Die Mathematik hinter der Computer-Simulation

ADAPTIVE ALGORITHMEN ZUR BERECHNUNG VON VORGÄNGEN IN NATUR UND TECHNIK

Computersimulation begegnet uns im Alltag und im Berufsleben in vielen Bereichen: Ob als Wettervorhersage, zur Planung medizinischer Eingriffe oder als virtueller Crash-Test im Automobilbau, immer steckt eine Menge Mathematik hinter den resultierenden Bildern und Animationen. Die Simulation komplexer Vorgänge in Natur und Technik lässt sich in vielen Fällen nur durch Einsatz ausgeklügelter adaptiver Methoden und effizienter Algorithmen zur Lösung der auftretenden riesigen Gleichungssysteme bewältigen.

In vielen Bereichen der Natur- und Ingenieurwissenschaften ist man an möglichst realitätsgetreuen Simulationsrechnungen der jeweils betrachteten physikalischen Vorgänge interessiert. In den vergangenen Jahrzehnten wurde es möglich, zunehmend komplexere Probleme mit vielen beteiligten physikalischen Größen zu simulieren. In Bereichen wie der Medizintechnik oder bei der Wettervorhersage hat dieser Fortschritt unmittelbare und offensichtliche Auswirkungen auf unsere Lebensqualität. Ohne die stetige Entwicklung immer leistungsfähigerer Rechner in den letzten 50 Jahren wären solche Simulationsrechnungen natürlich nicht möglich. Weniger bekannt ist hingegen die Tatsache, dass die Leistungssteigerung durch verbesserte Algorithmen mit der Erhöhung der Rechen- und Speicherkapazität der jeweiligen Computer-Generation locker mithalten kann. Dies gilt jedenfalls für den hier betrachteten Bereich der numerischen Simulation von Prozessen aus der Strömungs- und Festkörpermechanik, in dem die Entwicklung immer effizienterer Rechenmethoden in den vergangenen 50 Jahren ebenfalls rasant fortgeschritten ist.

1

Abbildung 1
Das Finite-Element-Gitter des VW Touran.
Quelle: VW AG

Hinter Simulationsrechnungen von Vorgängen in Natur und Technik steht immer eine Menge Mathematik aus verschiedenen Gebieten. Prozesse aus der Strömungs- und Festkörpermechanik werden meist mit partiellen Differentialgleichungen – d.h. sie enthalten Ableitungen nach mehreren Variablen, zumeist die Zeit sowie die betrachteten Ortsrichtungen – beschrieben. Bei der Herleitung und Untersuchung solcher mathematischer Modelle besteht die Aufgabe der Mathematik – in diesem Fall vor allem der Analysis – darin, sicherzustellen, dass prinzipiell vernünftige Ergebnisse zu erwarten sind, bzw. gegebenenfalls Nachbesserungen vorzunehmen.

Die Übertragung des abstrakten mathematischen Modells in den Computer erfordert die Diskretisierung des betrachteten Rechengebiets mit einer endlichen Anzahl von Punkten. Hierzu hat sich vor allem die Methode der Finiten Elemente bewährt, die in den letzten 50 Jahren von Ingenieuren und Mathematikern – teilweise unabhängig voneinander, in jüngerer Zeit immer mehr in gemeinsamer Arbeit – kontinuierlich weiterentwickelt wurde. Bei dieser Methode wird das Rechengebiet durch eine Triangulierung, d.h. ein Rechengitter aus Dreiecken bzw. Tetraedern, ersetzt und die im Modell enthaltenen physikalischen Größen lediglich an den Gitterpunkten näherungsweise berechnet. Obige Abbildung zeigt das Finite-Element-Gitter eines VW Touran, das bei der VW AG als Grundlage für entsprechende Simulationsrechnungen dient.

