

# Der dritte Weg: Hochleistungsrechner-Simulation

## Profilinie 6: Modellierung, Simulation, Hochleistungsrechnen

Rechnersimulationen haben sich in den vergangenen 25 Jahren zu einer anerkannten dritten wissenschaftlichen Methode entwickelt, die die bisherigen beiden Methoden Theorie und Experiment sinnvoll ergänzt. An der Technischen Universität Chemnitz wie auch weltweit setzen Forscher immer mehr auf die Rechenleistung von Großrechnern, um komplexe realitätsgetreue Modellsysteme untersuchen zu können. Mit der Installation des Hochleistungs-Clusterrechners "CLiC" an der TU Chemnitz wurde dafür bereits vor fünf Jahren der Grundstein gelegt. Ein wesentlich leistungsstärkerer Nachfolger "CHiC" ist bereits in der Planung und wird insbesondere einem Konsortium aus 23 Professuren bzw. Instituten zur Verfügung stehen.

Um die Leistung derartiger, typisch hochparalleler Rechner nutzen zu können, ist eine starke interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen "Anwendern", Algorithmenentwicklern und Informatikern unabdingbar. Denn um eine Simulation möglichst schnell abschließen zu können – das heißt zum Beispiel in nur wenigen Stunden oder Tagen – müssen effiziente parallele Algorithmen entwickelt und der Computer auch richtig programmiert werden. Zum Vergleich sei ein Formel-1-Bolide herangezogen: Ein ungeübter Nutzer bleibt immer im ersten Gang.



Detlef Heine, Mitarbeiter des Universitätsrechenzentrums, beim Test des Hochleistungsrechners CLiC, Forschungsgegenstand und Werkzeug in der Profillinie 6

Foto: TU Chemnitz/Wolfgang Schmidt

An der TU Chemnitz haben sich seit über zwei Jahrzehnten die Gebiete der rechnergestützten Wissenschaften (Computational Science) sowie des parallelen und verteilten Hochleistungsrechnens mit zunehmender Verzahnung entwickelt. Die Koordinierung und Bündelung entsprechender Forschungsarbeiten in der Profillinie 6 "Modellierung, Simulation, Hochleistungsrechnen" wird es ermöglichen, im internationalen Wettbewerb des Wissens mitzuhalten.

In den folgenden Schwerpunkten sind Forschungsaktivitäten aus allen Fakultäten eingebunden, wobei die Fakultäten für Naturwissenschaften, für Mathematik und insbesondere auch für Informatik die tragenden Säulen sind.

### Simulation in Technik und Naturwissenschaften

Simulationen praxisorientierter Probleme im Bereich neuer (Nano-) Materialien (siehe auch Profillinie 1, Seiten 3 - 10), der Strömungs- und Festkörpermechanik, der theoretischen Physik und Chemie erfordern höchsten Rechenaufwand. Insbesondere stellen atomskalige Simulationen neuartiger Dielektrika extreme Anforderungen an die Rechenkapazität. Die Anwendung quantenmechanischer Methoden zur Lösung chemischer Fragestellungen auf

Großrechnern ermöglicht neuartige Untersuchungen.

### Rechnergestützte Optimierung im nichttechnischen Bereich

Die Optimierung realitätsnaher Probleme im nichttechnischen Bereich basiert auf zunehmend komplexen Modellbildungen und entsprechend umfangreichen Simulationen. Beispiele sind Simulationen in den Bereichen Wirtschaftspolitik, Finanzwirtschaft, Sportwissenschaft, Psychologie und der künstlichen Intelligenz. Beispielhaft seien Simulationen dynamischer Systeme für Konjunktur- und Wachstumsmodelle genannt.

### Algorithmen für Hochleistungsrechnen

Die Entwicklung numerischer Verfahren zur Lösung praktischer Problemstellungen auf der Basis abstrakt-mathematischer Modellbeschreibungen für verschiedene wissenschaftliche und technische Anwendungen erfordert insbesondere hinsichtlich der an der TU Chemnitz verfügbaren Rechentechnik hochparallele mathematische Algorithmen. Neuartige numerische Techniken sind mit entsprechendem Informatik-Know-how zu verbinden, um auf parallelen Hochleistungsrechnern effiziente, realitätsnahe Simulationsrechnungen durchführen zu können.

