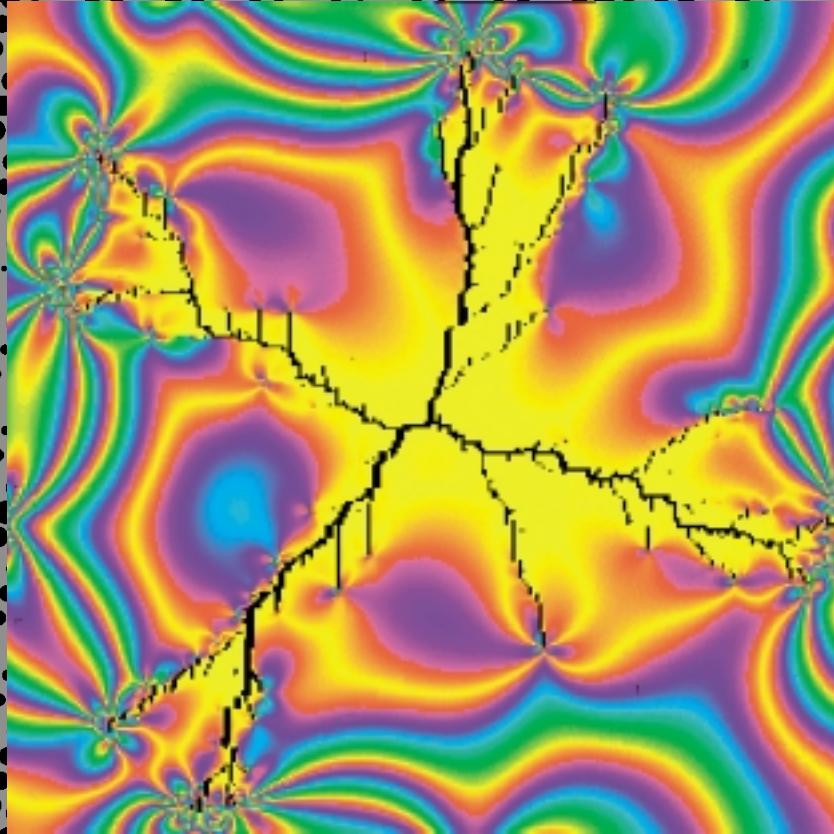


Hans-Joachim Bungartz
Hans-Jürgen Herrmann
Barbara Irmgard Wohlmuth

Simulierte Welten – die Zukunft im Rechner





Wie kommen die „Kachelmänner“ dieser Welt eigentlich zu ihren detaillierten Vorhersagen? Und warum liegen sie manchmal trotzdem so daneben? Was veranlasst Automobilhersteller, das Ende der Ära des Prototypen anzukündigen? Liegt die wiedergekehrte Ruhe im Mururoa-Atoll wirklich darin begründet, dass man im fernen Paris zur Einsicht gelangt ist? Und wer gibt der Voyager-Sonde ihren merkwürdig anmutenden Weg vor, der sie – obwohl schnurstracks unterwegs in Regionen, die nie ein Mensch zuvor gesehen hat – doch wieder an die Erde heranführt? Das Zauberwort heißt numerische Simulation. Auf leistungsfähigen Großrechnern – seien es klassische Supercomputer oder Cluster aus vernetzten PCs – nachgestellte oder vorausberechnete Phänomene und Prozesse aus Natur-, Ingenieur- oder Wirtschaftswissenschaften spielen in Forschung und Entwicklung eine immer wichtigere Rolle. Dies gilt für die eingangs genannten Beispiele ebenso wie für zahlreiche Anwendungen in der Astrophysik, Halbleiter- und Biotechnologie oder in der Systemdynamik sowie – ganz konkret und für alle T-Geplagten relevant – für Aktienkursprognosen.

Spätestens dann, wenn das auf theoretischer Analyse und Experimenten beruhende traditionelle Instrumentarium aus Machbarkeits-, Zeit- oder Kostengründen allein nicht mehr greift, ist die numerische Simulation gefragt. Ihr herausragendes Charakteristikum ist dabei die Interdisziplinarität: Wirklichkeitsnähe und Praxisrelevanz sind hier nur über eine enge Zusammenarbeit von Experten des jeweiligen Faches mit Mathematikern und Informatikern zu erreichen, stellen Mathematik und Informatik als Basistechnologien der numerischen Simulation doch deren Methoden und Werkzeuge bereit. Folgerichtig ist das Zentrum für Simulationstechnik (ZST), das sich derzeit an der Universität Stuttgart in Gründung befindet, eine fakultätsübergreifende Einrichtung, und deshalb wagen wir uns auch nur als Simulantenterzett daran, die Segnungen rechnergestützter Simulationsmethoden zu preisen.

Schneller, höher, weiter!

Seit mehr als einem halben Jahrhundert haben wir ihn, den Computer. Und seit jenen entscheidenden Tagen, als Colossus den Enigma-Code knackte, hat sich für wahr Spektakuläres ereignet. Kein anderes technisches Gerät hat jemals eine solch atemberaubende Entwicklung durchlebt. Fast mit der Präzision eines Naturgesetzes konnte die Leistung des weltweit aktuell größten und schnellsten Rechners alle fünf Jahre um durchschnittlich einen Faktor Zehn gesteigert werden. Seit den Rechnern der ersten Stunde haben wir somit einen Steigerungsfaktor von fast 10^{12} angehäuft – eine Eins mit sage und schreibe zwölf Nullen. Auf einen etwas anschaulicheren Bereich übertragen, bedeutet dies dasselbe Verhältnis wie zwischen der Fortbewegungsgeschwindigkeit einer fußkranken Schnecke und der des Lichts. Niemand kann sich darüber wundern, dass eine derart explosionsartige Entwicklung ihre Spuren hinterlässt und unsere technische Welt ebenso wie unseren Alltag prägt.

Hans-Joachim Bungartz ■

Hans-Jürgen Herrmann / Barbara Irmgard Wohlmut ■

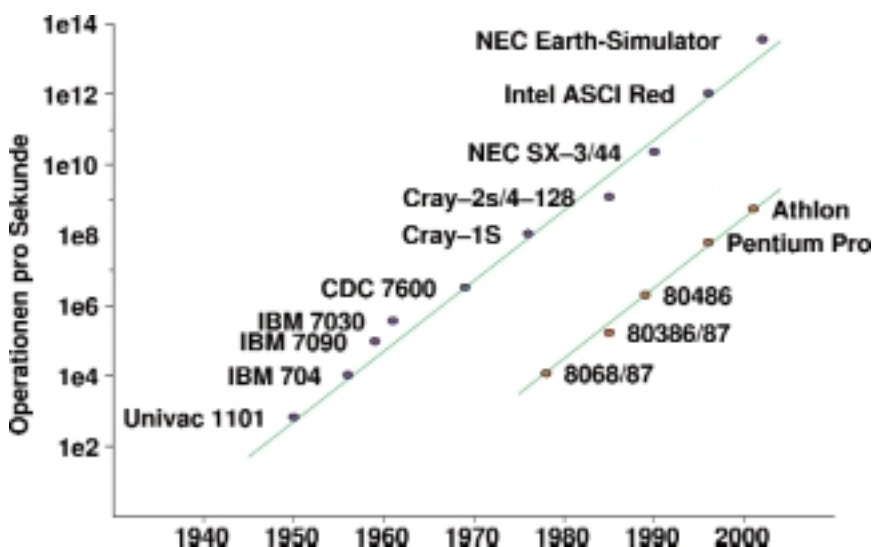
Simulierte Welten – die Zukunft im Rechner ■

oder ein Nobelpreisaspirant eine Überprüfung seiner neuesten Hypothesen über die physikalischen Grundgesetze durchführen. Der Computer ist längst selbst zu einem Gerät geworden, mit dem experimentiert wird. Statt Versuche im klassischen Sinne durchzuführen – also gewissermaßen an der Natur selbst –, modelliert man die Natur auf dem Computer nach und spielt dann die Szenarien am rechnergestützten Modell durch. Die Wettervorhersage etwa läuft nach genau diesem Schema ab. Diese numerische Simulation hat sich inzwischen als eigene Forschungsrichtung etabliert und entwickelt sich ihrerseits bereits rasant. So ist eine Simulationsgruppe für einen heutigen Ingenieurlehrstuhl fast ebenso selbstverständlich wie die gute alte Werkstatt, und die Zahl der Mathematik- oder Informatikfakultäten ohne einschlägige Vertretung wird kleiner. Daraus werden dann schon mal Besitzansprüche abgeleitet und entsprechend lautstark vorgetragen. Eventuelle

Alleinvertretungsgelüste sind allerdings fehl am Platze. Die numerische Simulation ist eben keiner Einzeldisziplin zuzurechnen, sondern ihrem Wesen nach interdisziplinär oder – vielleicht sogar besser – transdisziplinär angelegt.

Nun ist das interdisziplinäre Handeln in unserer modernen Wissenschaftslandschaft in aller Munde. Wenn auch die Vokabel noch nicht ganz so strapaziert ist wie etwa die Begriffe Technologietransfer, Synergie oder Nachhaltigkeit, so ist doch die Notwendigkeit der Zusammenarbeit von Experten unterschiedlicher Disziplinen heute allgemein anerkannt. Keine Frage, über den Tellerrand zu blicken gilt als unabdingbar – manchmal schon geradezu als schick. Umso erstaunlicher ist da der leider immer wieder zu beobachtende Umstand, dass Anspruch und Wirklichkeit im interdisziplinären Denken und Tun weit auseinander klaffen können. Als nahezu unüberwindbar erscheinen oft Berührungängste sowie über Jahre hin-

Für die Mathematik kam das Auftreten des Rechners einer Revolution gleich. Vorbei sind die Zeiten, als es Mathematikern allein um Exaktheit, Existenz und Eindeutigkeit ging: Die numerische Mathematik rundet und nähert ungeniert, sie macht im vollen Bewusstsein ihrer Sinne Fehler – und sie ist konstruktiv, sie will das Objekt ihrer Begierde greifbar machen. Auch die reine Mathematik kann sich der Faszination des Computers nicht entziehen: Da werden wie beim Vierfarbentheorem plötzlich „Computerbeweise“ geführt, und die „Computeralgebra“ eröffnet völlig neue Dimensionen. Das Gesicht der natur- und ingenieurwissenschaftlichen Forschung hat er ebenfalls entscheidend geprägt, zahlreiche Theorien konnten nur aufgrund rechnergestützter Arbeiten entwickelt werden – doch dazu später mehr. Das Rechnen auf und mit dem Computer war selbstverständlich auch ein Startpunkt für die Informatik – eine Abstammung, von der so mancher Web-basierte und multimedial infizierte Informatiker heute überhaupt nichts mehr wissen will. Inzwischen hat sich die Informatik natürlich längst als eigenständige Wissenschaft emanzipiert. Der angelsächsische Begriff der „computer science“ mag das Spektrum der Forschungsgebiete der modernen Informatik zwar nur unzulänglich umschreiben, aber er benennt doch deren treibende Kraft sehr zutreffend.



Kein anderes technisches Gerät kann eine so rasante Steigerung der Leistungsfähigkeit wie der Computer vorweisen.

Ein Fach zwischen den Fächern

Das wertvollste Charakteristikum des Computers ist fraglos seine Flexibilität, also insbesondere seine Programmierbarkeit. Mit demselben Gerät können – zumindest prinzipiell – die Telekom ihre Gebührenabrechnung, der Deutsche Wetterdienst seine Vorhersage für die nächste Woche, die LBBW Prognosen für die Entwicklung des DAX, der umtriebige Craig Venter und Konsorten Entschlüsselungsversuche des menschlichen Erbguts



Kaum bewiesen, schon als „Briefmarke“ verfügbar: Die Kunde vom Computerbeweis von Appel, Haken und Koch aus dem Jahre 1977 zum so genannten Vierfarbentheorem wurde von der Post in Urbana im US-Bundesstaat Illinois sofort in alle Welt getragen! Worum geht's? Eine Vermutung Guthries aus dem Jahre 1852 besagte, dass man jede beliebige Landkarte mit vier Farben so einfärben kann, dass benachbarte Länder stets verschiedene Farben tragen. Bereits die Deutschlandkarte zeigt übrigens, dass weniger Farben nicht immer ausreichen – Thüringen heißt der Sündenbock.



