

MEHR WISSEN AUS DIGITALEN WELTEN



Arndt Bode, Gunther Brenner,
Franz Durst, Ulrich Rüde

Die Kombination von Hochleistungsrechnern und neuen Simulationstechniken wird viele Wissenschaftsbereiche revolutionieren. Computer können nicht nur zur Aufbereitung von realen Daten eingesetzt werden, sondern auch zur Simulation. Die Daten aus abstrakten Kunstwelten sind häufig nützlicher als reale (Mess-) Werte. So sind in manchen Fällen Simulationsergebnisse genauer als ihre messtechnisch erfassbaren Pendanten aus der Wirklichkeit. Außerdem können durch die Nachbildung im Computer Fragen untersucht werden, die mit Daten aus der Realität nur schwer zu beantworten sind: In virtuellen Welten können schadlos ganze Sterne explodieren und den Astrophysikern so wertvolle Informationen über Supernoven liefern.

Viele Entwicklungen in den Wissenschaften sind ohne Computersimulationen schon heute nicht mehr denkbar. Trotzdem steht die Disziplin noch ganz am Anfang. Ihre Auswirkungen sind nur zu einem Bruchteil absehbar. Die rechnergestützte Modellierung und Simulation, also das Forschungsgebiet Computational Science and Engineering, wird die Grundlage für die Wissenschaft der Zukunft werden. Es entsteht eine völlig neue Methodik, die Realität zu beschreiben, zu verstehen und letztlich besser zu kontrollieren.

Mathematik ist Grundlage

Modelle in den Natur- oder Ingenieurwissenschaften werden meist mit mathematischen Gleichungen beschrieben. Bei vielen realen Systemen werden diese Gleichungen aber so kompliziert, dass sie nicht mehr

mathematisch exakt lösbar sind. Allerdings können Computer Näherungslösungen berechnen. Die Umsetzung der mathematischen Gleichungen in ausführbare Simulationsprogramme erfordert eine komplizierte und aufwändige Umformung und Aufbereitung, für die laufend neue Methoden in der Mathematik und Informatik entwickelt werden müssen. Der gigantische Rechenaufwand für diese Berechnungen erfordert speziell konstruierte Supercomputer.

Computersimulation als universelles Werkzeug

In den kommenden zehn Jahren werden die bisher schon erfolgreichen Anwendungen der Computersimulation, wie zum Beispiel in der Struktur- und Fluidodynamik oder der Meteorologie, weiter verfeinert und damit genauer und zuverlässiger

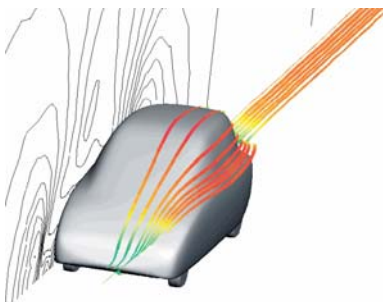
Das Bild zeigt die Hitachi SR8000-F1/168 im Rechenraum des Leibniz Rechenzentrums München. Die Gesamtlänge der Maschine beträgt zehn Meter, die maximale Breite acht Meter.



werden. Neue Anwendungen, zum Beispiel in den Wirtschafts- und Biowissenschaften oder der Medizin, werden erschlossen werden. Große Chancen, aber auch enorme Schwierigkeiten, stecken in der Modellierung von Multi-Physik-Phänomenen, in denen mehrere einfachere Simulationen zur Simulation eines größeren Gesamtsystems gekoppelt werden.

Interessant ist etwa die Berechnung von Strömungen mit komplexen Transportvorgängen. Beispiele hierfür sind der gekoppelte radiative und konvektive Wärmetransport in Strömungen oder komplexe chemische Reaktionen in Verbrennungs-, Synthese- oder Katalyseprozessen.