### Hard- und Software-Systeme

Im Mittelpunkt stehen informatische Fragestellungen hinsichtlich kosteneffizienter Parallelrechnerarchitekturen, adäquater Systemsoftware, effizienter Kommunikationsmiddlewares sowie großer Datenverwaltungssysteme. Ebenso ist der Bereich verteilter eingebetteter bzw. paralleler rekonfigurierbarer Systeme von Bedeutung. Zur Unterstützung der Parallelisierung von Algorithmen



Prof. Dr. Wolfgang Rehm, Sprecher der Profillinie 6 und Inhaber der Professur Rechnerarchitektur

Foto: Christine Kornack

und Anwendungen wird die Entwicklung entsprechender Tools und Umgebungen notwendig. Die Beantwortung theoretischer Fragestellungen zur Analyse von Güte und Laufzeiten von Algorithmen sowie der Simulation von Strukturen und Fehlertoleranzen fördert effiziente Lösungsansätze.

### Visualisierungstechniken

Die Zielsetzung der Virtual-Reality-Technologie besteht darin, rechnerinterne Modelle dreidimensionaler Welten durch den Einsatz spezieller multimedialer Ein- und Ausgabegeräte für den Menschen weitgehend real erfahrbar zu machen. Verschiedenste wissenschaftliche Anwendungen (zum Beispiel VR im Maschinenbau, siehe auch Profillinie 2, Seiten 11 - 17) machen von dieser Art der Ergebnisvisualisierung zunehmend Gebrauch.

Prof. Dr. Wolfgang Rehm

### Kontakt

Technische Universität Chemnitz  
 Profillinie 6  
 Modellierung, Simulation, Hochleistungsrechnen  
 Prof. Dr. Wolfgang Rehm  
 Professur Rechnerarchitektur  
 09107 Chemnitz  
 Telefon 0371/531-1432  
 Fax 0371/531-1628  
 E-Mail rehm@informatik.tu-chemnitz.de  
[www.tu-chemnitz.de/informatik/](http://www.tu-chemnitz.de/informatik/)

# Linux Cluster beschleunigen Forschung und Entwicklung

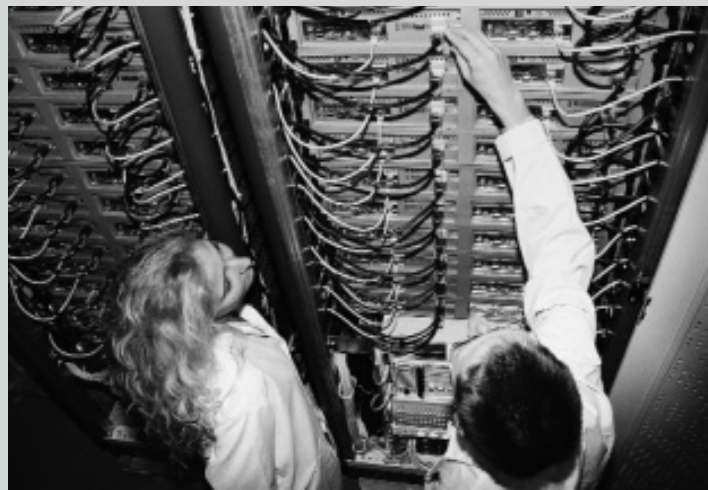
Dort wo die Leistung einzelner Computersysteme heute nicht mehr ausreicht, bedient man sich zunehmend einer größeren Anzahl vernetzter PC-Systeme, die mit speziellen Netzwerkkomponenten, dem Betriebssystem Linux und entsprechenden Softwarebibliotheken ein super-schnelles Parallelrechnersystem bilden. Auf die Entwicklung, den Vertrieb und Service solcher Clustersysteme hat sich vor ein paar Jahren die Chemnitzer MEGWARE Computer GmbH spezialisiert. Dabei konnten die Mitarbeiter auf ihre Erfahrungen bei komplexen Netzwerken und Storage-Systemen aufbauen.

Gleich der erste Linux Cluster mit dem Namen CLIC, der im Jahr 2000 gemeinsam mit der TU Chemnitz realisiert wurde, hat in Fachkreisen eine sehr hohe Beachtung gefunden und konnte sich mit seinen 528 Nodes im gleichen Jahr auf Platz 126 der weltweit anerkannten Top500-Rangliste für Supercomputer behaupten. In enger Zusammenarbeit mit den Informatikern der TU entstand der zur damaligen Zeit leistungsfähigste Cluster in Europa, der aus standardisierten PC-Komponenten gebaut wurde, und das System mit dem weltweit besten Preis-Leistungsverhältnis.