Das Mississippi Basin Model in Jackson, MS – größtes Flussmodell der Welt und Beispiel für eine aufwändige experimentelle Anlage. Angelegt in den vierziger Jahren des letzten Jahrhunderts durch Kriegsgefangene aus Rommels Afrikakorps, wurde hier auf 240 Hektar Fläche das gesamte Einzugsgebiet des Mississippi zwischen Rocky Mountains und Appalachen inklusive aller Zuflüsse maßstabsgetreu nachgebaut. Überflutungen sowie die Einflüsse neuer Binnenhäfen, Dämme oder Deiche waren relativ genau vorhersagbar. Nach der ersten Stilllegung 1972 zeigte die große Flut von 1973, dass die Rechner noch kein Ersatz waren. Der unmittelbaren Wiederinbetriebnahme folgte bald darauf dann aber doch das definitive Ende. Heute haben längst Computersimulationen die Aufgaben der Anlage übernommen und arbeiten inzwischen auch billiger und zuverlässiger!



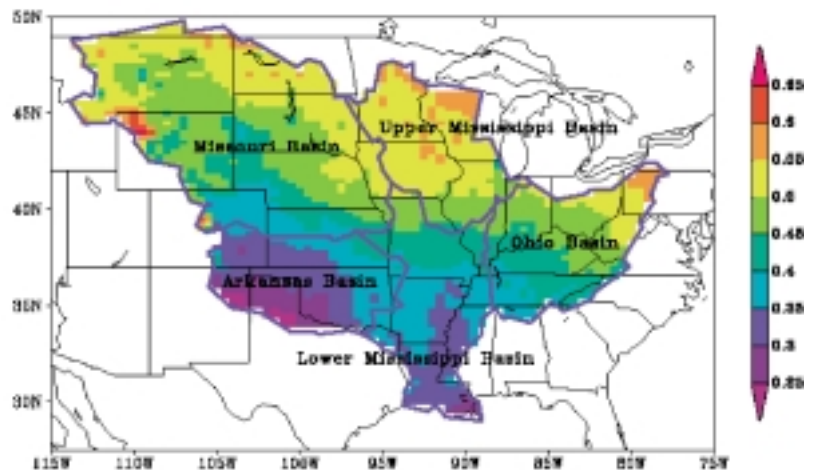
weg gewachsene und manchmal geradezu hingebungsvoll gepflegte Vorbehalte oder Vorurteile anderen Fachrichtungen gegenüber. Selbst bei bestem Willen aller Beteiligten gestaltet sich die Kommunikation nicht immer einfach. So können etwa ein Biologe oder Chemiker und ein Numeriker wunderbar über „Lösungen“ plaudern, ohne dass die ihnen vorschwebenden Dinge auch nur das Geringste miteinander zu tun haben. Gerade die Mathematik leidet oftmals unter ihrer für den internen Gebrauch optimierten Fachsprache, die sie zuweilen regelrecht isoliert. Trotz aller Schwierigkeiten mit dem Miteinander gibt es jedoch zur Öffnung keine Alternative. Deshalb soll dieser Beitrag auch ein Plädoyer für die Überwindung fakultärer Grenzen sein und am Beispiel der numerischen Simulation aufzeigen, wie notwendig gerade heutzutage eine konstruktive und vorbehaltlose interdisziplinäre Zusammenarbeit ist und wie fruchtbar die Resultate einer solch engen Verzahnung sein können.

Wissenschaftliches Rechnen, Hochleistungsrechnen, Höchstleistungsrechnen, rechnergestützte Wissenschaften, Scientific Computing, Computational Science and Engineering – das sind nur einige der Bezeichner, mit denen die zum eigenständigen Forschungsgebiet avancierte Methodik der numerischen Simulation

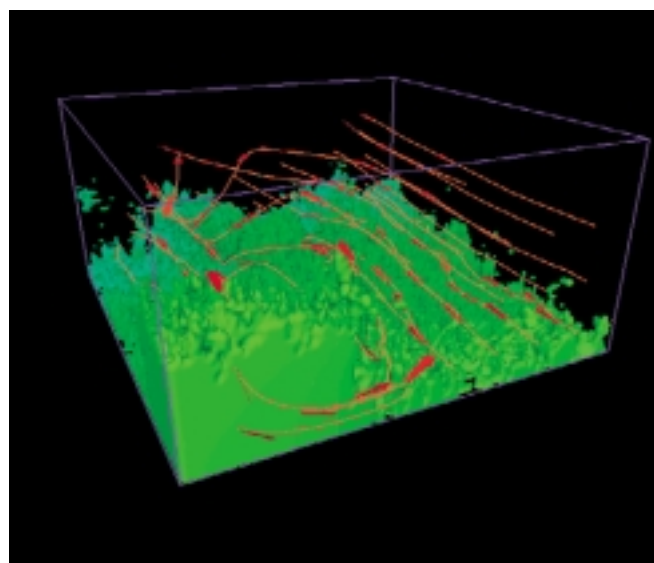
Auf dem Weg zu einer effizienteren biologischen Abwasserreinigung: mikroskalige Simulation von Strömungsvorgängen in Biofilmen.

Annual Mean Cloud Cover Fraction

NOAA/NESDIS GCIP Satellite Estimates, (96-99)



University of Maryland



Wechselwirkungen ■
Jahrbuch 2002 ■

Zu komplex sind einerseits inzwischen die zu simulierenden Systeme, als dass Mathematikern oder Informatikern alleine eine realitätsnahe Modellierung gelingen könnte, zu hoch sind andererseits die Anforderungen an Rechenzeit und Speicherplatz, als dass mit den etwa in Ingenieurlehrbüchern vorgedruckenen numerischen Methoden auf klassischen Monoprozessorarchitekturen beziehungsweise mittels einer Hauruck-Parallelisierung zufrieden stellende Resultate vor Ablauf eines Wissenschaftlerlebens zu erzielen wären.

Warum überhaupt Simulation?

Dass die Entwicklung und der Einsatz von Simulationsverfahren bereits heute mit Fug und Recht als große Herausforderung für Wissenschaft und Wirtschaft bezeichnet werden können und in Zukunft noch stark an Bedeutung zulegen werden, kann schwerlich bestritten werden. Zu offenkundig ist, dass das klassische Instrumentarium – also theoretische Analyse und Experiment – auf sich alleine gestellt immer öfter an seine Grenzen stößt. So führt die Erfordernis einer möglichst realitätsnahen Beschreibung der zu untersuchenden Phänomene, Prozesse oder Systeme in aller Regel zu Modellen, die sich aufgrund ihres Komplexitätsgrades einer analytischen Behandlung entziehen. Wenn überhaupt, dann sind allenfalls noch Aussagen zur Existenz und Eindeutigkeit von Lösungen zu erwarten, nicht jedoch explizite Formeln zu deren geschlossener Darstellung. Andererseits sind auch den Experimentiermöglichkeiten in vielen Fällen Grenzen gesetzt. Manchmal sind Experimente schlichtweg unmöglich. Vorgänge aus der Astrophysik wie beispielsweise der Lebenszyklus einer Galaxie dauern bei weitem zu lange, als dass ein noch so geduldiger Astronom sie beobachten könnte. Auch klimatische Phänomene wie der Treibhauseffekt sind äußerst unzugänglich: Man kann eben den weltweiten CO₂-Ausstoß nicht so ohne weiteres für drei Monate verdoppeln oder halbieren, um die Auswirkungen zu messen, und Laborexperimente werfen hier natürlich die Frage der Skalierbarkeit auf.

Andere Vorgänge wiederum laufen zu schnell ab, als dass sie mit heutiger Messtechnik erfassbar wären. Auch die räumliche Auflösung stellt oft ein Problem dar: Wie soll man Vorgänge sehen können, die sich auf so kleinen Skalen abspielen,

dass sie durch mikroskopische Techniken nicht mehr darstellbar sind? Nicht dass Simulationen hier eine präzise Vorhersage vermocht hätten, aber die Auswirkungen der Einführung des Euro waren eben aus prinzipiellen Gründen nicht durch Feldversuche im klassischen Sinne zu prognostizieren. Dass schließlich alle Theorien rund um den Urknall auf Rechnerunterstützung angewiesen sind, verwundert ebenso wenig.

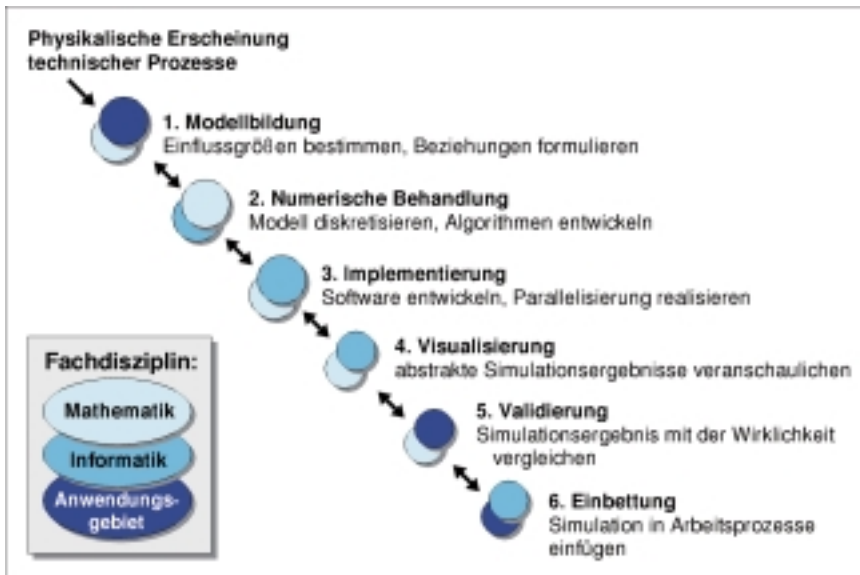
In anderen Fällen sind Experimente zwar machbar, aber aufgrund gefährlicher oder irreversibler Begleiterscheinungen unerwünscht – man denke nur etwa an Lawinenabgänge, Tests von Kernwaffen oder an Versuche am Menschen in der Medizin. Oftmals weist aber ein ganz und gar pragmatischer und gerade heutzutage hervorragend vermittelbarer Grund in Richtung Simulation: die Kostenfrage. So können beispielsweise durch simulierte Crash- und – allen Unkenrufen zum Trotz – Elchtest bei der Automobilentwicklung ohne negative Auswirkungen auf die Fahrzeugsicherheit beträchtliche Summen eingespart werden, ja der ganze Prototyp könnte bei konsequentem Einsatz von Simulationsmethoden in der Automobilindustrie bald der Vergangenheit angehören. Nach so vielen in der Standort- und Schlusslichtdiskussion beklagten kostentreibenden Faktoren nun endlich einmal ein kostenenkender – wenn das nichts ist! Ganz gleich, wo sich das Verhältnis von klassischem Experiment und Computersimulation auch im Einzelfall einpendeln mag – als Ergänzung experimenteller Untersuchungen ist die Simulation auf jeden Fall eine Bereicherung und bereits heute nicht mehr aus den Forschungslabors sowohl großer Konzerne als auch technologieorientierter kleiner und mittelständischer Unternehmen wegzudenken.

An die Arbeit!

Die Interdisziplinarität der numerischen Simulation spiegelt sich auch in ihrem vielschichtigen Aufgabenspektrum wider. Wir wollen bei der Arbeit des numerischen Simulanten – beschämt eingedenk der Herkunft des Worts Simulation: „bewusste und meist zweckgerichtete Vortäuschung von Zuständen“ – sechs wesentliche Schritte unterscheiden: Modellbildung, numerische Behandlung, Implementierung, Visualisierung, Validierung und Einbettung.

heute versehen wird. Nicht jeder Begriff ist glücklich gewählt, denkt doch der mit dem *wissenschaftlichen* Rechnen Konfrontierte fast unweigerlich sofort über das Wesen des *unwissenschaftlichen* Rechnens nach. Entscheidend ist, dass die numerische Simulation in zunehmendem Maße als gleichberechtigter Partner neben die beiden klassischen Säulen des Erkenntniserwerbs in den betreffenden Anwendungswissenschaften tritt, die theoretische Untersuchung und das Experiment. Die jeweilige Anwendungswissenschaft bringt dabei ihr wissenschaftliches und technologisches Know-how sowie die Möglichkeiten und Fertigkeiten zur Validierung der Simulationsergebnisse allgemein sowie insbesondere der gewählten Modelle mittels experimenteller Techniken ein. Die Mathematik leistet wichtige Beiträge sowohl bei der Modellbildung als auch bei der Entwicklung genauer, robuster und schnell konvergierender numerischer Verfahren zur rechnergestützten Lösung der Modellgleichungen.