Solche Probleme treten unter anderem bei der Herstellung neuer Materialien auf. So werden in der Zukunft vielleicht Schäume aus Metall als extrem steife und leichte Werkstoffe eine große Rolle spielen,



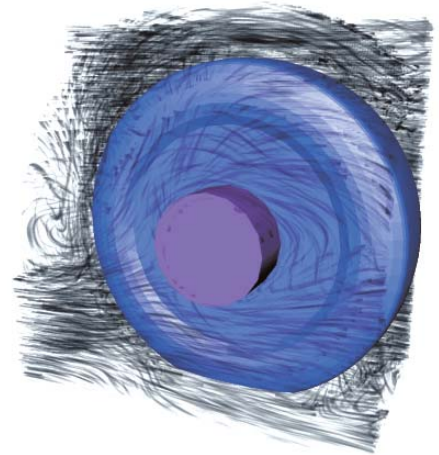
Visualisierung der Strömung um ein PKW-Modell im Windkanal.

wenn es gelingt, den Herstellungsprozess zu beherrschen. Die Simulation kann entscheidend dabei helfen, den Prozess zu verstehen und zu kontrollieren. Dazu müssen aber all die verschiedenen chemischen und physikalischen Prozesse im Computer korrekt modelliert werden, die beim Aufschäumen einer Metallschmelze eine Rolle spielen.

Gekoppelte Simulation

Das größte Potenzial verspricht die Erweiterung der heutigen Simulationswerkzeuge, so dass sie als Bausteine zur Lösung noch komplexerer Aufgaben eingesetzt werden können. Kann zum Beispiel eine Simulation die Flugeigenschaften eines Flugzeugs in Abhängigkeit von Designparametern wie der Flügelform ausreichend genau berechnen, so ist es prinzipiell möglich, mit dem Rechner auch die Flugzeugkonfiguration auf spezielle Kriterien hin zu optimieren – wie etwa minimalen Treibstoffverbrauch. In absehbarer Zeit werden Simulationen von Flugmanövern unter Berücksichtigung der Fluid-Struktur-Wechselwirkungen und der mechanischen Belastungen innerhalb der Struktur möglich sein. Auf diese Weise können riskante Flugversuche reduziert oder sogar überflüssig werden.

Bei bodengebundenen Fahrzeugen wie Autos und Zügen können gekoppelte Simulationen – neben der ständig präsenten Frage der Verbrauchsminimierung – auch auf Umwelt-, Komfort- und Sicherheitsfragen Antworten geben. So lässt sich zum Beispiel der Einfluss instationä-



Simulation einer turbulenten Luftströmung im Inneren eines Radkastens. Direkte Volumenvisualisierung mittels 3D Line Integral Convolution (LIC).

rer Windlasten auf die Fahrdynamik berechnen oder die strömungsinduzierte Schallemission. Diese Wechselwirkung zwischen Strömung und Akustik, wie sie zum Beispiel bei der Lärmentwicklung eines Kühlgebläses oder eines offenen Schiebedachs eine Rolle spielt, ist derzeit ein sehr interessantes Forschungsthema. Solche Probleme sehen oberflächlich betrachtet fast zu banal aus, um dahinter komplexeste Wissenschaft zu vermuten. Aber gerade bei solchen Aufgaben kann die numerische Simulation ihre Stärken ausspielen. Ist es gelungen, solch ein System mit ausreichender Genauigkeit zu simulieren, kann das Simulationsprogramm genutzt werden, um Hunderte von Varianten der Schiebedachform durchzuspielen und daraus diejenige zu finden, bei der die Lärmentwicklung am geringsten ist.



Simulationen sparen Entwicklungskosten

Bei einer Computersimulation reicht im Prinzip ein Knopfdruck, um Daten zu erhalten, die sonst ein teures und zeitaufwändiges Experiment erfordern würden. Dies verspricht eine enorme Kostenersparnis und eine drastische Beschleunigung der Entwicklungszeiten. Computersimulationen werden Ingenieure und Wissenschaftler nicht ersetzen, wohl aber deren Arbeitsweise radikal verändern und ihnen völlig neue Möglichkeiten eröffnen.