Heute profiliert sich MEGWARE mit seinen 60 Mitarbeitern durch überzeugende und hoch skalierbare Linux Cluster-Lösungen für Anwendungen in Industrie und Forschung. Der eigens dafür geschaffene Geschäftsbereich, in dem auch ehemalige Studenten der TU Chemnitz tätig sind, hat seit dem Jahr 2000 über 180 Clustersysteme mit insgesamt mehr als 4.000 Nodes und über 7.000 CPUs ausgeliefert. Anfang des Jahres 2003 implementierten die Entwicklungsingenieure von MEGWARE, als einer der ersten Lösungsanbieter überhaupt, die revolutionäre Infini-Band-Technologie in ein für Wissenschaftler nutzbares Linux Cluster.

Alle Cluster werden bereits im eigenen Fertigungsbereich in Chem-

nitz-Röhrsdorf komplett betriebsfertig installiert und bis ins Detail geprüft, bevor die Auslieferung an den Auftraggeber erfolgt. Ein siebentägiger Belastungstest bringt die Gewissheit, dass alle verwendeten Komponenten den hohen Anforderungen des 24-Stunden-Dauerbetriebs eines Clustersystems standhalten. Die Zertifizierung nach EN ISO 9001:2000 verpflichtet zu einem hohen Qualitätsstandard in allen Unternehmens-



Mitarbeiter des MEGWARE-Projektteams bei der abschließenden Qualitätskontrolle an einem Linux Cluster  
Foto: MEGWARE

bereichen und garantiert den Kunden Investitionssicherheit.

An eine besonders hohe technische Herausforderung denken die Spezialisten von MEGWARE noch heute mit großem Stolz. Im vergangenen Jahr entwickelten und lieferten sie ein Highperformance Linux System an das Center for Scientific Computing der Universität Frankfurt/Main. Das Herzstück dieser Anlage besteht aus 566 Prozessoren in modernster 64bit-Architektur und einem Plattenspeichersystem mit insgesamt 22 TeraByte Speicherkapazität. Die totale Rechenleistung dieses Parallelrechners, basierend auf Einzelprozessoranwendungen, beträgt 1,7 TeraFlop pro Sekunde - 1,7 Billionen Fließkommarechnungen pro Sekunde. Mit diesem Supercomputer steht den Wissenschaftlern im hessischen Hochleistungsrechnerverbund ein international wett-

bewerbsfähiges Arbeitsmittel zur Verfügung. Die Forscher untersuchen damit zum Beispiel kleinste Proteinstrukturen, simulieren die Entwicklung kosmischer Höhenschauer in der Erdatmosphäre und die Dynamik von Kollisionen schwerer Ionen, bei denen für eine kurze Zeitspanne Systeme erzeugt werden, die dem Zustand des Universums direkt nach dem Urknall entsprechen.

Im laufenden Geschäftsjahr

ren, was bei einem Aufprall passiert.

Auch die Industrie benötigt für ihre Produktentwicklungen sehr hohe Rechenleistungen, deren Bedarf in den nächsten Jahren noch rasant ansteigen wird. Dieser Trend lässt sich deutlich in der Fahrzeugindustrie erkennen, wo Crashesimulationen und Designvisualisierungen in den Produktentwicklungsprozess eingebunden sind. Die Volkswagen AG nutzt für diese Aufgaben bereits Linux Cluster von MEGWARE. Anwender in der Industrie profitieren vor allem von den umfangreichen Erfahrungen des Unternehmens aus Chemnitz und erhalten eine ausgefeilte, praxiserprobte Technologie. Gerd Rybarczyk, Geschäftsführer der Petrologic Geophysical Services GmbH, bringt das mit wenigen Worten zum Ausdruck: "Wir sind mit dem Durchsatz und auch mit der Qualität der Ergebnisse bisher sehr zufrieden, was auf optimale Software/Hardware Abstimmung zurückzuführen ist."

Highperformance Computing Systeme von MEGWARE stehen an Instituten, Universitäten und in der Industrie von Valencia bis Bern, in Nikosia, Rom, Zürich und Abu Dhabi, und natürlich auch in Deutschland. Momentan entwickelt das sächsische Unternehmen ein komplexes Management-System, welches zukünftig die Administrierung und Bedienung der Cluster noch weiter vereinfacht. Dieses System wurde während der diesjährigen Supercomputing Conference in Heidelberg einem internationalen Anwenderkreis vorgestellt und fand bereits erste Interessenten.

