätzung numerischer Fehler
- Validierung beschäftigt sich mit
  - Dem Vergleich von Simulation und Experiment
  - Anhand Validationsexperimenten
  - Der Evaluation der Vorhersage-Fähigkeit des Modells

Fazit

- Verifikation und Validierung ein sehr umfassendes Thema
- Schwer zu erarbeiten anhand des Buches, obwohl sehr informativ
- Vielleicht in weitere Seminarthemen aufteilen?
  - Genaueres über Validationsmetriken
  - Fehlerabschätzung
  - Insbesondere Bestimmung des Diskretisierungsfehlers, wenn Referenzlösung nicht vorhanden

Vielen Dank für die Aufmerksamkeit!

Literatur

Yu Liu, Wei Chen, Paul Arendt, and Hong-Zhong Huang.
Toward a better understanding of model validation metrics.
Journal of Mechanical Design, 133(7):071005, 2011.

William L. Oberkampf and Christopher J. Roy.
Verification and Validation in Scientific Computing.
Cambridge University Press.