Selbst in der Medizin und Medizintechnik spielt die numerische Simulation eine gewichtige Rolle. Heute schon alltägliche Diagnoseverfahren, wie die Computertomographie, beruhen im Kern auf einer Simulation der Röntgenstrahlen im menschlichen Körper. Als neue Technik sei die Simulation bioelektrischer Felder erwähnt. Der Computer kann elektromagnetische Felder nachbilden, die im Körper ganz natürlich entstehen, wenn etwa elektrochemische Prozesse im Gehirn stattfinden. Diese Simulation hilft, die Ursache krankhafter Veränderungen zu identifizieren. So kann zum Beispiel ein epileptisches Zentrum im Gehirn lokalisiert und dem Arzt somit wertvolle Information für die Planung eines neurochirurgischen Eingriffs geliefert werden.

Nur zwei bis vier Superrechner in Deutschland

Technologische Voraussetzung für den Fortschritt in der Computersimulation sind die Steigerung der Re-

chenleistung und die Verfügbarkeit von Höchstleistungsrechnern für die Wissenschaften. Seit den 60er Jahren nimmt die Leistungsfähigkeit der Computer rasant zu. Etwa alle vier Jahre verzehnfachten sich Geschwindigkeit und Speicherkapazität. Dieser Trend hält bis heute an und wird sich auch in absehbarer Zeit fortsetzen.



Blick auf die Bucht von San Francisco, einer seismisch aktiven Region.

Die leistungsfähigsten Maschinen, heute beim Real World Computing Projekt in Japan und beim ASCI-Projekt in den USA, sind in fußballfeldgroßen Rechnerhallen untergebracht. Sie haben sehr hohe Anforderungen an Infrastruktur-Komponenten wie Leistungszuführung und Kühlung. Wegen der hohen Kosten für Gebäude, Anschaffung und Betrieb hat der Wissenschaftsrat für Deutschland 1995 und 2000 empfohlen, für die gesamte deutsche Forschung nur mehr zwei bis vier sol-

cher Maschinen zu betreiben. Sie sollen im Rhythmus von zwei bis drei Jahren erneuert werden. Eine dieser Maschinen läuft im Leibniz Rechenzentrum der Bayerischen Akademie der Wissenschaften.

Software für die Software

Abgesehen von den Investitionen ist auch die Nutzung dieser Computer eine Herausforderung. Um einen Rechner mit einem Speicher von über zehn Terabyte – was der Kapazität von 100.000 handelsüblichen PCs entspricht – und fünf- bis zehntausend Prozessoren sinnvoll zu nutzen, bedarf es einer zuverlässigen und leistungsfähigen Software-Umgebung, die speziell für diese Computer entwickelt werden muss. Für die Visualisierung von Simulationsergebnissen müssen gewaltige Datenmengen aufbereitet und graphisch dargestellt werden. Dies setzt voraus, dass Computer an verschiedenen Standorten über Datenleitungen vernetzt werden, deren Bandbreite die derzeitigen Standards um Größenordnungen übertrifft.

In acht bis zehn Jahren werden Rechner zur Verfügung stehen, die hinsichtlich Verarbeitungsgeschwindigkeit und Speicherkapazität mindestens um einen Faktor 100 leistungsfähiger als heutige Geräte sind. So unglaublich dies klingt, wird doch auch mit diesen Anlagen nicht genug Rechenleistung bereit stehen, um alle Simulationsprobleme zu lösen. Auch mit hundert mal schnelleren Rechnern wird die Berechnung der turbulenten Umströmung eines kompletten Jumbo-Jets noch außer

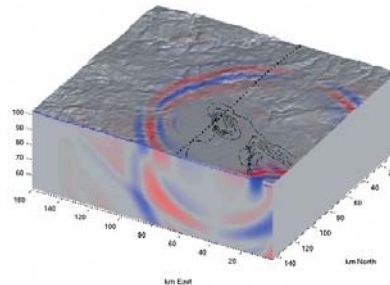
Prof. Dr. rer. nat. Dr.-Ing. habil. Arndt Bode

(geb. 1948) leitet den Lehrstuhl für Rechner-technik und Rechnerorganisation (LRR) an der Technischen Universität München. Außerdem ist Prof. Bode Vizepräsident der TU München und Sprecher des Kompetenznetzwerks für Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern KONWIHR. Seine Forschungsschwerpunkte sind: Technische Informatik, Rechnerarchitektur, parallele und verteilte Systeme, Programmierwerkzeuge, verteilte Anwendungen, Supercomputing.