## Kontakt

MEGWARE Computer GmbH  
Geschäftsbereich HPC & Linux Cluster  
Nordstraße 19  
09247 Chemnitz OT Röhrsdorf

Telefon 03722/528-0  
Fax 03722/528-15  
E-Mail bernd.schache@megware.com  
[www.megware.com](http://www.megware.com)

# Simulation gegen Verbrennungen

## Per Hochleistungsrechner wird Schutzbekleidung überprüft

Bei Arbeiten an elektrischen Anlagen wie zum Beispiel Schaltkästen treten immer wieder Niederspannungs-Störlichtbögen auf: Die explosionsartige Energiefreisetzung kann dabei zu Unfällen mit schweren Verbrennungen führen. Für besonders gefährdete Personen gelten deshalb strenge Sicherheitsnormen, zu denen auch das Tragen von Schutzbekleidung zählt.

Die Prüfung und Zertifizierung von Schutztextilien sowie Forschung auf dem Gebiet der Hitzeschutzkleidung ist Bestandteil der Arbeit des Sächsischen Textilforschungsinstituts (STFI) Chemnitz. In Kooperation mit

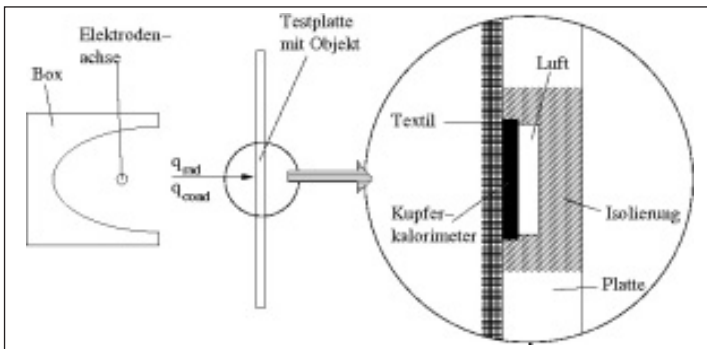
dem STFI entstand an der TU Chemnitz ein Simulationsprogramm zur Abschätzung des thermischen Schutzverhaltens von Textilien bei Störlichtbogeneinwirkung.

Zunächst wurde ein mathematisches Modell für den Wärmetransport betrachtet, wobei eine nichtlineare Wärmeleitgleichung mit Strahlungsquellterm zum Einsatz kam:

$$C^A(T) \frac{\partial T}{\partial t} - \operatorname{div}(\kappa(T) \cdot \operatorname{grad} T) = f_{\text{rad}}(G(t), T) \quad \text{für } t \in (0, t_{\text{end}}].$$

Für das direkte Problem, die Ermittlung des Temperaturverlaufs

im betrachteten Objekt aus den gegebenen Parametern, wurde ein numerischer Lösungsalgorithmus implementiert. Mit der einwirkenden Gastemperatur  $G(t)$  war allerdings eine wesentliche Parameterfunktion unbekannt, welche aus gegebenen Messdaten zu rekonstruieren war. Eine solche Rückwärtsberechnung bezeichnet man als inverses Problem. Um eine physikalisch plausible und gegenüber Datenfehlern möglichst wenig störanfällige Lösung des inversen Problems zu erhalten, wurden hierbei Regularisierungstechniken verwendet und am konkreten Beispiel untersucht.



Der Versuchsaufbau in der schematischen Darstellung und eine Hitzeschutzjacke nach dem Versuch



Quelle: Fakultät für Mathematik

Die numerische Praxis bei Umsetzung der Simulation ist dabei durch folgende Problemanforderungen gekennzeichnet:

- Wegen des zeitlichen Verlaufs der Temperaturentwicklung mit teils sehr schnellen Änderungen muss eine Zeitintegration mit vielen kleinen Zeitschritten durchgeführt werden.
- Pro Zeitschritt ist ein nichtlineares Gleichungssystem durch Linearisierungsschritte iterativ zu lösen.
- Wegen der Schwierigkeit zu bestimmen der Funktion  $G(t)$  erfordert die Behandlung der inversen Aufgabe eine große Zahl von Vorwärtsrechnungen.

Insgesamt ergibt sich die Notwendigkeit, viele Tausend großer Gleichungssysteme numerisch zu lösen. Eine solche praktische Aufgabenstellung wäre ohne den intelligenten Einsatz von effektiven numerischen Algorithmen sowie von Hochleistungsrechentechnik mit Parallelarchitektur, wie sie an der Technischen Universität Chemnitz zu finden ist, nicht lösbar.