Die zentrale Rolle der Informatik schließlich besteht in der Bereitstellung, Nutzbarmachung und Programmierung moderner Rechnerarchitekturen sowie in der Algorithmik und Visualisierung. Die Vergangenheit hat mehr als deutlich gezeigt, dass keine der involvierten Disziplinen im Alleingang in der Lage ist, die numerische Simulation entscheidend voranzubringen – geschweige denn, die so genannten „Grand Challenges“ (numerische Simulation etwa in den Bereichen Wettervorhersage, Klimamodellierung, Aerodynamik, Quantenchromodynamik, Gentechnologie etc.) erfolgreich anzugehen.



Vom Modell zum Werkzeug: Die sechs Arbeitsschritte bei der numerischen Simulation.

1. *Die Modellbildung.* Am Anfang jeder Simulation steht die Entwicklung eines geeigneten mathematischen Modells der zu simulierenden Phänomene oder Prozesse. Dieses soll als vereinfachtes Abbild der Realität möglichst viele relevante Einflussgrößen sowie deren Beziehungsgeflecht erfassen, konsistent formuliert und eindeutig lösbar sein und zudem seine anschließende rechnergestützte Behandlung gestatten. Abhängig von den jeweils angemessenen Beschreibungsmitteln, die die Mathematik bereitstellt, erhält man unterschiedlichste Modelle (kontinuierlich, diskret oder hybrid, deterministisch oder stochastisch), zumeist jedoch ein analytisch nicht zu lösendes System gekoppelter (Differential-) Gleichungen.

2. *Die numerische Behandlung.* Da Rechner nicht mit dem reellen Kontinuum, sondern nur mit endlich vielen diskreten Zahlen (den so genannten Gleitpunktzahlen) arbeiten können, müssen die einzelnen Terme der vorliegenden Modellgleichungen sowie – bei Problemen mit räumlicher Auflösung – das betrachtete Simulationsgebiet zunächst diskretisiert und somit in eine für den Computereinsatz geeignete Form gebracht werden. Für die Lösung der dabei entstehenden diskretisierten Gleichungssysteme müssen anschließend effiziente (das heißt im Speicherverbrauch sparsame und schnelle) numerische Verfahren, zumeist iterativer Art, bereitgestellt und eingesetzt werden. Rundungsfehler,

Diskretisierungsfehler, Abbruchfehler – nur einige der Schwierigkeiten, mit denen Numeriker zu kämpfen haben!

3. *Die Implementierung.* Hier ist neben der Auswahl geeigneter Programmiersprachen (eine Entscheidung, die über das geläufige „FORTRAN, C oder C++?“ weit hinausgeht) und Datenstrukturen vor allem die parallele oder verteilte Bearbeitung von großer Bedeutung, da realitätsnahe Simulationsrechnungen aus Speicherplatz- und Rechenzeitgründen in der Regel nur auf Rechnernetzen oder auf Supercomputern durchgeführt werden können. Wer je auf einer Baustelle die Arbeitsverteilung zwischen Biertrinkern und Steineschleppern beobachtet hat, der kann schon ahnen, dass ein dynamischer Ausgleich der Last bei einer größeren Anzahl von Prozessoren alles andere als eine triviale Aufgabe ist. Zudem sind die heutigen Simulationscodes sehr umfangreiche Programmpakete, zu deren Entwurf, Umsetzung, Wartung und Weiterentwicklung Techniken des Software-Engineering unerlässlich sind.

4. *Die Visualisierung.* Bei der numerischen Simulation fallen üblicherweise sehr große Datenmengen an, die sich nicht immer in einem oder wenigen Parametern wie etwa dem berühmten c_w -Wert (Widerstandsbeiwert) beziehungsweise in Kennlinien zusammenfassen lassen. Oft sind es gerade die lokalen Details, die interessieren: An welcher Stelle des umströmten Pkw

entstehen welche Verwirbelungen, und welche Auswirkungen haben sie? Wo genau ist mit den stärksten Niederschlägen zu rechnen? Solche räumlich aufgelösten Simulationsergebnisse werden einer Interpretation und somit dem grundlegenden Verständnis überhaupt nur zugänglich, wenn sie veranschaulicht und graphisch aufbereitet werden.

5. *Die Validierung.* Wenn nach langen Bemühungen und oftmals nahezu ebenso langen Rechenzeiten endlich ein Simulationsergebnis vorliegt, dem nicht auf den ersten Blick anzusehen ist, dass es mit der Wirklichkeit auch nicht das Geringste zu tun haben kann, obsiegt oft das Hochgefühl über die Skepsis. Jedoch ist gerade die abschließende Phase des Nachprüfens der Resultate von jedem der vorigen Schritte (also des Modells, des numerischen Verfahrens, des implementierten Programms und der generierten Visualisierungen) unerlässlich. Hier sind wieder die Expertise des Spezialisten aus der jeweiligen Anwendungsdisziplin sowie – etwa zur Eichung von Parametern in einfachen Fällen – experimentell bestimmte Vergleichswerte erforderlich.

6. *Die Einbettung.* In industriellen Anwendungen tritt die numerische Simulation nicht mehr als komplett separierter Entwicklungsschritt auf, sondern wird immer öfter in den gesamten Produktentwicklungsprozess integriert. Deshalb müssen Schnittstellen bereitgestellt werden, die eine direkte Anbindung von Simulationssoftware an die Entwicklungssysteme der CAD-Welt oder an die Steuerprogramme der Fertigungsprozesse gestatten. Nur so lässt sich beispielsweise die Simulation der aerodynamischen Eigenschaften eines Pkw zur Ermittlung seines c_w -Wertes bereits zu einem sehr frühen Zeitpunkt in der Entwurfsphase in den Designprozess der Karosserie integrieren, und nur so können Ergebnisse einer Systemsimulation direkt in die Anlagensteuerung einfließen.

Während bei der Herleitung und Validierung von Modellen traditionell die jeweilige Anwendungsdisziplin und bei der Modellanalyse sowie bei der Numerik die Mathematik den Ton angeben, liegen die Schwerpunkte informatischen Treibens üblicherweise bei Implementierung, Visualisierung und Einbettung. Wir wollen uns im Folgenden auf die ersten drei Phasen konzentrieren.

Modellbildung und Validierung

Die meisten der spannenden Probleme aus Technik und Naturwissenschaft, die uns jeweils am brennendsten interessieren, sind leider sehr kompliziert. An diesem einerseits lästigen, andererseits aber die Investitionen in die entsprechenden Wissenschaftsfelder erst rechtfertigenden Umstand hat sich bis heute nichts geändert. Denken wir zum Beispiel an den

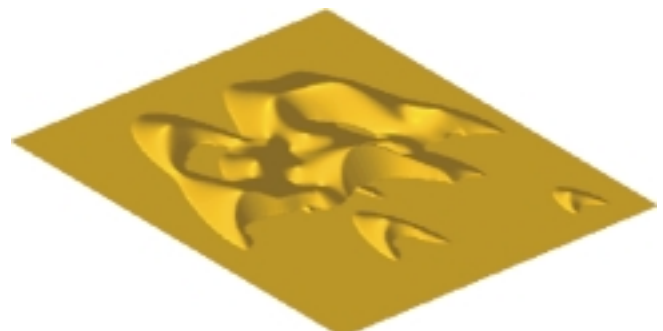
Metabolismus in einer Zelle, an Crash-tests in der Pkw-Entwicklung oder an das Zusammenbrechen eines Staudamms. Die Anzahl der physikalischen Effekte und chemischen Reaktionen bei solchen Vorgängen ist so enorm, dass es völlig unmöglich ist, jede Einzelheit zu erfassen – wer kann schon mit Sicherheit ausschließen, dass die Mondphasen Ursache des Dammbrochs waren? Hier tritt die Sachkenntnis des Experten der jeweiligen Anwendungswissenschaft markant in den Vordergrund. Nur er oder sie kann entscheiden, welche Effekte die wesentlichen Auswirkungen auf das gesuchte Resultat haben, was wichtig und was vielleicht vernachlässigbar ist, und somit gewissermaßen die Essenz der Realität herauskristallisieren. Dieser Schritt, der der Kenntnis von der Größenordnung experimenteller Daten ebenso bedarf wie eines Überblicks über alle möglichen Nebenreaktionen, Seiteneffekte und Implikationen, stellt das Herzstück einer jeden Modellierung dar. Das Erfolgsrezept ist kurz und bündig: Je mehr Sachverstand und Erfahrung hier einfließen, desto besser ist das resultierende Modell auf die Fragestellung zugeschnitten.

Am Ende dieses Destillierungsprozesses steht als Kondensat eine mehr oder weniger große Menge von Formeln, beispielsweise in der Gestalt eines Systems gekoppelter Differential- oder Integralgleichungen. Der Physiker beziehungsweise Ingenieur kleidet sein Problem gewissermaßen in die ihm zugängliche und zuzugende Mathematik – was selbstredend noch lange nicht heißt, dass die Repräsentanten letztgenannter Zunft ob der so hingeschriebenen Formeln nicht die Stirn heftigst in Falten legen. Wie das berühmte Beispiel der Dirac'schen Delta-Funktion aber zeigt, kann die vom Physiker benötigte mathematische Formulierung seines Problems den Mathematiker geradezu dazu zwingen, neue sowie dem Problem angemessenere Konzepte und Methoden zu entwickeln. David Hilbert erfasste sehr wohl die inspirierende Ausstrahlung der Naturwissenschaften auf die Mathematik und besetzte stets eine seiner Assistentenstellen mit einem Physiker. Damals wie heute ist es das fruchtbare Zusammenspiel der Mathematik mit der Anwendung, die zu präzisen und trotzdem noch handhabbaren Modellen führt, welche nun einer rechnergestützten Lösung zugänglich sind, ja geradezu nach ihr verlangen.

Doch bevor ein Modell nun endgültig als salonfähig gelten darf und den Numerikern mit ihren schweren Geschützen vertrauensvoll übergeben werden kann, gilt es allerdings, viele Prüfungen zu bestehen. In kleinen Testrechnungen auf dem PC – numerische Prototypen sozusagen – werden mit Probesimulationen vorläufige Ergebnisse erzielt, an denen man



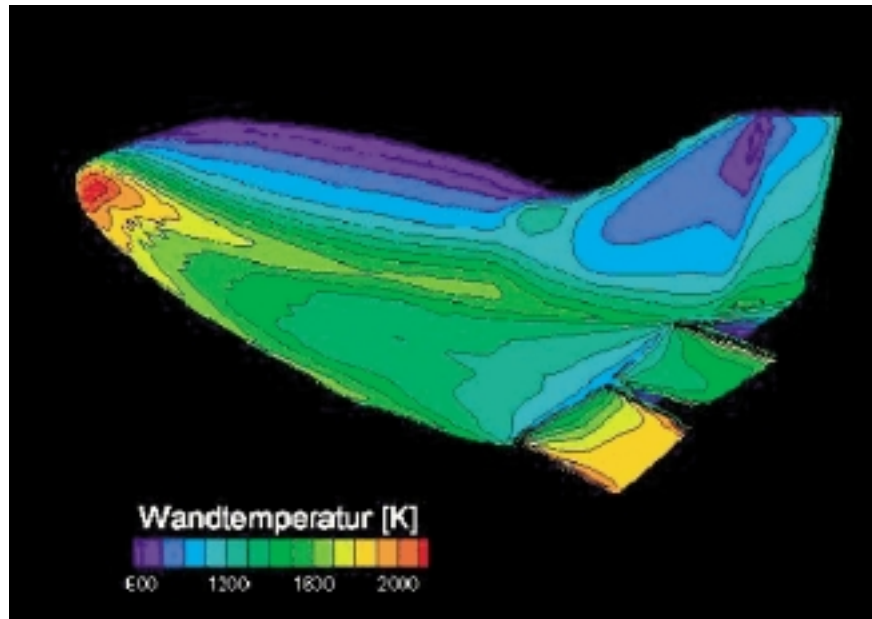
Riesige Sandmassen wälzen sich auf die mauretanische Hauptstadt Nouakchott zu. Moderne Simulationstechniken erlauben es, derartige Dünenbewegungen tausendmal schneller zu simulieren als in Wirklichkeit und geben somit Städteplanern die Möglichkeit, dem Unheil zuvorzukommen und Methoden, Dünen nachhaltig zu zerstören, vorher durchzuspielen



oft schon erkennen kann, ob etwas qualitativ Sinnvolles herauskommt und ob in gewissen Grenzfällen, die man gut versteht, das bekannte Ergebnis reproduziert wird. Der Staudamm sollte eben tunlichst, auch wenn er leer ist, nicht brechen, und das Testauto muss sich beim Aufprall auf den Betonklotz verbiegen und darf nicht zersplittern. Erst wenn man sich eine gewisse Sicherheit errechnet hat, dass qualitativ und quantitativ korrekte Resultate möglich sind, wird das Modell auf die Höchstleistungsrechner losgelassen (oder die Rechner auf das Modell – je nach Sehweise).