Dr.-Ing. Gunther Brenner (geb. 1962) ist Wissenschaftler am Lehrstuhl für Strömungsmechanik der Universität Erlangen-Nürnberg und Geschäftsführer des Kompetenznetzwerks für Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern KONWIHR. Seine Forschungsschwerpunkte sind Strömungsmechanik, Computational Fluid Dynamics und High Performance Computing.

Prof. Dr. Dr. h.c. Franz Durst (geb. 1940) ist Inhaber des Lehrstuhls für Strömungsmechanik der Universität Erlangen-Nürnberg und Forschungsgruppenleiter bei KONWIHR. Seine Forschungsschwerpunkte sind experimentelle, theoretische und numerische Strömungsmechanik.

Prof. Dr. Ulrich Rüde (geb. 1957) ist Inhaber des Lehrstuhls für Systemsimulation an der Universität Erlangen-Nürnberg und Forschungsgruppenleiter bei KONWIHR. Seine Forschungsschwerpunkte sind Höchstleistungsrechnen, Numerische Simulation und Computational Science and Engineering.



Erdbebenwelle: Schnappschuss einer Erdbebenwellenausbreitung im Kölner Becken. Die Blickrichtung ist nach Süd-Osten. In der rechten unteren Bildecke sind verstärkte Effekte zu erkennen, die durch die dort vorliegende Sedimentstruktur bedingt sind.

Reichweite bleiben. Heutige Superrechner würden für eine solche Aufgabe Jahrhunderte benötigen. Allerdings ergeben sich im Bereich der Grundlagenforschung neue Perspektiven, um die Eigenschaften der Turbulenz besser beschreiben zu können.

Interdisziplinärer Ansatz

Spitzenleistungen im Supercomputing und der rechnergestützten Modellierung können nur erreicht werden, wenn drei Faktoren zusammenkommen: Erstens müssen die jeweils neuesten und leistungsfähigsten Maschinen zur Verfügung stehen. Zweitens muss die programmiertechnische Beherrschung dieser Maschinen durch Entwicklung neuer Informatikmethoden gewährleistet sein. Drittens müssen Mathematiker und Endanwender kontinuierlich neue Algorithmen entwickeln und implementieren. Vielen Anwendern ist nicht bewusst, dass völlig unterschiedliche Probleme die gleiche Methodik erfordern können. Die Simulation von Flüssigkeiten mit freiem Rand – wie zum Beispiel einem

Bachlauf – führt auf die gleiche Problematik wie die Berechnung von Optionswerten für den amerikanischen Aktienmarkt. Die methodische Verwandtschaft ist weder für den Ingenieur noch für den Finanzwissenschaftler nahe liegend und vielleicht für das jeweilige Fachgebiet auch gar nicht interessant. Die Brücke zu erkennen und zu nutzen ist Aufgabe der Mathematiker und Informatiker, die an der Entwicklung der Methoden, Verfahren und Software im Bereich der Computational Sciences arbeiten.

Die Gesamtaufgabe kann von einzelnen Lehrstühlen nicht geleistet werden, ebenso wenig wie von den Rechenzentren, die die Supercomputer betreiben. Bewährt haben sich interdisziplinäre Zusammenschlüsse wie der Forschungsverbund für Technisch-Wissenschaftliches Hochleistungsrechnen FORTWIHR und das Kompetenznetzwerk für Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern KONWIHR. Durch ihr frühzeitiges Engagement in dieser Thematik gehören die von der Bayerischen Staatsregierung geförderten Einrichtungen zur Spitzengruppe der internationalen Forschung.