

Münchens nächste Topmodelle

Wenn ein Problem zu komplex, zu teuer oder zu gefährlich für die theoretische Analyse oder ein klassisches Experiment ist, helfen Computersimulationen. Von der Astrophysik bis zur Zellbiologie setzen sie Wissenschaftler aus vielen Gebieten ein. Mit ihren Simulationsmethoden gibt die Numerikerin Prof. Barbara Wohlmuth zahlreichen wissenschaftlichen und technischen Disziplinen die Werkzeuge dazu – und eine gemeinsame Sprache. Ganz nebenbei fördert sie noch Frauen in der Mathematik

Link

www-m2.ma.tum.de

Welches Klima herrscht in 100 Jahren? Wie kann man Krebszellen gezielt durch Ultraschall verbrennen? Lassen sich giftige Gase für immer unterirdisch lagern? In Forschung und Entwicklung spielen nachgestellte oder vorausberechnete Prozesse aus dem Bereich der Natur-, Ingenieur- und Wirtschaftswissenschaften eine immer größere Rolle. Vieles lässt sich heute am rechnergestützten Modell simulieren. Manches nur dort. Denn sein Wissensdrang lässt den Menschen immer häufiger an die Grenzen von Raum und Zeit stoßen: Vorgänge in der Astrophysik, etwa der Lebenszyklus einer Galaxie, dauern viel zu lange, als dass ein Astronom sie beobachten könnte. Andere Prozesse laufen derart schnell ab, dass sie mit Messtechnik nicht zu erfassen sind. Es gibt Experimente, die zwar machbar, aber wegen ihrer Begleiterscheinungen unerwünscht sind – Lawinenabgänge, Kernwaffentests oder medizinische Versuche an Menschen. In wieder anderen Fällen drängt sich eine Simulation besonders aus Kostengründen auf, zum Beispiel bei den Crashtests der Autoindustrie.

Ein Fach zwischen den Fächern

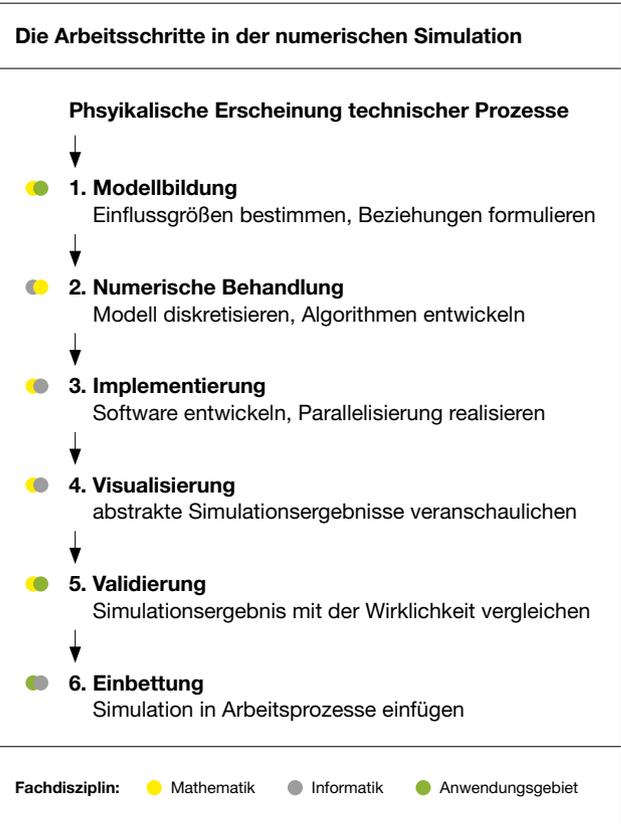
Den enormen Simulationsbedarf versuchen Mathematik und Informatik mit immer besseren Methoden zu bedienen. Dabei arbeiten die Akteure in offenen, kooperativen Netzwerken und brechen althergebrachte ▸



„Es ist spannend, interdisziplinär an einer gemeinsamen Sprache zu arbeiten“, sagt die Numerikerin Barbara Wohlmuth