Ganz am Schluss, nachdem das Modell von Numerikern und Informatikern nach allen Regeln diskretisierender, algorithmischer, hart- und weichwariger sowie farbgebender Kunst traktiert worden ist, hat der Anwender seinen zweiten Auftritt auf der Bühne der Simulation. Nur er kann die Tragweite der Ergebnisse voll erfassen, denn er kennt die Näherungen und Vereinfachungen seines Modells wie kein anderer. Bevor das Team stolz die Ergebnisse denjenigen Institutionen präsentiert, die Forschungsgelder oder akademischen Ruhm ausschütten, wird er bescheiden erst einmal prüfen, ob die Ergebnisse mit den Beobachtungen und mit der Erfahrung übereinstimmen – ein Prozess, den man Validierung nennt. Die quantitative Übereinstimmung wird nie perfekt sein. Es geht darum zu verstehen, wie wesentlich die Abweichungen sind, in welchen Fällen die Modellierung verlässlich ist und, ganz besonders wichtig, die Schwankungen der experimentellen Messungen sowie die numerischen Fehlerbalken richtig abzuschätzen und miteinander zu vergleichen. Der wahre Fortschritt, wenn jemand mit verbesserten Modellen und Simulationen einige Zweifel und Unstimmigkeiten gewissermaßen im Kleingedruckten seines Vorgängers ausmerzt und korrigiert, ist oft nicht leicht zu erkennen und tritt schon mal hinter die bunte Verpackung zurück – was ihn aber keineswegs weniger wertvoll macht.

Um ein Gefühl dafür zu bekommen, was einen Modellierer heute so bewegt und umtreibt, wollen wir uns eine aktuelle Thematik herausgreifen. Wir alle kennen die Saga von Edward Lorenz, dass der Flügelschlag eines Schmetterlings am Amazonas den nächsten Hurrikan über dem Pazifik auslösen kann. Oft liegt der Teufel im Detail. Vom Ursprung bis zum Endresultat werden viele Größenordnun-

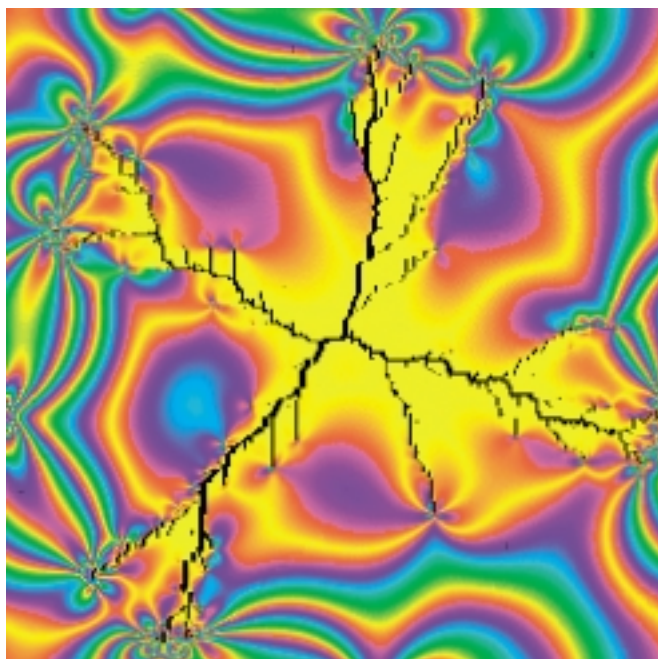


Ein Luft- und Raumfahrtingenieur arbeitet heute im Wesentlichen am Computer und entwirft den Prototyp im Detail, bevor er materiell realisiert wird.

gen in Längen- und Zeitskalen überspringen. Die Leitfähigkeit eines Faserverbundwerkstoffes beispielsweise wird bestimmt von der mikroskopischen Textur, deren Leitfähigkeit wiederum von der Elektronenstreuung im Kohlenstoff herrührt. Selbst bei optimistischer Prognose der Entwicklung der Leistungsfähigkeit von Computern und Programmen in den nächsten hundert Jahren ist es völlig unmöglich, alle mikro-, nano- oder pikoskopischen Details, welche sich auf der größten Skala noch lautstark bemerkbar machen, explizit mitzusimulieren. Hier stoßen wir trotz unseres Übermutes und trotz des generischen Optimismus' der Menschheit einfach an Grenzen. Doch zum Glück hat der Erfindungsgeist uns hier einen weiteren Trick beschert, der durch den Begriff „Mehrskalensimulation“ bekannt geworden ist. Der zu modellierende Vorgang wird dabei aufgeteilt in mehrere Etappen, die sich auf verschiedenen räumlichen und zeitlichen Skalen abspielen. Zu jeder Etappe wird ein der Auflösung ihrer Skala angemessenes Modell hergeleitet – das Wesentliche dieser Betrachtungsebene wird sozusagen herausgepickt. Die Eingangsdaten für die Simulation auf dieser Skala entstammen Simulationen auf der feineren Skala, der Output wird nach oben weitergereicht. Man geht gewissermaßen die Treppe hoch, stufenweise von Skala zu Skala. Was sich so einleuchtend anhört, ist aber alles andere als einfach und eines der aktivsten Forschungsfelder im Bereich der mathematischen Modellierung.

Nehmen wir das obige Beispiel des Faserverbundwerkstoffes. Erst simulieren wir in einem kubischen Nanometer und auf der Zeitskala von Pikosekunden die Bewegung von Elektronen und Molekülen innerhalb der Kohlenstofffaser. Diese mikroskopische Leitfähigkeit setzen wir nun als Parameter ein in eine zweite Simulation, nämlich die des Faserbündels. Hierbei kommen natürlich völlig andere Techniken zum Tragen, was nicht weiter erstaunt – schließlich sollen ja ganz andere physikalische Phänomene beschrieben werden. Jetzt geht es nämlich um die Materialeigenschaften eines Kubikmillimeters, und die Leitfähigkeit dieses kleinen repräsentativen Volumenelementes (RVE) ist eben nicht dieselbe wie die des reinen Kohlenstoffes. Hier spielen die Ränder der Fasern, die Faser-Faser-Wechselwirkung und die Matrix, in die das Ganze eingebettet ist, die entscheidende Rolle. Die effektive Leitfähigkeit des RVE setzt man schließlich in die des Werkteils ein – unsere dritte Skala.

Zweck der Simulation kann hierbei sein, die elektromagnetische Abstrahlung der Antenne zu berechnen. Und schon sind wir bereits auf der dritten Etappe in der Welt der Elektrotechnik unterwegs, mit wieder ganz anderen Gleichungen und Lösungsverfahren. In diesem Fall wurde die Simulation des Ganzen also in drei Mustersimulationen aufgeteilt, die auf ihrer jeweiligen Skala ein Volumen und einen Zeitraum betrachten, die einerseits hinreichend groß sind, um die uns interessierenden Phänomene dieser Skala erfassen zu können, andererseits aber klein genug sind, den resultierenden Berechnungsaufwand in Grenzen zu halten.



Aufbrechen des Bodens aufgrund einer punktförmigen Detonation: Die Farbenpracht entspricht dem, was man experimentell sehen würde, wenn man fotoelastisch die Spannungen visualisieren könnte.

Weit über dieses Beispiel hinaus dringt der beschriebene Mehrskalensatz in immer neue Gebiete vor. Von der Molekularbiologie zum Funktionieren der Zelle, von da zum Biomaterial und über die Simulation der Kontrolle der Vorgänge im Organismus schließlich bis zur Gesellschaftsform und Populationsdynamik – die Simulation von nahezu allem steht damit offen (hofft man zumindest).

Dass die findigen Hersteller von Computerspielen derartige Mehrskalentricks auch bereits entdeckt haben und heftig einsetzen, sei nur noch am Rande bemerkt. Denn nun wollen wir uns der Aufbereitung von Modellen für den rechnergestützten Einsatz zuwenden, der Numerik.

Die numerische Approximation komplexer nichtlinearer Modelle stellt oftmals eine herausfordernde Aufgabe dar. Viele praktisch relevante Probleme sind nur auf Hochleistungsrechnern lösbar. Dabei hängt die Effizienz der Simulationsalgorithmen entscheidend von der Verwendung geeigneter moderner numerischer Verfahren ab. Explodierte Trägerraketen, Verkehrschaos, falsche Umlaufbahnen von Satelliten und Marssonden, Sir Norman Fosters bedrohlich schwankende Millennium Bridge in London oder das Millionengrab der untergegangenen Bohrinselfleipner A in der Nordsee sind nur einige Beispiele von folgenschweren, aber vermeidbaren Fehlern in den Simulationsprogrammen. Manche beruhen auf

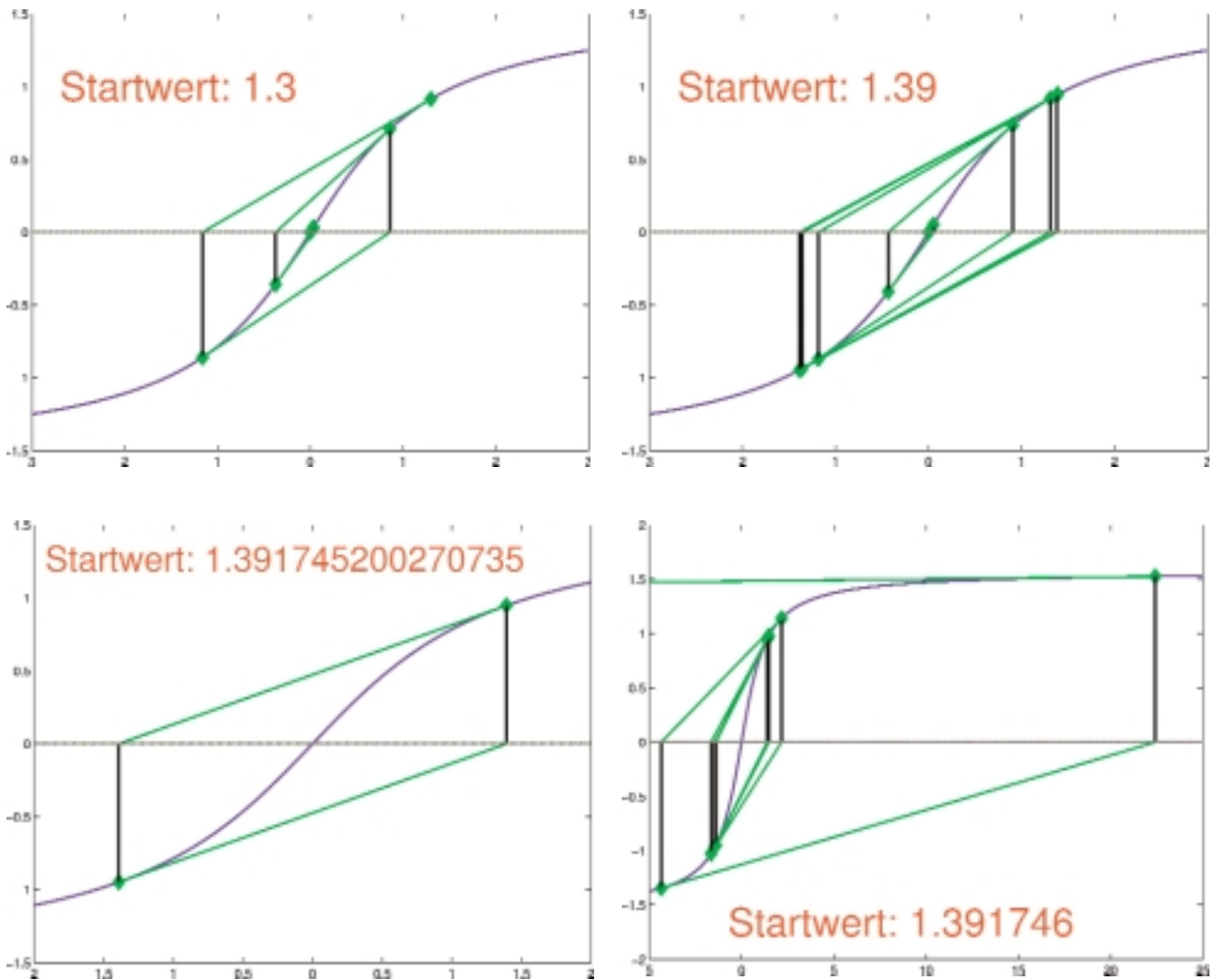
Kommunikationsproblemen, andere wiederum auf Rundungsfehlern oder unzureichenden numerischen Algorithmen und Fehlerkontrollmechanismen. Die Möglichkeiten heutiger Supercomputer und das große Interesse an der Lösung heterogener anwendungsrelevanter Problemstellungen haben zu verstärkten numerischen Forschungsaktivitäten geführt. Im Vordergrund steht dabei die Entwicklung neuer numerischer Methoden und Algorithmen, die Untersuchung ihrer mathematischen und numerischen Stabilitäts- und Konvergenzeigenschaften sowie ihre Implementierung, also Umsetzung in ein Programm. Der Traum vom omnipotenten numerischen Löser, der universell eingesetzt werden kann, ist nach wie vor

Wunschdenken und wird es angesichts des breiten Aufgabenspektrums wohl auch bleiben. Stattdessen sind problemspezifische Lösungsstrategien und abstrakte Konzepte gefragt.