Um hinreichend genaue Approximationen an die gesuchte Lösung des mathematischen Modells zu ermöglichen, müssen solche Triangulierungen sehr fein sein. Daher kommt man bei anwendungsorientierten Simulationsrechnungen häufig auf Triangulierungen mit einigen Millionen Gitterpunkten, insbesondere bei dreidimensionalen Rechengebieten mit komplizierteren Geometrien. Dabei sollte die verwendete Triangulierung dort feiner aufgelöst sein, wo sich die besonders kritischen physikalischen Prozesse abspielen. Die benötigte Auflösung in Teilbereichen des Rechengebietes lässt sich während der Rechnung adaptiv steuern auf der Basis sogenannter Fehlerschätzer. Der bei der Berechnung unvermeidbare Fehler gegenüber der »idealen« exakten Lösung des mathematischen Modells – nicht zu verwechseln mit dem Modellfehler gegenüber der tatsächlichen physikalischen Realität – lässt sich aufgrund ausgeklügelter Methoden aus dem Bereich der Numerischen Mathematik zuverlässig schätzen. Und zwar lässt sich dies lokal bewerkstelligen, so dass man durch solche Fehlerschätzer genaue Auskunft darüber erhält, wo der Fehler noch relativ groß ist und die Auflösung der Triangulierung weiter zu verfeinern ist.

Mit adaptiven Verfeinerungsstrategien, bei denen nur dort eine feinere Auflösung des Rechengitters eingebaut wird, wo dies aufgrund der modellierten Vorgänge notwendig ist, lassen sich in vielen Fällen Simulationsrechnungen mit hoher Genauigkeit bei einer noch vertretbaren Anzahl von Gitterpunkten durchführen. Dabei ist die Speicherung der zu den Gitterpunkten gehörigen Näherungswerte der zu modellierenden physikalischen Größen auch bei mehreren Millionen Unbekannten völlig unproblematisch. Auch die graphische Darstellung der berechneten Näherungslösung stellt in der Regel keine wirkliche Herausforderung an herkömmliche Computer der neuesten Generation dar. Der weitaus größte Bedarf an Rechenzeit und Speicherplatz wird bei der Lösung der Gleichungssysteme, welche die Unbekannten des mathematischen Modells an den einzelnen Gitterpunkten miteinander koppeln, benötigt. Hierbei wurde aber auch der weitaus größte Fortschritt bei der Entwicklung effizienter Algorithmen in den letzten 50 Jahren erzielt, worauf weiter unten detaillierter eingegangen wird.

Ein möglichst sparsamer Einsatz von Gitterpunkten zur Diskretisierung wird umso wichtiger, wenn man sich vor Augen hält, dass die mathematischen Modelle von anwendungsrelevanten Vorgängen in der Strömungs- oder Festkörpermechanik in der Regel nichtlinear und zeitabhängig sind. Zur Behandlung nichtlinearer Probleme ist es notwendig, eine ganze Reihe linearer Probleme nacheinander zu lösen, wovon jedes ein Gleichungssystem auf der zugrundeliegenden Triangulierung darstellt. Und dies ist bei zeitabhängigen Prozessen für viele diskrete Zeitschritte zu tun, um von einer Momentaufnahme zur nächsten zu springen.

Nach der Diskretisierung durch die Methode der Finiten Elemente ist das mathematische Modell durch ein Gleichungssystem dargestellt, durch das die Näherungswerte der gesuchten physikalischen Größen miteinander gekoppelt sind. Am besten stellt man sich die Gitterpunkte als Kügelchen und die Kanten der Triangulierung als kleine Federn vor, welche gespannt oder gestaucht werden können. Die aus den Kügelchen und Federn nachgebildete Triangulierung strebt einem Gleichgewichtszustand zu, bei dem sich die wirkenden Kräfte in jedem Gitterpunkt egalisieren. Jeder Gitterpunkt ist zwar nur mit den unmittelbar benachbarten über eine Kante verbunden und wird durch die entsprechenden Federkräfte in verschiedene Richtungen gezogen. Bewegt man aber ein Kügelchen der Struktur, so werden letztlich alle anderen Kügelchen beeinflusst, wenn auch die Wirkung mit der Entfernung zunehmend schwächer wird.

Ein einfaches Verfahren zur Lösung von Gleichungssystemen, das auf Carl Friedrich Gauß zurückgeht, besteht darin, eine Gleichung nach der anderen jeweils nach einer Unbekannten aufzulösen und diesen neu berechneten Wert dann weiter mitzuführen.