Fächerstrukturen auf. „Die Weiterentwicklung von Simulationsmethoden sehe ich als eine integrierte Systemwissenschaft, die sich in Zukunft zu einer eigenständigen Disziplin entwickeln wird“, sagt Barbara Wohlmuth, Inhaberin des Lehrstuhls für Numerische Mathematik an der TU München (TUM). „Mit dem Hochleistungsrechnen wollen wir für unsere Kolleginnen und Kollegen passende Instrumente entwickeln.“ Der Wert dieser Dienstleistung wird deutlich, wenn man sich klarmacht, wie viel von der Schlüsseltechnologie der Computersimulation abhängt. Ein Satellit in der falschen Umlaufbahn oder die schwankende Londoner Millennium Bridge sind zwei Beispiele dafür, wie sich Fehler auswirken. „Mathematiker alleine können aber keine Garantien geben.

Unten: Die Abbildungen auf dieser und den Folgeseiten zeigen in einem Zeitraffer die plastische Verformung einer Kugel, die durch einen Zylinder geschoben wird

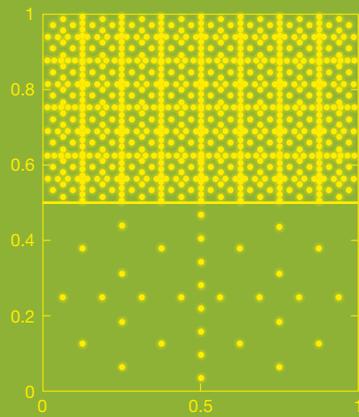


Man darf nicht vergessen, dass unsere Lösung immer nur eine Annäherung an die eigentliche Lösung des physikalischen Problems darstellt“, betont Wohlmuth. „Wie effizient Simulationsalgorithmen sind, hängt entscheidend davon ab, ob geeignete numerische Verfahren angewandt werden.“ Wer diese Disziplin voranbringen will, muss auf höchstem Niveau rechnen und programmieren. Hier sind nichtlineare gekoppelte Gleichungssysteme mit vielen Millionen Unbekannten keine Ausnahme. Die neuesten Supercomputer, die dabei eingesetzt werden, verfügen über Zehntausende von Prozessoren und schaffen mehrere Milliarden Rechenoperationen in der Sekunde (Petaflops).

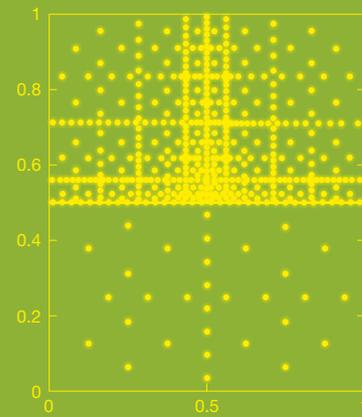
So läuft die numerische Simulation

Am Anfang jeder Simulation steht die Entwicklung eines geeigneten mathematischen Modells der zu simulierenden Abläufe. Als vereinfachtes Abbild der Realität soll es möglichst viele relevante Einflussgrößen und de- ▷