Von Ingenieuren entwickelt, von Mathematikern analysiert und heutzutage in vielen kommerziellen Softwarepaketen zur Behandlung komplexer Modelle auf der Grundlage partieller Differentialgleichungen eingesetzt, sind Finite Elemente Methoden. Eine schier unendliche Vielfalt von unterschiedlichen Ansätzen steht hier dem Anwender zur Verfügung. Wer die Wahl hat, hat die Qual – und die getroffene erweist sich leider nicht immer als geeignet. Ob die Poisson-Zahl eines Materials $\nu = 0.3$ oder $\nu = 0.499$ ist, kann ganz fatale Auswirkungen auf die erhaltene Genauigkeit haben, falls ungeeignete diskrete Ansätze verwendet werden. Selbst wenn diese Hürde erfolgreich genommen und das unendlich dimensionale physikalische Modell auf ein endlich dimensionales und damit im Computer darstellbares Modell reduziert ist, steht immer noch die Frage nach dem Lösungsweg im Raum. Diskretisieren, Assemblieren, Linearisieren, Lösen und Kontrollieren sind die Schlagworte, die den Weg vom physikalischen Modell zum Simulationsergebnis auf dem Bildschirm beschreiben.

Aber was man mit einem Wort angeben kann, ist nicht immer einfach. Nichtlineare gekoppelte Gleichungssysteme mit mehreren Millionen Unbekannten sind keine Ausnahme. Anders formuliert: Eine realistische Simulation eines komplexen physikalischen Vorganges erfordert hohen und manchmal zu hohen Rechen- und Speicheraufwand. Nichtlineare physikalische Prozesse etwa können nicht direkt angegangen werden, sondern werden auf eine Reihe von linearen und damit einfacheren Prozessen zurückgeführt – man spricht dann von einer Linearisierung. Der bekannteste dieser Ansätze ist das Newton-Verfahren. Doch auch da steckt der Teufel im Detail: Bereits im einfachsten Fall einer einzigen skalaren nichtlinearen Gleichung können Fixpunktsätze nicht immer zufriedenstellende Aussagen über Konvergenzbereich und -rate liefern.

Aber selbst wenn das nichtlineare Problem erfolgreich linearisiert ist, treiben klassische und weit verbreitete direkte Lösungsverfahren wie der Gauß-Algorithmus auch schnellste Rechner in die Ver-



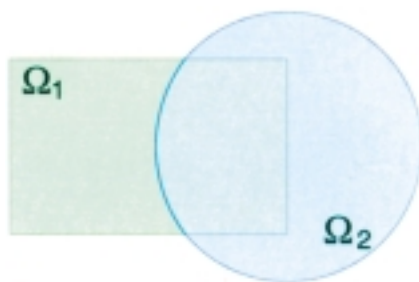
Schnelle und langsame Konvergenz und Divergenz beim Newton-Verfahren.

zweiflung. Bei einer naiven Umsetzung wächst hier der Aufwand kubisch mit der Anzahl der Unbekannten an – was das bei 10^6 Unbekannten heißt, kann man sich unschwer vorstellen! Von Gauß selbst stammt ein alternatives iteratives Verfahren, über das er 1823 in einem Brief an Gerling schreibt: „Ich empfehle Ihnen diesen Modus zur Nachahmung. Schwerlich werden Sie je wieder direct eliminieren, wenigstens nicht, wenn Sie mehr als 2 Unbekannte haben. Das indirecte Verfahren lässt sich halb im Schlafe ausführen, oder aber man kann während desselben an andere Dinge denken.“ Aus heutiger Sicht liefert das so gepriesene iterative Gauß-Seidel-Verfahren freilich in vielen Fällen alles andere als Grund zum Jubeln. Bestimmte Eigenschaften der Matrizen sind dafür verantwortlich, dass die Klassiker unter den Iterationsverfahren wie das Jacobi-, das Gauß-Seidel- oder das SOR-Verfahren unerträglich langsam konvergieren und somit brauchbare Er-

gebnisse in akzeptablen Rechenzeiten verhindern.

Von einem heute konkurrenzfähigen Iterationsverfahren wird deshalb – neben Robustheit und Zuverlässigkeit – vor allem Effizienz gefordert: Sein Aufwand soll möglichst nur linear in der Anzahl der Unbekannten wachsen. Das heißt: Bei doppelter Problemgröße soll sich die Rechenzeit auch nur verdoppeln, und nicht, wie oben beim Gauß-Algorithmus, verachtfachen! Dass dies kein utopisches Wunschdenken ist, zeigen beispielsweise Mehrgitterverfahren, Multilevel-Vorkonditionierer, Schurkomplement-Methoden oder Teilstrukturverfahren. Sie alle basieren auf dem alten Prinzip des „divide et impera“ (teile und herrsche), auf das wir später noch detailliert eingehen werden, und sie werden häufig unter dem Oberbegriff „Gebietszerlegungstechniken“ zusammengefasst. Für die Mathematik ist dies in einem Existenzbeweis aus der Funk-

tionentheorie von Hermann Amandus Schwarz aus dem Jahr 1870 erfolgreich beherzigt worden, dann fast hundert Jahre wieder in Vergessenheit geraten, um schließlich für die Numerik wiederentdeckt zu werden.

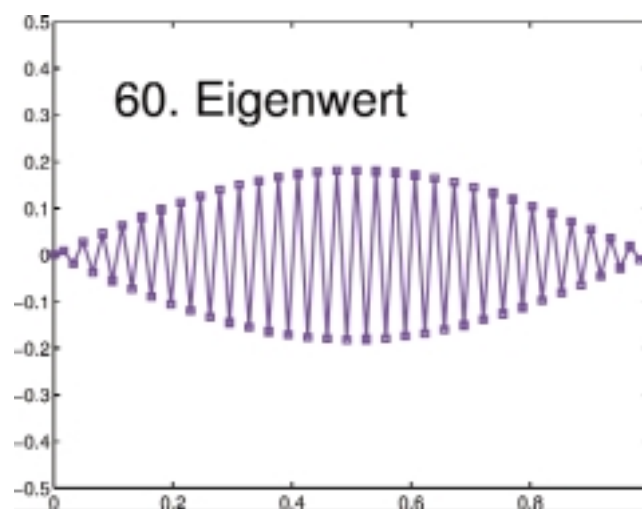
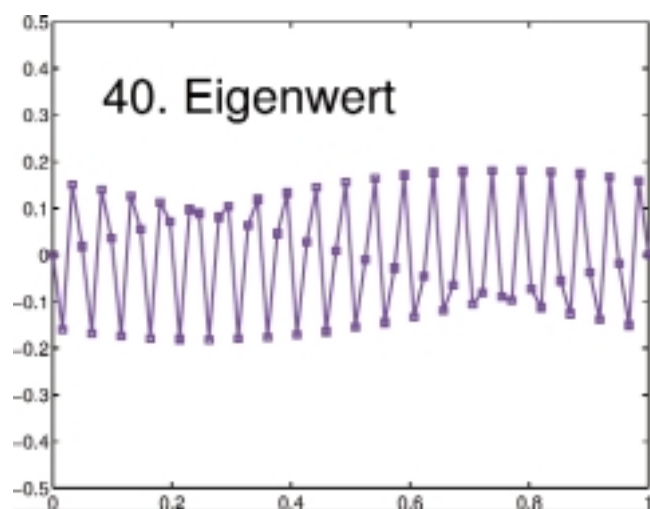
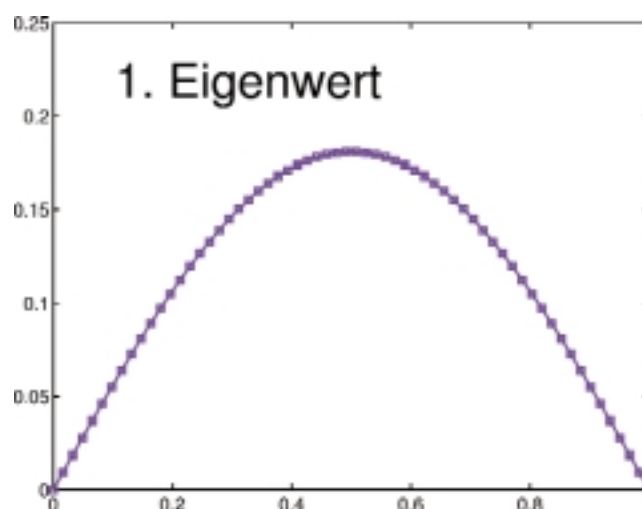
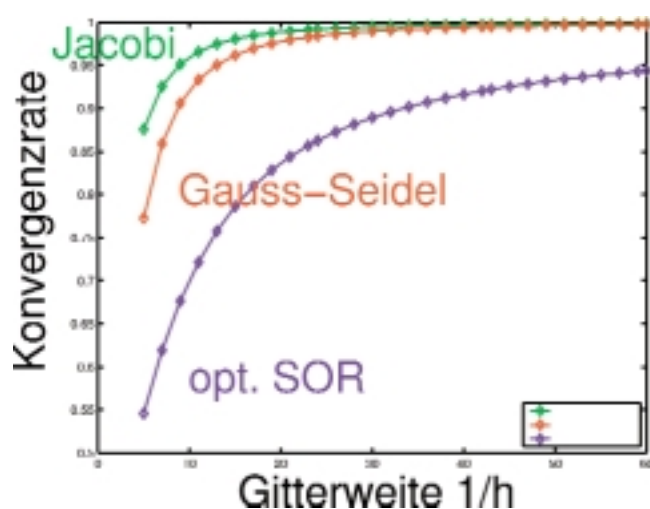


Hermann Amandus Schwarz und seine weitreichende Idee.