Auf unsere Triangulierung mit Kügelchen und Federn übertragen, hat dieses als Gauß-Seidel-Verfahren bezeichnete Vorgehen folgende anschauliche Interpretation: In einer durch die Nummerierung der Gitterpunkte vorgegebenen Reihenfolge wird jeweils ein Kügelchen gelockert, so dass es »seinen« lokalen Gleichgewichtszustand einnehmen kann, während alle anderen Kügelchen fixiert bleiben. Solche Relaxationsverfahren (»relax« im Sinne von »lockern«) wurden in den 50er und 60er Jahren zur Lösung der bei Simulationsrechnungen auftretenden Gleichungssysteme häufig eingesetzt. In der bisher beschriebenen Form haben sie allerdings den Nachteil, oft sehr langsam zu konvergieren. Wenn immer nur ein Gitterpunkt »gelockert« wird, dauert es meist sehr lange bis relevante Information von einem Teil des Rechengebiets bis zum anderen Ende gelangt ist.

Dahinter stecken mathematische Prinzipien, deren Einsatzbereich stetig durch neue Forschungsergebnisse erweitert wird. Ein Wissenschaftler des Instituts für angewandte Mathematik zeigt den Stand der Forschung.

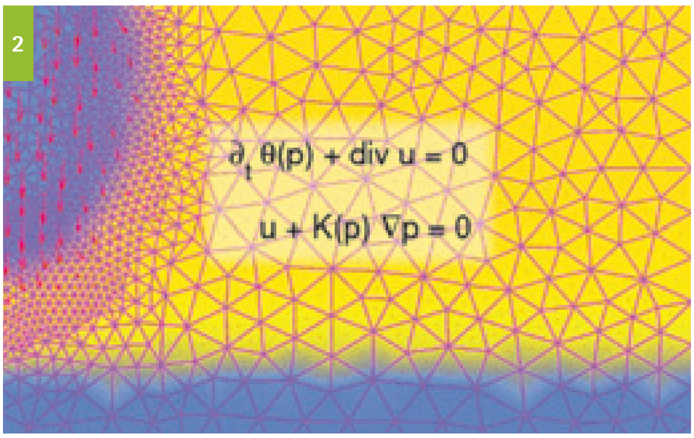
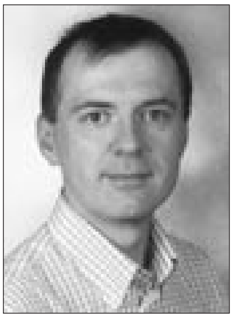


Abbildung 2
Simulation eines Versickerungsprozesses im Boden: Bereiche mit hohem Wassergehalt sind blau, trockene Bereiche gelb dargestellt. Eine feine Auflösung der Triangulierung ist vor allem im Übergangsbereich erforderlich. Das mathematische Modell besteht aus einem System nichtlinearer zeitabhängiger partieller Differentialgleichungen.



Prof. Dr. Gerhard Starke
Jahrgang 1963, ist seit 2000 Professor für Wissenschaftliches Rechnen am Institut für Angewandte Mathematik

Um diesen Nachteil zu beheben, hat man Gebietszerlegungs- und Mehrgitterverfahren entwickelt. Bei Mehrgitterverfahren (engl. Multigrid) wird die Relaxation auf einer Hierarchie von Triangulierungen verschiedener Feinheitsstufen durchgeführt. Diese Methoden gehören zu den effizientesten derzeit eingesetzten Algorithmen zur Lösung der bei Simulationsrechnungen auftretenden hochdimensionalen Gleichungssysteme. Dass deren Grundidee letztlich auf C. F. Gauß zurückgeht, ist umso bemerkenswerter.