*Prof. Dr. Bernd Hofmann, Professur Analysis-Inverse Probleme, Prof. Dr. Arnd Meyer, Dipl.-Math. Peter Steinhorst, Professur Numerische Mathematik & Dr. Wilfried Weinel, Professur Analysis*

# Neue Probleme verlangen neue Lösungen

## Professur Praktische Informatik erstellt Softwareentwicklungswerkzeuge für das Hochleistungsrechnen

Neue Anforderungen und Fragestellungen in Naturwissenschaft und Technik führen zu immer größeren Rechenzeitanforderungen, wenn zusätzlich zu Experiment oder Theoriebildung computergestützte Simulationen zum Einsatz kommen. Durch eine Vielzahl neuer Technologien steht dem Applikationsprogrammierer dafür heute eine breite Palette an hoher Rechenleistung zur Verfügung.

Neben innovativen Parallelrechnern wie beispielsweise dem IBM BlueGene umfassen diese Technologien immer mehr auch heterogene, verteilte Cluster-Systeme bis hin zu Grid-Umgebungen, die über das

Internet den Zusammenschluss von Ressourcen und Informationen unterstützen.

Gegenüber der Programmierung skalierbarer Parallelität auf bekannten herkömmlichen Parallelrechnern ist die Nutzung dieser neuen verteilten Rechenplattformen jedoch um ein Vielfaches komplexer, was zu der derzeit noch geringen Inanspruchnahme solcher Systeme führt.

### Neue Werkzeuge notwendig

Dies erzeugt die Notwendigkeit zur Schaffung neuer mächtiger Softwareentwicklungswerkzeuge, die den

Applikationsprogrammierer weitgehend von der parallelen und verteilten Entwicklungsarbeit befreien, aber trotzdem eine hohe Leistung der Applikationsprogramme garantieren. Ziel ist eine Entkopplung der Programmierung der Simulationsanwendung von der Programmierung der parallelen und verteilten Abarbeitungsstrategien, so dass sich der Anwender vollständig auf sein jeweiliges Anwendungsproblem und die Algorithmengestaltung konzentrieren kann.

Für die Informatik stellt diese Herausforderung ein innovatives Forschungsgebiet der Softwareentwick-

lung dar, das sich zum Ziel gesetzt hat, diese neuen Fragestellungen des Hochleistungsrechnens mit mächtigen Unterstützungswerkzeugen zur parallelen und verteilten Softwareentwicklung zu beantworten. Die Mitarbeiter der Professur Praktische Informatik der TU Chemnitz sind hieran aktiv beteiligt. Es entstehen neuartige Programmiersprachen, Compiler- und Transformationswerkzeuge, verteilte Laufzeitumgebungen, Visualisierungswerkzeuge und vielfältige Informationstools.

*Prof. Dr. Gudula Rünger  
Professur Praktische Informatik*

## News

### Thermodynamiker nutzen Simulation

Viele Jahre dominierten auf dem Gebiet der Technischen Thermodynamik Zustandsbeschreibungen von Systemen unter der Annahme von Gleichgewichtszuständen, die zu mehreren bekannten, für die Ingenieurarbeit geeigneten Diagrammen führten. Ergänzend dazu wird in jüngster Zeit die Beschreibung von Nichtgleichgewichtsprozessen mit einer hohen Auflösung der Vorgänge in Raum und Zeit sowie die Betrachtung immer komplizierterer Systeme wichtiger. Die Lösungen für diese Aufgabenstellungen sind beinahe ausschließlich nur noch auf numerischem Wege erreichbar.

Beiträge der Professur in den vergangenen Jahren waren zum Beispiel die numerische Simulation auf massiv parallelen Rechnern, wobei effiziente parallele Algorithmen für die numerische Simulation stark phasengekoppelter, disperser Mehrphasenströmungen erstellt wurden, wie beim Einspritzen von Diesel vorkommen.

Außerdem wurde eine Datenbasis zur kritischen Überprüfung von CFD-Ergebnissen für komplexe Innenraumströmungen aufgebaut. Die Verhältnisse in Mikroreaktoren wurden berechnet, die Strömung und Wärmeübertragung in porösen Stoffsystemen simuliert und eine ökonomische Bewertung thermodynamischer Systeme durchgeführt. Hierbei wurde die wirtschaftlich optimale Auslegung einer komplexen Kälteversorgungsanlage in Abhängigkeit von ihrer Dimensionierung gesucht.

Künftig werden die Mitarbeiter der Professur schwerpunktmäßig an der Simulation von Anlagensystemen im Bereich der Solarthermie und der Kraft-Wärme-Kälte-Kopplung sowie an der detaillierten Nachbildung und der Optimierung von Be- und Entladesystemen thermischer Energiespeicher arbeiten.