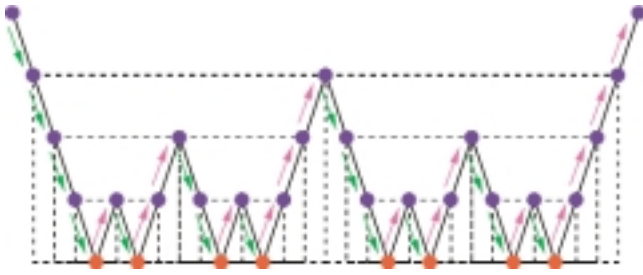
Heute können die meisten iterativen Lösungsverfahren im Rahmen der abstrakten Schwarz-Theorie analysiert werden. Ganz typisch für die Mathematik führt der hohe Abstraktionsgrad ihrer Strukturen zu erheblicher Arbeitserleichterung: Eine einmal ausgearbeitete Theorie kann zur Analyse vieler verschiedener iterativer Lösungsverfahren verwendet werden. Dabei ist die Grundidee denkbar einfach: Ein großes komplexes Problem wird in Teilprobleme geringerer Komplexität oder Größe zerlegt. Von zentraler Bedeutung ist dabei der Informationsaustausch zwischen den einzelnen Teilproblemen. Bei geometrischen Mehrgitterverfahren wird dazu eine Hierarchie von geschachtelten Gittern und Räumen ver-

wendet. Zwischen diesen Räumen wird die Information über geeignete Transferoperatoren weitergereicht. Auf den einzelnen Teilräumen werden die ursprünglichen komplexen Probleme nur approxi-

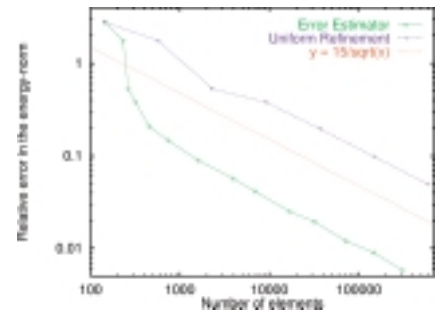
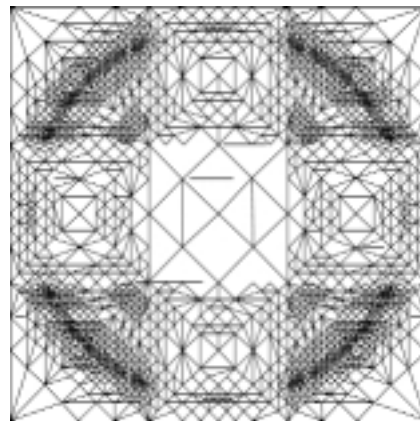
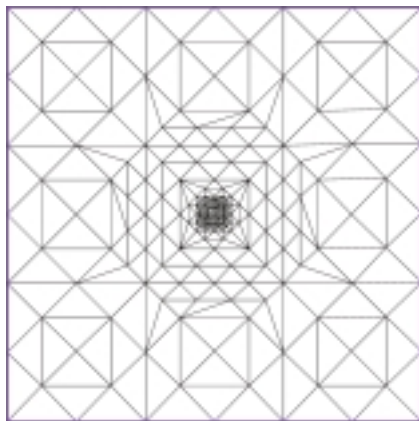
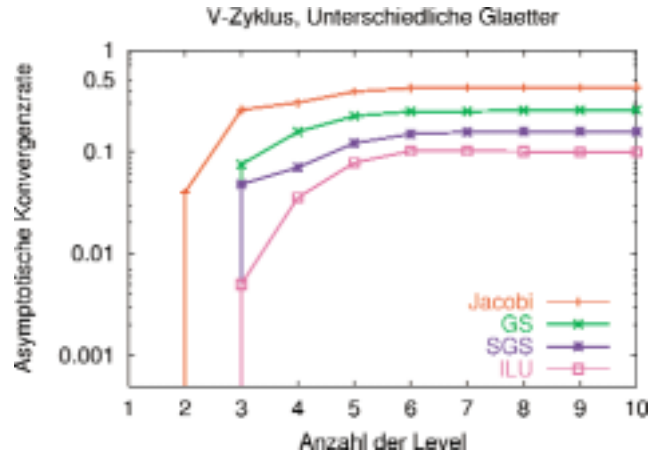
mativ durch mehr oder weniger einfache und billige Glättungsschritte gelöst, und nur auf dem kleinsten Raum wagt man sich direkt an das (jetzt allerdings zahmere, da kleinere) Ausgangsproblem.



Konvergenzraten und typische 1D Eigenvektoren einer schwingenden Saite.



Struktur eines Mehrgitter-W-Zyklus und Konvergenzraten eines V-Zyklus mit einem Glättungsschritt (die Namensgebung leitet sich von der Besuchsreihenfolge der unterschiedlich feinen Gitter ab).



Adaptive Gitter und Genauigkeiten im Vergleich.

Die Idee des Zerkleinerns und Zerlegens findet sich aber nicht nur bei der Numerik. Wer sich durch Mehrgitterverfahren an die im vorigen Abschnitt vorgestellten Mehrskalmodelle erinnert fühlt, liegt goldrichtig. Und es wird nicht der letzte Auftritt dieses algorithmischen Prinzips bleiben! Es greift eben alles ineinander, und nur eine enge Verzahnung kann erfolgreiche Simulationsergebnisse gewährleisten.

Hat man das diskrete Problem nach vielen Mühen nun endlich gelöst, so steht man vor der entscheidenden Frage, ob die berechnete Lösung überhaupt richtig beziehungsweise hinreichend genau ist. Man darf nicht vergessen, dass die erhaltene Lösung immer nur eine Approximation der eigentlichen Lösung des physikalischen Problems darstellt und dass man zunächst nichts oder nur wenig über ihre Güte weiß. Die drastischen Auswirkungen von unterschätzten Scherkräften oder vernachlässigten Eigenschwingungen machen regelmäßig negative Schlagzeilen. Und ungenaue numerische Simulationsergebnisse können fatale Folgen

haben. Eine mögliche Ursache hierfür kann die Überbewertung der Genauigkeit sein.

A priori können zwar häufig qualitative Aussagen zur Größenordnung des Fehlers gemacht werden, die aber in einer konkreten Situation nur selten hilfreich sind. Und was heißt schon „asymptotisch von der Ordnung eins oder zwei“? Wie groß ist denn nun der Fehler, und kommt es nun zum Materialversagen oder nicht? Es werden vielmehr a posteriori – ausgehend von der berechneten Lösung – Kontrollmechanismen benötigt. Auch hier kann der Mathematiker alleine oftmals keine Garantie bieten. Die zentrale Frage, welche die relevanten Größen sind, kann meist nur gemeinsam mit dem Anwender beantwortet werden. Zielgerichtete Fehlerschätzer oder -indikatoren können dann lokale Kontrollfunktionen übernehmen. Je nach Modell erhält man adaptive Schrittweiten- oder Ordnungssteuerungen oder aber lokal besser aufgelöste Gitter: Das endliche Modell im Rechner wird mit diesen Techniken so gut wie möglich an den zu simulierenden Pro-

zess angepasst. Der entscheidende Trick dabei ist, diese Anpassung auf jene Stellen zu beschränken, an denen der zu simulierende Prozess besonders schnell oder intensiv abläuft.

Probleme, die vorher aus Zeit-, Speicher- oder Stabilitätsgründen nicht berechenbar waren, sind nun handhabbar. Aber auch hier ist Übermut fehl am Platze, und es gilt wieder: Jeder noch so ausgefeilte Kontrollmechanismus kann versagen, und je mehr Erfahrung man einbringen kann, desto effizienter können numerische Methoden eingesetzt werden.

Neben Begriffen wie Spezifikation, modularer Programmaufbau, Objektorientierung, dynamische Datenstrukturen, hierarchische Modelle und Rekursion – aus der Informatik-Ausbildung sowie -Forschung aus gutem Grund heute nicht mehr wegzudenken, in den meisten derzeitigen Simulationsprogrammen jedoch trotz eklatanter konzeptueller Vorteile

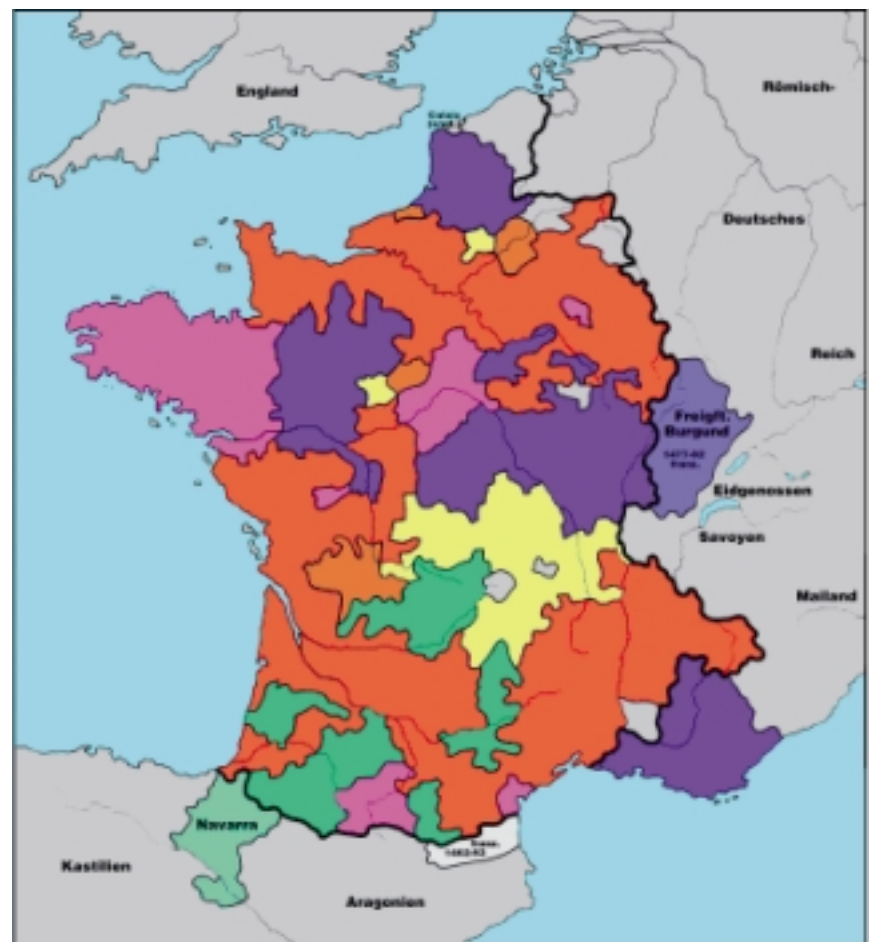
durch Abwesenheit glänzend – ist hier beispielsweise das „divide-et-impera“-Paradigma zu erwähnen. Auf dieses Entwurfsprinzip (je nach persönlicher Vorliebe wahlweise auch „teile und herrsche“ oder „divide and conquer“ genannt) waren wir ja schon im Abschnitt über die Numerik gestoßen. Wer aufgrund des etwas martialischen Wortes dessen Ur-

Implementierung

Der ohne Zweifel bedeutsamste Aufgabenkomplex, dem sich die Informatik im Zusammenhang mit Simulationsproblemen zu stellen hat, ist der Bereich der Implementierung, worunter hier alle Aktivitäten auf dem Weg vom numerischen Verfahren zum rechnergestützt erzeugten Lösungsdatensatz subsumiert werden sollen. Zu Unrecht wird diese weite Thematik oft auf die Bereitstellung moderner Höchstleistungsrechner reduziert. In der Tat ist die eingangs skizzierte Entwicklung der Leistungsfähigkeit im Computerbereich mehr als beachtlich. Heute sind selbst die Rechner am Arbeitsplatz des Wissenschaftlers so leistungsstark, dass auf ihnen neben der Programmentwicklung auch einfachere Simulationen in angemessener Zeit durchgeführt werden können. Aufwändigere und realitätsnähere Fälle bleiben aber den „Number Crunchern“, den Zahlenfressern vorbehalten, die den gewöhnlichen Arbeitsplatzrechnern in den vergangenen Jahren in puncto Rechengeschwindigkeit stets um ungefähr drei Größenordnungen voraus waren. Ende 1996 war am Sandia National Laboratory in New Mexico die langjährige Schallmauer von 1 TFlops (das sind 10^{12} Grundrechenoperationen mit etwa zehnstelligen Dezimalzahlen als Operanden in der Sekunde) durchbrochen worden – noch Mitte der siebziger Jahre als Rechenleistung eines Computers unvorstellbar, und heute schon wieder Schnee von vorgestern! Von der menschlichen Rechenkunst reden wir hier lieber nicht – oder probieren Sie doch mal, wie viele „Flops“ à la $21.34694782 \times 0.778907732$ Sie denn so schaffen

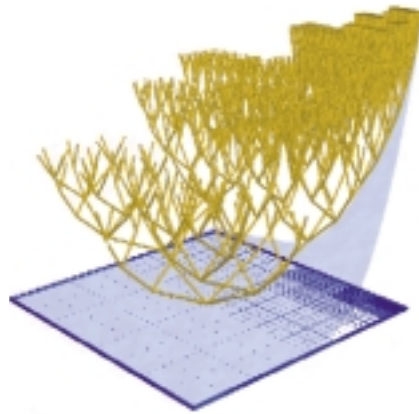
Doch bei aller Bedeutung der Rechnerentwicklung – die Rolle als bloßer Lieferant von Gerät für Simulationsaufgaben wird der Informatik nicht gerecht. Es sind auch in hohem Maße die Entwurfs- und Programmierkonzepte, die die Effizienz von Simulationsprogrammen bestimmen.