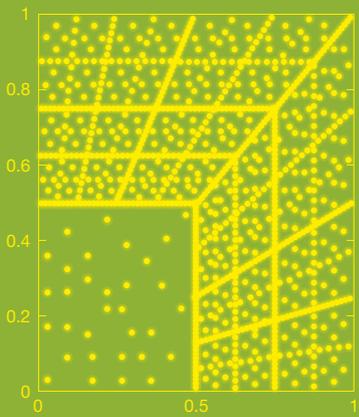




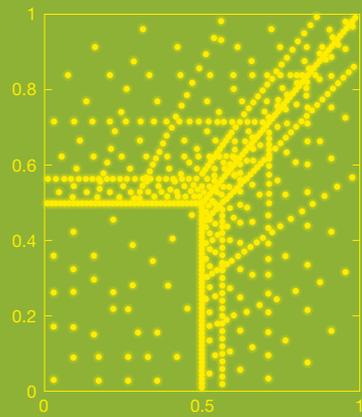
original grid, level 8



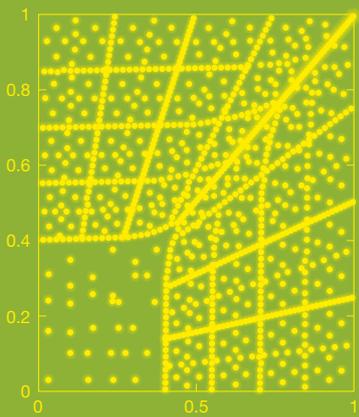
original grid, level 8



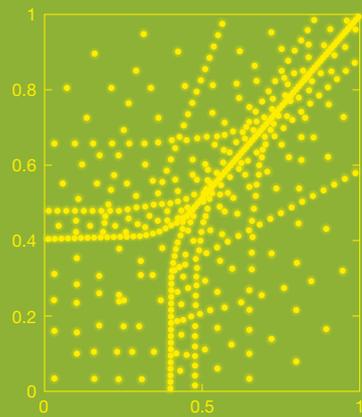
transformed grid 1, level 8



transformed grid 1, level 8

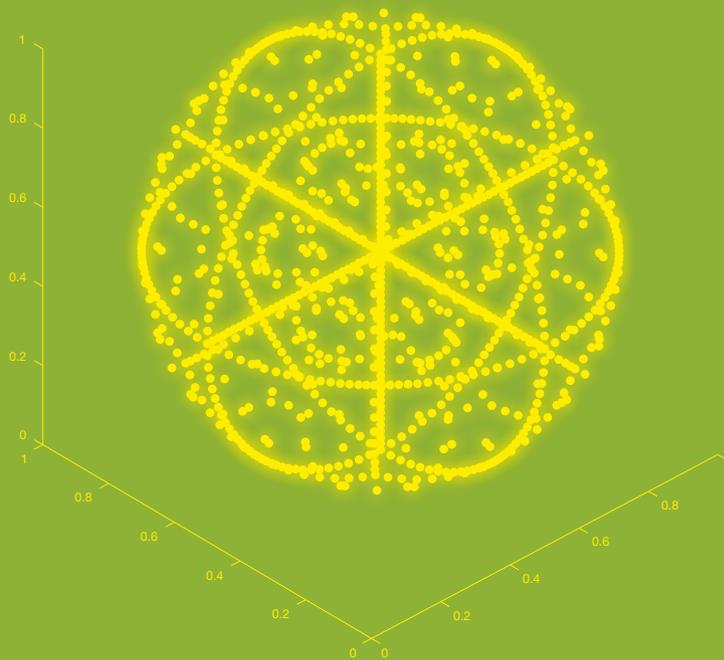


transformed grid 2, level 8



transformed grid 2, level 8

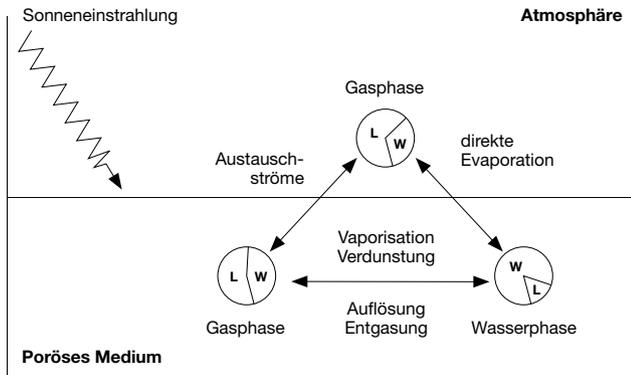
Mathematische Modelle komplexer Systeme sind häufig mit Unsicherheiten behaftet. Viele Berechnungsmethoden liefern probabilistische Aussagen, also statistische Werte, mit welcher Wahrscheinlichkeit ein bestimmtes Ereignis eintritt. Oft interessieren sich Forscher aber für possibilistische Ergebnisse, also, ob ein Ereignis überhaupt eintreten kann. Dies ist entscheidend für Risikobewertungen. Jeder unsichere Parameter geht als freie Variable in das Problem ein, was die Komplexität oft exponentiell erhöht. Die Abbildungen visualisieren adaptive erhaltene Simulationsergebnisse aus ganz unterschiedlichen Anwendungsgebieten. Die Wissenschaftler können anhand dieser Methodiken effizient eine Sensitivitätsanalyse des Systems durchführen