Prof. Dr. Bernd Platzer & Dr. Thorsten Urbaneck  
Professur Technische Thermodynamik

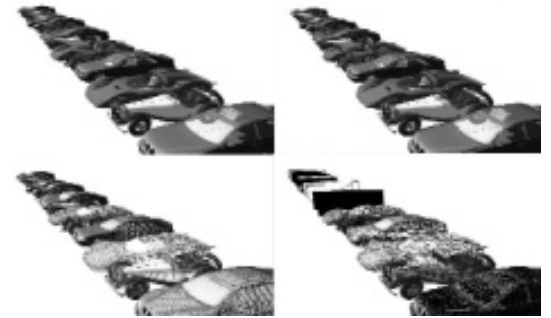
## Damit virtuelle Welten echter aussehen

### Mit clusterbasierter Echtzeitvisualisierung lässt sich visuelle Qualität steigern

Der aktuelle Stand der Technik begrenzt bei der Visualisierung komplexer virtueller Welten sowohl die Geschwindigkeit als auch die Auflösung und Größe der Darstellungen. Zur Lösung dieser Probleme muss der Übergang zu einem synchronisierten, parallelen Bild-erzeugungsprozess vollzogen werden.

Die Professur Graphische Datenverarbeitung und Visualisierung erforscht dabei die Parallelisierung auf zwei verschiedenen Ebenen: die ereignisgesteuerte Vorverarbeitung graphischer Modelle zum Zweck der Reduzierung ihrer Komplexität sowie die clusterbasierte Ansteuerung segmentierter Anzeigen zum synchronisierten Rendern der so vereinfachten Modelle. Die Reduktion graphischer Modelle erfolgt objektweise auf Knoten eines homogenen PC-Clusters in Abhängigkeit von den aktuellen Sichtparametern unter Anwendung hardwarebeschleunigter Verfahren. Im Ergebnis stehen Modelle zur Verfügung, die trotz der deutlich verringerten Komplexität eine gleich bleibend hohe Ähnlichkeit zum Original garantieren.

Die visuelle Darstellung solcher Modelle auf segmentierten Anzeigen erfordert einen so genannten Render-Cluster, dessen Knoten jeweils die Erzeugung eines Bildausschnitts und die Ansteuerung jeweils eines Segments der Anzeige vornehmen. Die an der Professur entwickelte parallele Renderingschnittstelle ermöglicht beliebigen OpenGL-Anwendungen die Bilderzeugung mit nahezu gleich bleibender Geschwindigkeit bei einer variablen Anzahl von Segmenten. Die Schnittstelle übernimmt



Die Bilder zeigen die fertig gerenderten Abbildungen der Originalszene (l.) und der vereinfachten Repräsentation (r.) jeweils als schattierte Graphik (oben) und als Drahtmodell (unten). Trotz erheblicher Reduzierung des Datenumfangs darf das gerenderte Ergebnis nicht wesentlich vom Original abweichen.

Quelle: Karsten Hilbert, Guido Brunnett "Hybrid LOD Based Rendering Approach for Dynamic Scenes", Proc. CGI 2004, IEEE Comp. Soc., pp. 274-277, ISBN 0-7695-2171-1

die Kommunikation der Knoten, die Synchronisation des Bildaufbaus für stereoskopische Anwendungen sowie die Anpassung der Bilderzeugung an nichtebene Bildflächen.

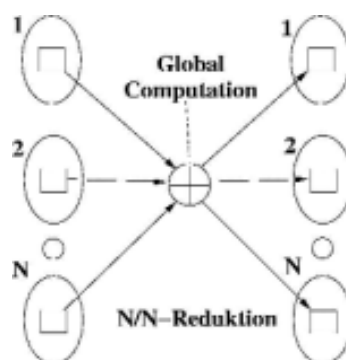
Damit ist erstmals die Voraussetzung zur Ansteuerung solcher Anzeigesysteme in beliebiger Auflösung und Diagonale geschaffen worden. Die gemeinsame Anwendung beider Verfahren ermöglicht die großflächige Visualisierung komplexer Modelle mit einer hohen visuellen Qualität in Echtzeit.