Stets in Sachen „divide et impera“ unterwegs, um seinen gefährdeten und zerstückelten Machtbereich zu erhalten: Ludwig XI. von Frankreich bei Verhandlungen mit Johann II. von Navarra in Bordeaux (rechts).



- | | |
|--|--|
| ■ Unmittelbare Gebiete der Krone Frankreichs unter Karl VII., 1461 | ■ Vasallen der Krone um 1500: Besitzungen der Häuser Albrert, Armagnac und Foix |
| ■ Einzug von Lehen der Krone unter Ludwig XI., 1461-1483 | ■ Besitzungen des Hauses Bourbon um 1500 |
| ■ Einzug von Lehen der Krone unter Karl VIII. und Ludwig XII., 1483-1515 | ■ Besitzungen des Hauses Orleans um 1500 |

sprung außerhalb der Wissenschaft vermutet, liegt so falsch nicht. Ludwig XI. von Frankreich wird der Ausspruch zugeschrieben (natürlich in der französischen Version „diviser pour régner“), war er doch den Großteil seiner 22-jährigen Regentschaft zwischen 1461 und 1483 damit beschäftigt, von seinem Erzrivalen Karl dem Kühnen, dem letzten der mächtigen Herzöge Burgunds, gegen Frankreich geschmiedete Allianzen zu zerschlagen, um sich selbst an der Macht und sein sich erst langsam von den Folgen des Hundertjährigen Krieges erholendes Land am Leben zu erhalten. Später gebrauchten Historiker den Begriff dann zur Charakterisierung des Umgangs der alten Römer mit den von ihnen „befriedeten“ Völkern. Die Vorgehensweise hatte Rom durchaus schon nachdrücklich am eigenen Leib erfahren: Hannibal hielt sich bei Cannae an „divide“ und fügte den Römern eine ihrer schmerzlichsten Niederlagen zu.



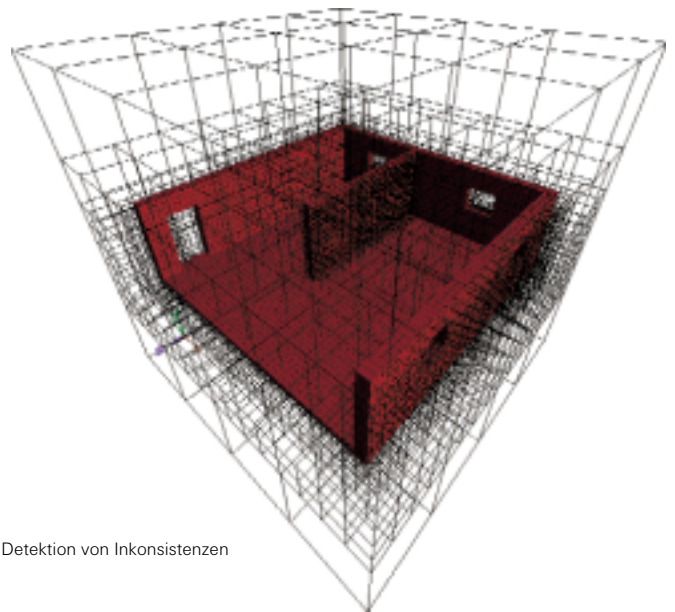
Auf den Spuren von Archimedes und Cavalieri: Rekursive, hierarchische und adaptive numerische Quadratur auf dünnen Gittern, einer optimierten Anordnung von Gitterpunkten für numerische Aufgaben.

Informatik ist dieses Prinzip aber überaus erfolgreich und allgegenwärtig – in Sortieralgorithmen ebenso wie beim Ray-Tracing in der Computergraphik sowie allgemein bei rekursiven raumpartitionierenden Datenstrukturen wie etwa Oktalbäumen, um nur wenige Beispiele zu nennen. Letztere ermöglichen beispielsweise die einfache und ökonomische Repräsentation auch komplizierterer dreidimensionaler Objekte sowie die einfache Realisierung von Mengenoperationen, die für das Erkennen von Inkonsistenzen bei Konstruktion und Entwurf von technischen Objekten sowie Gebäuden wichtig sind.

Im wissenschaftlichen Rechnen sind divide-et-impera-Ansätze ebenfalls von zentraler Bedeutung. Schließlich basiert letztendlich die gesamte Parallelverarbeitung auf dem Prinzip, ein großes gegebenes Problem in kleinere und (zumindest temporär) unabhängig bearbeitbare Hapten zu zerlegen. Damit ermöglichen sie



Noch mehr „divide et impera“: Die raumpartitionierende Oktalbaumstruktur, eingesetzt zur Detektion von Inkonsistenzen in digitalen Architekturmodellen.

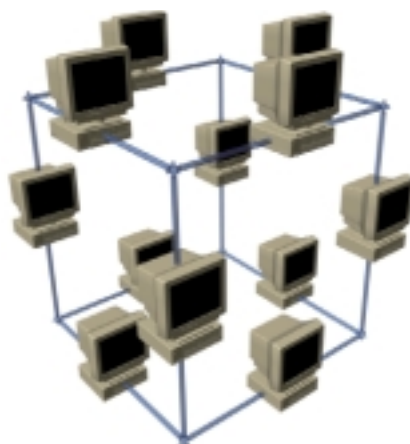


Aber zurück zur Algorithmik. Ludwig XI. hat wohl nicht daran gedacht, dass auch seine oftmals zerstrittenen Gegner oder seine ihm nachgeordneten Fürsten ihrerseits dieselbe Strategie verfolgen könnten, um ihren Einflussbereich zu erhalten. Genau dies wäre bereits eine rekursive Anwendung des divide-et-impera-Prinzips. Archimedes dagegen ging so vor, als er bei der Approximation der Fläche unter einer Parabel durch eine Folge immer kleinerer Dreiecke die jeweils verbleibende (wiederum parabolisch berandete) Restfläche immer wieder neu nach demselben Prinzip „ausschöpfte“. Die Grund-

idee der Rekursion ist einfach: Man zerlege ein gegebenes Problem in kleinere (und somit im Allgemeinen leichter zu bearbeitende) Teilprobleme gleichen Typs, um dann aus den Lösungen der Teilprobleme die Gesamtlösung zu erhalten. Keine große Geistesleistung, mag manch einer denken, und sicher keine Erfindung von Mathematik oder Informatik (die Usurpation von Geistesgrößen und sonstigen Berühmtheiten durch wissenschaftliche Disziplinen hat zwar durchaus Tradition, aber Archimedes oder Ludwig XI. als Ur-Algorithmiker, das wäre dann vielleicht doch des Guten zuviel). In der modernen

eine nahezu optimale Ausnutzung der Leistungsfähigkeit moderner Parallelrechner, erfordern aber gleichzeitig ausgefeilte Programmierkonzepte. Wie bringt man etwa die rekursive divide-et-impera-Strategie auf einen als Hyperwürfel strukturierten Parallelrechner? Die effiziente Lösung solcher und verwandter Fragestellungen ist alles andere als trivial. Auch

und gerade bei numerischen Algorithmen treffen wir das *divide-et-impera*-Prinzip – die im Abschnitt zur Numerik diskutierte Technik der Gebietszerlegung ist geradezu ein Musterbeispiel. Nach ihrer Vorstellung in einen tiefen Dornröschenschlaf versunken und erst vom Parallelrechnerprinzen wachgeküsst, ist die Gebietszerlegung heute der wohl verbreitetste Parallelisierungsansatz bei partiellen Differentialgleichungen. Die Liste der *divide-et-impera*-Sprösslinge ließe sich nahezu beliebig fortsetzen, ein abschließendes Beispiel soll aber genügen. Die Simulation so genannter gekoppelter Probleme, bei denen unterschiedliche physikalische Effekte miteinander in Wechselwirkung treten, wird immer wichtiger. Mit den zunehmenden Genauigkeitsanforderungen darf man eben Einflüsse, die in früheren Modellen aus Rechenzeitgründen nicht berücksichtigt werden konnten oder in den berühmten konstanten Term, über den so ziemlich jede Differentialgleichung verfügt, gesteckt wurden, nicht mehr ohne weiteres vernachlässigen. Als Beispiel für solche Kopplungen seien Fluid-Struktur-Wechselwirkungen an Staumauern oder Zeltdachkonstruktionen genannt. Was liegt näher, als zwei für die beiden Teilaufgaben Strömungsmechanik und Strukturmechanik verfügbare Simulationsprogramme zu einer Simulation des Gesamtsystems zusammenzuführen?



Vernetzung von Rechnern, hier am Beispiel eines so genannten „Dual Hypercube“ – ein Weg zum Supercomputer und ein wichtiger Beitrag der Informatik.

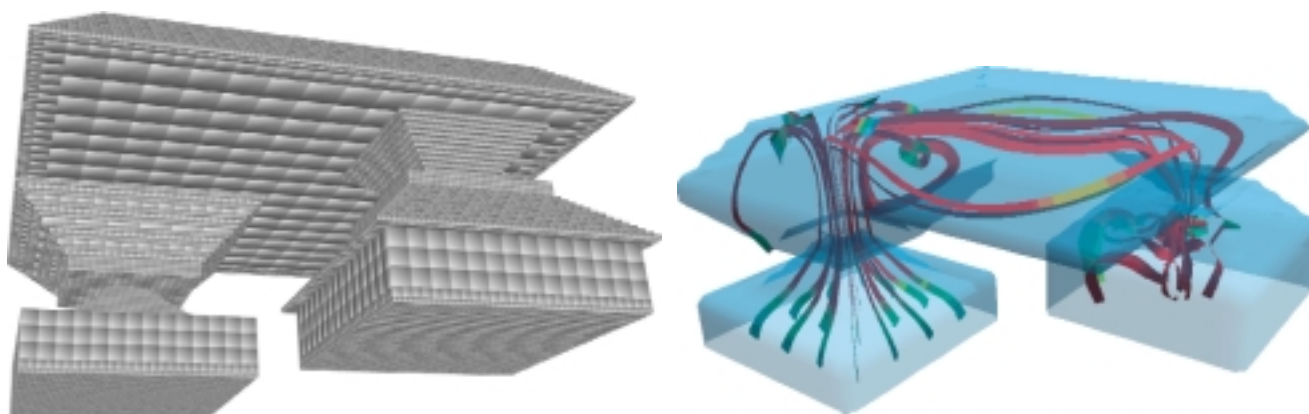
Visualisierung

Ausgestattet mit schier endlosen Zahlenkolonnen, die unser Simulationsprogramm einem sprudelnden Quell gleich produziert, wenden wir uns der graphischen Aufbereitung der Resultate zu. Die Visualisierung stützt sich maßgeblich auf die Errungenschaften der Computergraphik und – in jüngerer Zeit auch – auf Techniken und Konzepte aus den Bereichen Multimedia und Virtual Reality. Getragen von der atemberaubenden Leistungssteigerung im Bereich von Computer-Hardware allgemein und insbesondere Graphik-Hardware in den letzten Jahrzehnten (Lara Croft und Konsorten sei Dank) sowie von der Entwicklung immer raffinierterer Algorithmen, hat die realistische Darstellung komplexer Szenen längst auf dem PC Einzug gehalten. Damit rücken aus der Sicht der numeri-