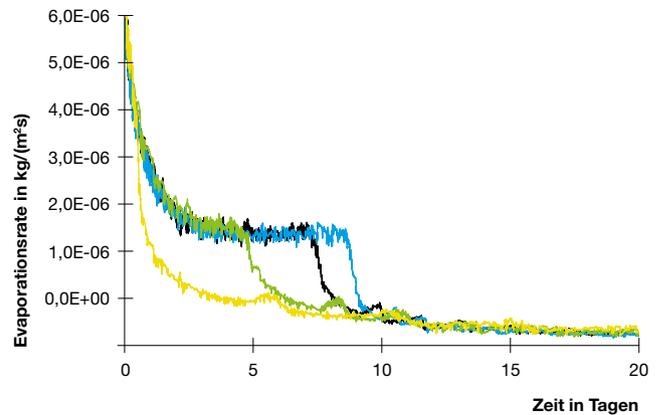
Dem Fluch der Dimension, der bei hochdimensionalen Fragestellungen zu einem exponentiell wachsenden Anstieg im Aufwand führt, begegnen die Mathematiker mit dünnen Gittern (sparse grids). Dabei wird die Problemstellung nicht auf einem vollen Tensorproduktgitter approximiert, sondern auf geeignet ausgedünnten Gittern

Glossar	
<p>Finite-Elemente-Methode (FEM): Ein numerisches Verfahren zur Lösung partieller Differenzialgleichungen. Es liefert eine Näherungsfunktion an die exakte Lösung der Gleichungen. Die FEM wurde in den Ingenieurwissenschaften entwickelt und ist heute das Standardwerkzeug in der Festkörpersimulation. Die Numerik hat substantiell dazu beigetragen, diese Methode zu analysieren und Probleme wie zum Beispiel das der instabilen Elemente in der Strömungssimulation besser in den Griff zu bekommen.</p>	<p>Mathematische Modellbildung: Ein mathematisches Modell verwendet die mathematische Sprache zur Beschreibung eines Systems, zum Beispiel aus der Physik, der Biologie oder den Sozialwissenschaften. Durch Vergleich der Berechnungsergebnisse mit Beobachtungen kann die Effizienz eines Modells verifiziert werden.</p>
<p>Höchstleistungsrechnen: Die stetige Verbesserung von Hard- und Software steigert Präzision, Visualisierungsqualität und Geschwindigkeit. Damit liefern numerische Simulationen immer schneller und realitätsnaher die von Wissenschaft und Wirtschaft etwa in den Bereichen Klimaschutz, Energie, Gesundheit und Produktentwicklung benötigten Modelle.</p>	<p>Numerische Mathematik (Numerik): Die Numerik beschäftigt sich mit der Konstruktion und Analyse von Algorithmen für kontinuierliche mathematische Probleme. Hauptanwendung ist dabei die Berechnung von Lösungen mithilfe von Computern.</p>
<p>Iteration: Eine Methode der Mathematik, sich der exakten Lösung eines Rechenproblems schrittweise anzunähern (sukzessive Approximation). Sie besteht in der wiederholten Anwendung desselben Rechenverfahrens. Meistens iteriert man mit Rückkopplung: Die Ergebnisse eines Iterationsschrittes werden als Ausgangswerte des jeweils nächsten Schrittes genommen – bis das Ergebnis (beziehungsweise Veränderung einer Bestandsgröße) zufriedenstellt. Es muss anschließend noch bewiesen werden, dass die Iterationsfolge konvergiert und dass der Grenzwert mit der gesuchten Lösung übereinstimmt. Die Geschwindigkeit der Konvergenz ist ein Maß dafür, wie brauchbar die Iterationsmethode ist.</p>	<p>Wissenschaftliches Rechnen: Eine interdisziplinäre Forschungsdisziplin, die zwischen der Numerischen Mathematik, der Informatik und dem wissenschaftlichen Fach, aus dem das zu betrachtende Modell kommt, angesiedelt ist. Modellierungsverfahren und Simulationsmethoden entwickeln sich neben der klassischen Theoriebildung und dem Experiment immer stärker zum entscheidenden Faktor für eine international wettbewerbsfähige Forschung in Wissenschaft und Wirtschaft. Man setzt sie vor allem dort ein, wo reale Experimente nicht möglich, zu zeitaufwendig oder zu teuer sind.</p>