Dr. Mario Lorenz  
Professur Graphische Datenverarbeitung und Visualisierung

## Koordinierte Kommunikation

### Eine Hochleistungs-Message-Passing-Bibliothek unterstützt "Kollektive Operationen"

Parallele Algorithmen verlangen häufig koordinierte Kommunikationsoperationen zwischen parallelen Rechenprozessen. Zum Beispiel kann



Kollektive Operationen  
Grafik: Wolfgang Rehm

es sein, dass alle Prozesse kooperieren müssen, um eine verteilte Matrix zu transponieren. Diese globalen Operationen können von einem Programmierer unter Verwendung einfacher Sendefunktionen implementiert werden. Moderne Hochleistungs-Kommunikationsnetze für Parallelrechner bieten jedoch Unterstützung für spezielle "Kollektive Operationen", um wesentlich optimierte Implementierungen realisieren zu können. Dazu muss die gegebene Hardwareunterstützung von der verwendeten Kommunikationsbibliothek – wie beispielsweise die sich aktuell in der Entwicklung befindliche Open MPI-

Bibliothek – geschickt verwendet werden, um den gewünschten Optimierungseffekt erzielen zu können. Die damit verbundene Forschungsaufgabe ist überaus komplex und markiert ein innovatives Feld auf dem Gebiet hoch skalierender Parallelrechnerarchitekturen bzw. Hochleistungscluster. Insbesondere werden Konzepte und Bibliotheksmodule zur Optimierung nicht blockierender kollektiver Operationen im Rahmen der Open MPI-Entwicklung realisiert: einer Open "Source High Performance Message Passing"-Bibliothek.

Prof. Dr. Wolfgang Rehm  
Professur Rechnerarchitektur

# Das Ausfallrisiko begrenzen

## Finanzwissenschaftler nutzen Hochleistungsrechner zur Portfoliooptimierung

Seit der Entwicklung der modernen Portfoliotheorie durch Harry Markowitz 1952 ist die Berechnung optimaler Portfolios ein schwieriges Thema. Der erste, der mit dem Berechnen Probleme hatte, war Markowitz selbst. Ihm gelang es zwar, seine Theorie so plastisch zu beschreiben, dass sie sich schnell durchsetzte; aber wirklich berechnen konnte er mit den damaligen Computern ein optimales Portfolio nicht. Seinen Versuch mit nur zehn Wertpapieren brach er ab.

Trotz großer Leistungssteigerungen der Rechner sieht es heute nicht wesentlich anders aus. Noch immer sind die Rechenleistungen der Computer die wichtigste Begrenzung in der Erforschung der vielen Facetten, welche die Portfoliotheorie in sich birgt. Die Doktorandin an der Professur Finanzwirtschaft und Bankbetriebslehre, Denisa Cumova, musste deshalb für ihre Forschungszwecke die beschränkten Kapazitäten der

Professur verlassen und sich den leistungsfähigsten Rechnern der Universität zuwenden. Damit konnte sie zwar immer noch nicht all das rechnen, was sie gern berechnet hätte, denn jede neue Variante beanspruchte eine Rechenzeit von über acht Stunden; aber sie erzielte spektakuläre Ergebnisse, die eine fruchtbare Grundlage für die weitere Forschung an noch leistungsstärkeren Rechnern darstellen.

Ihr Projekt in Kurzform: Die Portfoliotheorie von Markowitz ist in den beiden Variablen  $\mu$  und  $\sigma$  verankert, was sich bei normal verteilten Renditen auch im normativen Sinne bewährt. Liegen stochastische Prozesse mit bestimmten abweichenden Verteilungen vor, dann kann man aber mit Ausfallvarianzen bessere Ergebnisse erzielen. Die Doktorandin überprüfte diese These mit realen Daten des globalen Finanzmarkts, die sie aus dem Informationssystem der Nachrichtenagentur

Reuters gewann. Sie schrieb ein Optimierungsprogramm und suchte damit die optimalen Portfolios, einmal mittels klassischem  $\mu$ - $\sigma$ -Ansatz, ein weiteres Mal mit ihrem eigenen ausfallrisikobasierten Ansatz. Die Ergebnisse entsprachen den Erwartungen: In Märkten mit tendenziell normalverteilten Renditen bringt der klassische Ansatz zufrieden stellende Ergebnisse. Dort aber, wo die von Frau Cumova als interessant eingeschätzten Verteilungen liegen, zeigte sich in der ex post-Analyse eine gewaltige Überperformance bis zum Faktor Fünf. Da der Ansatz der Doktorandin in keinem Fall schlechtere Ergebnisse liefert als der klassische Ansatz, kann den Banken deshalb empfohlen werden, im Bereich der Portfoliooptimierung regelmäßig die Überprüfung mit Hilfe von Ausfallrisikomaßen durchzuführen.