Zum Schluss sind ein paar Bemerkungen zur Rolle der Mathematik in Bezug auf die Simulation physikalischer Prozesse in Natur und Technik angebracht. Die Arbeit der Mathematiker kann in diesem Gebiet nur interdisziplinär durch enge Zusammenarbeit mit den jeweiligen Anwendern erfolgreich sein. Die Herausforderung besteht dabei immer wieder darin, die mathematischen Werkzeuge und numerischen Algorithmen auf das jeweilige Anwendungsfeld abzustimmen. An der Leibniz Universität Hannover findet eine solche Zusammenarbeit von Mathematikern mit Kollegen aus den Natur- und Ingenieurwissenschaften bereits seit längerem im Rahmen von Forschungsprojekten, Schwerpunktprogrammen und Graduiertenkollegs statt. Für den Mathematiker steht dabei weniger der konkrete Anwendungsbereich im Vordergrund, da die Werkzeuge und Algorithmen meist vielseitig einsetzbar sind. Beispielsweise lassen sich mit adaptiven Verfeinerungsstrategien Simulationsrechnungen effizienter durchführen, egal ob es sich dabei um Strömungsmodelle oder um das elastoplastische Verformungsverhalten von Werkstoffen handelt. Und in den zugrundeliegenden Modellen lassen sich ebenfalls große Gemeinsamkeiten erkennen – zumindest aus mathematischer Sicht. Eine besondere Herausforderung stellen numerische Simulationen dar, bei denen verschiedene physikalische Vorgänge, die miteinander in Wechselwirkung stehen, berücksichtigt werden müssen. Dies ist beispielsweise in Böden der Fall, wenn Strömungsprozesse bewirken, dass sich das Erdreich verformt und die Gefahr eines Böschungsbruches besteht. Mit leistungsfähigen Rechnern und effizienten Algorithmen ist man neuerdings auch in der Lage, gekoppelte Prozesse dieser Art anzugehen.

3

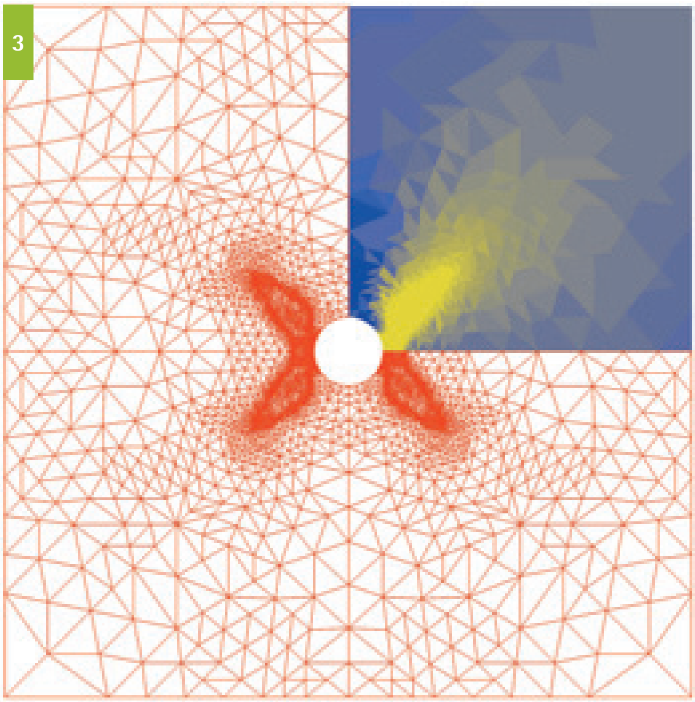


Abbildung 3
Simulation der elastoplastischen Verformung einer metallenen Platte, an der oben und unten gezogen wird: Bereiche mit plastischer Verformung sind gelb dargestellt. Die adaptive Verfeinerung auf der Basis eines Fehlerschätzers führt hier vor allem im Bereich der plastischen Zone zu einer sehr feinen Auflösung.

4

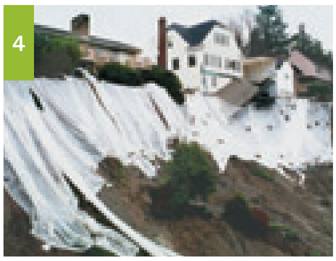


Abbildung 4
Um das Abrutschen eines Berghanges unter Belastung vorhersagen zu können, müssen sowohl die Strömungsprozesse als auch die Verformung des Bodens und deren Wechselwirkung simuliert werden.
Foto: US Geological Survey.