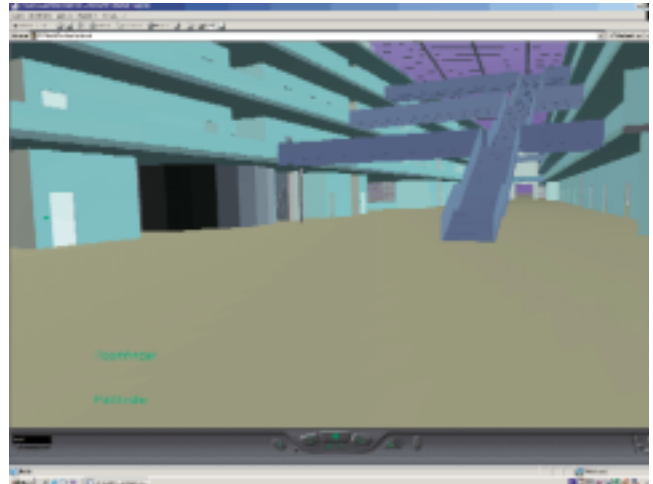
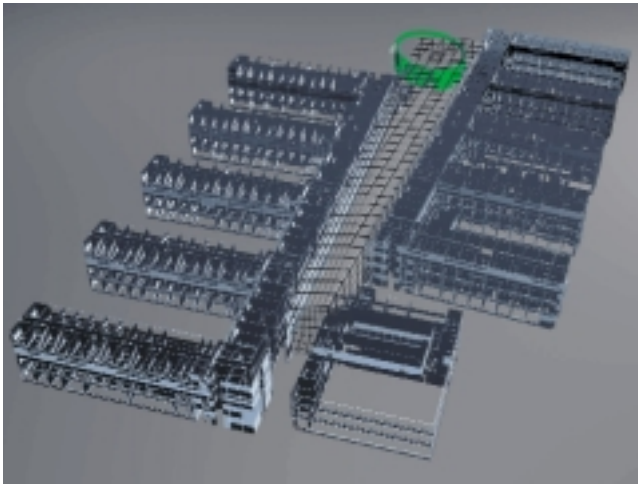
schen Simulation auf einmal ganz neue Problemstellungen in das Zentrum des Interesses. Die Frage ist nicht mehr, ob dreidimensionale Datensätze in hoher Auflösung graphisch aufbereitet, dargestellt und zum Aufzeigen dynamischer Effekte auch animiert werden können, sondern vielmehr, wie vorzugehen ist, damit der Betrachter nicht vor lauter Bäumen den Wald nicht mehr sieht. Die Pfeildarstellungen in der Strömungssimulation etwa, bei denen in jedem Gitterpunkt ein Pfeil Größe und Richtung der lokalen Geschwindigkeit anzeigt, sind in zwei Raumdimensionen äußerst aussagekräftig, im Dreidimensionalen jedoch völlig unbrauchbar. An dieser Stelle hat die Visualisierung begonnen, sich zum eigenständigen Forschungsgebiet zu entwickeln. Trotz oder vielleicht gerade wegen der Faszination bunter Bilder und Bildfolgen ist hier jedoch eine gewisse gesunde Distanz sicher nicht unangebracht. Schließlich lassen sich auch aus völlig falschen Ergebnissen oder unsinnigen Daten eindrucksvolle Bilder und Videofilme erstellen!

Einbettung

Der in obiger Zusammenstellung Einbettung genannte sechste Schritt berührt die Themenkreise Kompatibilität, Schnittstellendefinition und Standards. Auch wenn viele leidgeprüfte Rechnerbenutzer hierin womöglich eher einen informatischen Albtraum als ein Feld der Ehre für die Informatik sehen, so ist doch vor allem der Informatiker gefordert, wenn es darum geht, Datenformate zu vereinheitlichen, überflüssige Netzgenerierungs-



Weg mit Zukunft: Oktaalbaummodell einer ventilsteuerten Mikropumpe als Schnittstelle zwischen CAD und Simulation (links) und Visualisierung der Simulation der Durchströmung (rechts).



Auch eine simulierte Welt: Virtual und Augmented Reality auf der Basis detailgetreuer Geometriemodelle ermöglichen virtuelle Flüge durch Gebäude lange vor deren Fertigstellung (hier: Modell des Informatik-Neubaus der TU München in Garching – der Aufzug kommt per Knopfdruck!).

schritte zu vermeiden oder verschiedene Simulationsprogramme sowie andere Softwaremodule austauschbar zu machen beziehungsweise miteinander zu koppeln und so die numerische Simulation an andere Aufgabenstellungen anzubinden.

Trends und Perspektiven

Nach der Bestandsaufnahme stellt sich nun natürlich die Frage, wie der Interdisziplinarität in der numerischen Simulation sowie dieser Methodik insgesamt zu mehr Schwung verholfen werden kann. Etliche Schritte in die richtige Richtung wurden und werden mancherorts schon getan. Was Baden-Württemberg allgemein und Stuttgart im Besonderen angeht, so seien beispielhaft der Forschungsverbund Wissenschaftliches Rechnen in Baden-Württemberg (WiR-Ba-Wü), der Bundeshöchstleistungsrechner HLRS, verschiedene einschlägige Sonderforschungsbereiche und andere Forschungsaktivitäten oder die kürzlich an unserer Universität eingerichtete überfakultäre Arbeitsgemeinschaft Wissenschaftliches Rechnen genannt. Von allen gehen natürlich entscheidende Impulse aus. Südschienen-Fans sei versichert, dass sich unter weiß-blauem Himmel ebenfalls einiges regt – die entsprechenden Akronyme für Insider sind hier FORT-WIHR, KONWIHR und HLRB. Auch in der Lehre sind die Dinge in Bewegung geraten. In den letzten Jahren sprossen Studiengänge wie Computational Engineering, Computational Physics, Computational Mechanics oder Computational Science

and Engineering förmlich aus dem Boden; auch da ist Stuttgart vorne mit dabei.

Auch an anderen Fronten sind allmählich erste Erfolge zu verzeichnen. Was den Ausbildungsbereich angeht, so ist etwa ein Fachwechsel (beispielsweise von der Mathematik in eine Ingenieurdisziplin oder umgekehrt) zwischen Diplom und Promotion für die jeweiligen Doktoranden an deutschen Hochschulen traditionsgemäß leider oft mit zum Teil erheblichen Schwierigkeiten verbunden. Manche Empfängerfakultät vermutet darin einen Frontalangriff auf das (natürlich um Klassen höhere) Niveau des eigenen Dokortitels und baut kunstvoll Hürden in Form von Zusatzprüfungen auf. Hier werden jedoch die Grenzen langsam erfreulicherweise durchlässiger. Was die Forschung betrifft, so sind auch viele der klassischen Geldgeber in unserer Wissenschaftslandschaft samt den entsprechenden Begutachtungsgremien in starkem Maße etablierten Organisations- und Denkstrukturen verhaftet. Immer noch gibt es nur wenige zwischen den traditionellen Fachbereichen angesiedelte „Töpfe“ oder Referate – ein Vorhaben wird eben aus dem Mathematik-, Informatik- oder Sonstwas-Topf finanziert. Dadurch nimmt die Begeisterung für eine ansonsten durchaus angestrebte Zuständigkeit angesichts des dann auch daraus resultierenden Finanzierungsbedarfs gerade in Zeiten zunehmend knapper Fördermittel oftmals spürbar ab. Doch auch hier gibt es deutliche positive Anzeichen, wie beispielsweise erfolgreiche interdisziplinäre Sonderforschungsbereiche zeigen – auch an der Universität Stuttgart.

Schließlich wurde vor drei Jahren (also gewissermaßen bereits im letzten Jahrtausend) an unserer Hochschule die Einrichtung eines fakultätsübergreifenden Zentrums für Simulationstechnik (ZST) beschlossen – ein wichtiger strategischer Schritt in exakt die richtige Richtung. Denn nur durch eine konsequente Bündelung der Anstrengungen auf Gebieten wie etwa der Erstellung numerischer Software kann die diesbezüglich nicht befriedigende Situation in Deutschland längerfristig verbessert werden. Die Simulationshardware hat sich wohl schon endgültig verabschiedet, der Rückzug auch aus der Simulationssoftware würde uns zu reinen Anwendern eingekaufter Produkte ohne eigene Entwicklungskompetenz werden lassen. Deshalb ist es höchst erfreulich, dass die Universität Stuttgart Modellbildung und Simulation an prominenter Stelle auf ihre Fahnen geschrieben und das Thema ZST zur Chefsache erklärt hat. Mit Zuversicht blicken wir somit dem offiziellen Startschuss für das ZST entgegen.

„Ich schreibe lieber eine Seite als zwei, und am liebsten schreibe ich gar nichts“, sprach einst ein weiser Gelehrter. Geradezu erschreckend viele Seiten sind es bei uns geworden, weshalb wir es jetzt gut sein lassen. In diesem Sinne: simulemus – lasst uns simulieren!



**Prof. Dr.
Hans-Joachim Bungartz**

studierte von 1982 bis 1989 an der Technischen Universität München Mathematik, Informatik und Wirtschaftswissenschaften. Den Diplomen in Mathematik (1988) und Informatik (1989) folgte ein Promotionsstipendium der Siemens AG in München. Im Anschluss an die Promotion an der TU München 1992 war Bungartz wissenschaftlicher Assistent am Institut für Informatik der TUM und ab 1996 zusätzlich für die Geschäftsführung des Bayerischen Forschungsverbands für Technisch-Wissenschaftliches Hochleistungsrechnen FORTWIHR verantwortlich. 1994 wurde ihm der Bayerische Habilitations-Förderpreis verliehen, im Jahre 1998 habilitierte er sich an der TU München im Fach Informatik. Von Juli 2000 bis August 2001 wirkte Hans-Joachim Bungartz als Professor (C3) für Numerik und Wissenschaftliches Rechnen am Institut für Mathematik der Universität Augsburg, bevor er zum 1. September 2001 einem Ruf auf die C4-Proessur für Simulation großer Systeme in der damaligen Fakultät Informatik der Universität Stuttgart folgte. Seine Hauptarbeitsgebiete liegen in den Bereichen effiziente numerische Diskretisierungen und Algorithmen, Parallelverarbeitung sowie Anwendungen des Hochleistungsrechnens im Bereich der numerischen Strömungsmechanik.



**Prof. Dr. Hans-Jürgen
Herrmann**

Nach dem Studium der theoretischen Physik in Göttingen und Köln promovierte er 1981 am Institut für Theoretische Physik der Universität zu Köln in statistischer Physik. Nach einem Jahr Post Doc-Aufenthalt in Boston und in Athens, GA, USA, ging er 1982 ans Service de Physique Théorique in Saclay, Frankreich, wo er als Mitglied der CNRS acht Jahre lang forschte. Von 1990 bis 1994 war Hans-Jürgen Herrmann Leiter der Vielteilchengruppe am Höchstleistungsrechenzentrum (HLRZ) in der KFA Jülich. Anschließend ging er nach Paris zurück, wo er als Direktor eines im wesentlichen experimentellen Instituts an der Ecole Supérieure de Physique et Chimie Industrielle wirkte. Im Oktober 1995 übernahm Prof. Herrmann den Lehrstuhl „Modellierung naturwissenschaftlicher und technischer Grundprobleme – Physik mit Hochleistungsrechnern“ am Institut für Computer-Anwendungen 1 (ICA-1). Seine Hauptarbeitsgebiete liegen in den Bereichen granulare Medien, Mehrphasenfluss, poröse und ungeordnete Medien, statistische Physik, Phasenübergänge, Parallelrechner, Zellularautomaten, Visualisierung.



**Prof. Dr. Barbara Irmgard
Wohlmuth**

Von 1986 bis 1992 studierte Barbara Wohlmuth an der Technischen Universität München Mathematik mit Nebenfach Physik. Während des Studiums verbrachte sie ein Jahr an der Universität Joseph Fourier in Grenoble und legte die Prüfung zur Maitrise ab. In ihrer Promotion beschäftigte sie sich mit adaptiven Finite Elemente Methoden und war während dieser Zeit als wissenschaftliche Angestellte im Bayerischen Forschungsverbund für Technisch-Wissenschaftliches Hochleistungsrechnen tätig; die Promotion erfolgte 1995 ebenfalls an der TUM. Von 1995 bis 2001 war Barbara Wohlmuth als wissenschaftliche Assistentin an der Universität Augsburg angestellt, wo sie auch 2000 ihre Habilitation abschloss. Ein Habilitationsstipendium der DFG ermöglichte einen einjährigen Forschungsaufenthalt am Courant Institute of Mathematical Sciences der New York University. 2001 erfolgten Rufe auf Lehrstühle an der TU Darmstadt beziehungsweise der Universität Stuttgart. Zum 1. September 2001 nahm sie den Ruf auf den Lehrstuhl für numerische Mathematik für Höchstleistungsrechner an der Universität Stuttgart an. Ihr Hauptarbeitsgebiet liegt im Bereich der numerischen Simulation partieller Differentialgleichungen.