Grafik: edlundsepp nach TUM; Darstellungen unten rechts: TUM
 Grafiken oben rechts: edlundsepp nach TUM



W Wasser L Luft



Vorhersagen über die Verdunstung (Evaporation) und daraus resultierende Austrocknung gehören zu den großen Herausforderungen der numerischen Simulation. Die Wissenschaftler berechnen, wie komplexe Interaktionen zwischen Erdboden (poröses Medium) und Atmosphäre unter dem Einfluss von Variablen wie Sonneneinstrahlung, Luftfeuchtigkeit, Wind, Temperatur oder Bodenbeschaffenheit ablaufen

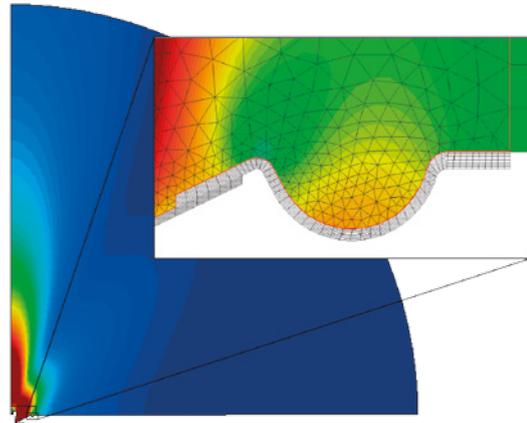
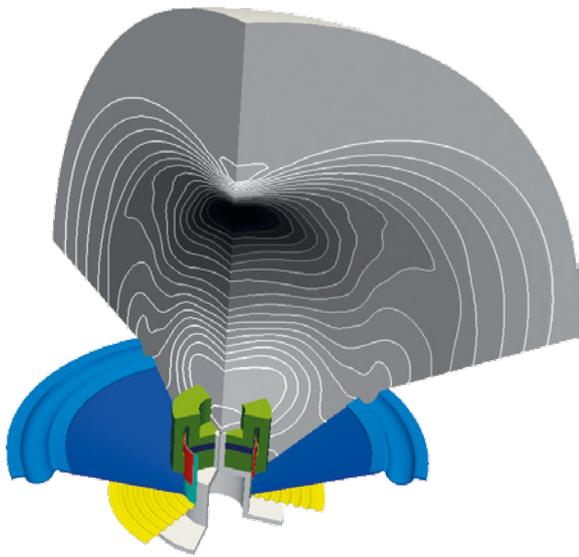
ren Beziehungsgeflecht erfassen, konsistent formuliert und eindeutig lösbar sein. Solche Modelle bestehen zu meist aus Systemen gekoppelter Differenzialgleichungen. Computer können nur mit endlich vielen diskreten Zahlen (den sogenannten Gleitpunktzahlen) arbeiten. Deshalb müssen die einzelnen Terme der Modellgleichungen – bei Problemen mit räumlicher Auflösung auch das zu betrachtende Simulationsgebiet – zuerst diskretisiert, in für den Rechner geeignete algebraische Gleichungssysteme überführt werden, die numerisch, also zahlenmäßig, lösbar sind. Es folgen die Konstruktion geeigneter Algorithmen und Datenstrukturen sowie die Frage der parallelen Bearbeitung. Simulationsrechnungen brauchen viel Speicherplatz und Rechenzeit. Sie können deshalb oft nur auf Supercomputern laufen. Die immensen Datenmengen und Einzelergebnisse, die diese produzieren, müssen mit Grafiken und Animationen veranschaulicht werden. Oft sind es gerade die lokalen Details, die interessieren: An welcher Stelle des

luftumströmten Pkw entstehen welche Verwirbelungen? Experten aus der jeweiligen Anwendungsdisziplin, in diesem Fall aus der Fahrzeugtechnik, müssen die Ergebnisse anhand von Erfahrungswerten überprüfen. Erst wenn die gewünschte Zuverlässigkeit der Computersimulationen erreicht ist, können die Modelle sinnvoll eingesetzt werden. In der Autoindustrie passiert das schon recht häufig. Die numerische Simulation ist hier inzwischen in den gesamten Produktentwicklungsprozess integriert, die Simulationssoftware direkt an die Entwicklungssysteme von Fahrzeugdesignern oder an die Steuerprogramme der Fertigung angebunden.

Alles im Fluss

Ein breites Spektrum von Anwendungen hat sich auch die wissenschaftliche Berechnung von Evaporationsprozessen in der Industrie, Umwelttechnik und Medizin erschlossen. Auf diesem Gebiet leistet der Lehrstuhl für Numerische Mathematik an der TUM ebenfalls ▷





Darstellungen: TUM

Praktische Anwendungen und Produktoptimierungen sind oft Fragestellungen der Numerik. Zum Beispiel die Auslegung und Geometrie eines Lautsprechers. Der Aufbau eines Lautsprechers bestimmt maßgeblich, wie sich die Schallwellen, in der linken Grafik grau dargestellt, ausbreiten. Die Wissenschaftler beziehen in ihre Berechnungen die Bauteile des Lautsprechers ein, wie z. B. die Membran (blau). Zur Berechnung der Schallausbreitung benutzen sie Diskretisierungen basierend auf unterschiedlichen Gitterweiten (rechts)

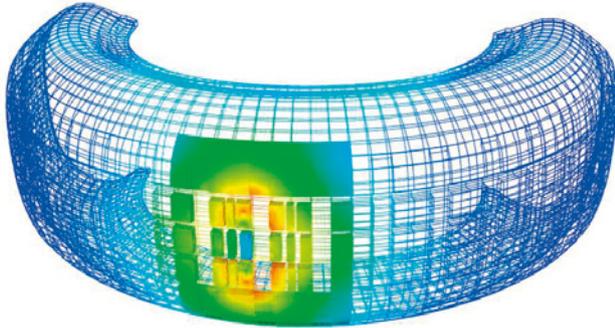
wichtige Beiträge. Ein wahrhaft globales Thema – Verdunstungsraten und -muster beeinflussen das Klima und damit die Lebens- und Arbeitsbedingungen auf der Erde. Es gehört zu den großen Herausforderungen der Numerik, Vorhersagen über die Verdunstung und daraus resultierende Austrocknungsraten zu ermöglichen. Hier nehmen komplexe Interaktionen zwischen einem porösen Medium, etwa dem Erdboden, und der Atmosphäre (freie Strömung) sowie weitere Rahmenbedingungen wie Strahlung, Luftfeuchtigkeit, Temperatur und Luftbewegungen Einfluss auf die Prozesse und die zu ihrer Bestimmung notwendigen Gleichungssysteme.

Qualität ohne Quote

Eine Mathematikprofessorin? Für Barbara Wohlmuth ist das nichts Ungewöhnliches. „Unser Fach sollte nicht mehr als Männerdomäne bezeichnet werden“, sagt sie. Diese Zeiten sind vorbei. Aktuell studieren an

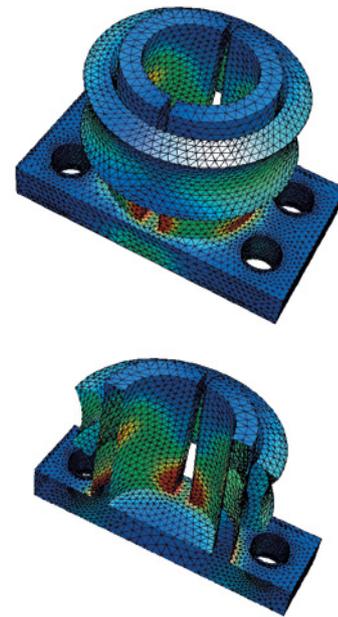
der TUM immerhin knapp 30 Prozent Frauen Mathematik. Wohlmuth möchte den Trend noch verstärken und wirbt für das Fach: „Mathe ist nicht nur etwas, das man fürs Lehramt studieren kann. Vielleicht bin ich hier ein Vorbild. Ich glaube, es kann Frauen motivieren, wenn vorn eine Professorin steht. Das war bei mir im Studium noch nicht so. Der hochschulpolitische Einfluss von Frauen wächst auch in unserer Disziplin. Es gibt mehr Professorinnen und wir sind öfter in wissenschaftlichen Beiräten und ähnlichen Gremien vertreten.“ Sie selbst war zum Beispiel Mitglied des Direktoriums des Exzellenzclusters SimTech der Uni Stuttgart und ist im Vorstand der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM). „Man kann an vielen Stellen kleine Zeichen setzen“, erklärt sie. „Als Feministin sehe ich mich aber nicht. Ich mache das nebenbei.“ Gemeinsam mit anderen Professorinnen macht Wohlmuth mit dem kürzlich erschienenen Buch „Facettenreiche Mathematik“ Schülerinnen Lust auf ihr Fach.





Reduktion ist notwendig, um die Zahl der Variablen beherrschbar zu machen. So bei der Berechnung von Reifengeometrien mit Mehrskalmethoden. Mathematiker betrachten das fein aufgelöste Reifenprofil lediglich im Bereich des Reifenkontaktes zur Straße

Wie sie zur Mathematik kam? „Meine erste große Liebe hat Physik studiert. Ich wollte etwas Ähnliches, aber doch Eigenständiges machen“, erzählt sie lachend. Die Beziehung hielt nur bis zum Vordiplom, die Liebe zur Mathematik aber wurde immer stärker. Nach dem Mathematik- und Physikstudium an der TUM promovierte Wohlmuth hier Mitte der 1990er mit einer Arbeit über adaptive Finite-Elemente-Methoden. Zur Habilitation ging sie nach Augsburg und New York. 2001 nahm sie den Ruf der Uni Stuttgart auf den Lehrstuhl für Numerische Mathematik für Höchstleistungsrechner an. Hauptarbeitsgebiet: numerische Simulation partieller Differentialgleichungen. Es folgten Gastprofessuren in Hongkong, Valenciennes und Pau. Seit Februar 2010 ist sie wieder an der TUM. „Die Struktur einer Technischen Universität, die den engen Kontakt zu den Anwendungsdisziplinen ermöglicht, bedeutet mir viel. Es ist spannend, an einer gemeinsamen Sprache zu arbeiten“, beschreibt die Professorin ihren Antrieb.



Wie eng darf eine Manschette sein, die über einen Zylinder geschoben wird, damit die Verformung den Zylinder nicht dauerhaft schädigt? Mit modernen Simulationstechniken zeigen Mathematiker die Stellen auf, wo die Kontaktkräfte besonders hoch sind

Neue Nachwuchs-Netzwerke

Die TUM International Graduate School of Science and Engineering (IGSSE) ist ein Beispiel für Interdisziplinarität bei der Förderung junger Wissenschaftler. Hier arbeiten gemischte Teams, etwa Mathematiker und Maschinenbauer, an einem Projekt. „Modellreduktion, Mehrskalmodelle, Risikoabschätzungen – das sind zukunftssträchtige Themen, mit denen sich meine eigene Arbeitsgruppe weiter beschäftigen wird“, sagt Barbara Wohlmuth und nennt noch ein Beispiel für ein junges Netzwerk, das an der TUM entsteht: „Meine Kollegin Claudia Klüppelberg koordiniert einen Antrag für eine Graduiertenschule zu einem sehr spannenden, interdisziplinären Thema. RISE – kurz für ‚Risk and Security‘ – will neue Methoden der Risikoabschätzung entwickeln, indem es die Risiken unserer Zeit als techno-sozio-ökonomische Phänomene in einer hochvernetzten, komplexen Welt analysiert.“ Auch dieses Vorhaben verspricht, Topmodelle hervorzubringen. *Karsten Werth*