*Prof. Dr. Friedrich Thießen  
Professur Finanzwirtschaft und Bankbetriebslehre*

# OPAS-Objekte

## Zentraler Server für dezentrale Arbeit

Weil Softwarefirmen zunehmend dezentral arbeiten, steigt der Bedarf an Servern, auf denen Daten zentral gespeichert sind: Repositories. Dazu benötigt man Werkzeuge für eine vernetzte Mehrbenutzerumgebung. Sequenzielle Server haben hierbei Leistungsgrenzen, Technologien zur parallelen und verteilten Datenverarbeitung dagegen werden immer billiger und zugänglicher.

Im Projekt OPAS wurde der Prototyp eines objektorientierten Parallelservers für den Cluster an der TU Chemnitz entworfen und implementiert. Dieser kann als Repository für Objekte dienen. Die Methoden, Konzepte und Algorithmen können auch in die künftige CHiC-Cluster-Umgebung übertragen werden, da OPAS mit Hilfe aspektorientierter Technologie programmiert wurde, dies erleichtert seine Portierung.

*Prof. Dr. Petr Kroha  
Professur Informationssysteme und Softwaretechnik*

# Mit reduzierten Modellen gegen Komplexität

## Mit Verfahren der Numerischen Mathematik lässt sich der Rechenaufwand bei Simulationen verringern

In den Natur- und Ingenieurwissenschaften ersetzt die Computersimulation zunehmend das Experiment. Dabei wächst die Komplexität der zu simulierenden technisch-physikalischen Vorgänge stetig, insbesondere wenn neben der Simulation auch eine Optimierung, Regelung oder Steuerung des dynamischen Verhaltens erwünscht ist. Vergleicht man die Komplexität für eine Optimierung oder Steuerung eines physikalischen Vorgangs mit der für die Simulation desselben Prozesses, so steigt bei Verwendung herkömmlicher Algorithmen häufig die Rechenzeit mindestens quadratisch oder kubisch, der Speicheraufwand quadratisch an.

In der Arbeitsgruppe "Mathematik in Industrie und Technik" werden

Algorithmen untersucht, mit denen dieser "Curse of Dimensionality" durch Verwendung moderner Techniken der Numerischen Mathematik und Numerischen Linearen Algebra gebrochen werden kann.

Ein Schwerpunkt der Forschung sind Methoden der optimalen Steuerung und Regelung instationärer Prozesse, die durch gewöhnliche oder partielle Differentialgleichungen beschrieben werden. In einigen Bereichen konnten bereits Algorithmen angegeben werden, die die Komplexität stark reduzieren und zu Rechenzeiten führen, die sich denen für die Simulation annähern. Ein Beispiel ist die Steuerung von Wärmeleitvorgängen wie zum Beispiel der optimalen Abkühlung von Stahlprofilen. Dabei wird durch den

Einsatz geregelter Düsen eine deutlich schnellere Abkühlung als an Luft erreicht, wobei verschiedene Steuerungsstrategien zu verschiedenen Endtemperaturverteilungen führen.

Ein weiterer Ansatz zur Verringerung der Komplexität bei der Optimierung und Regelung, aber auch der Simulation, besteht darin, bereits bei der Modellbildung eine Reduktion der Freiheitsgrade vorzunehmen. Solche Verfahren der Modell- bzw. Dimensionsreduktion stellen einen weiteren Arbeitsschwerpunkt dar. In den vergangenen Jahren wurden zahlreiche Verfahren entwickelt und in Softwarebibliotheken ([www.tu-chemnitz.de/~benner/software.php](http://www.tu-chemnitz.de/~benner/software.php)) implementiert, die es erlauben, reduzierte Modelle hochkomplexer Problemstellungen mit

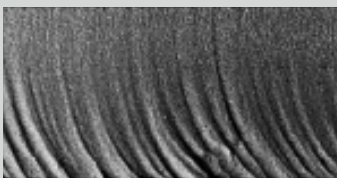
vorgegebenen Fehlertoleranzen zu berechnen. Die reduzierten Modelle erlauben dann oft eine Simulation oder Optimierung des Systemverhaltens in Echtzeit. Einige der zurzeit in Untersuchung befindlichen Anwendungen – zum Beispiel die Steuerung einer Werkzeugmaschine unter Einbeziehung ihres vollständigen FEM-Modells oder der Schaltkreisentwurf für VLSI/ ULSI Chips – werden dabei vom Einsatz des zukünftigen Chemnitzer Parallelrechners CHiC derart profitieren, dass erstmalig vollständige Computersimulationen für solche Vorgänge möglich werden.

*Prof. Dr. Peter Benner  
Arbeitsgruppe Mathematik in Industrie und Technik*

## Gegen Rillen

### Modellierung des abrasiven Wasserstrahlschneidens

Wasserabrasivstrahlschneiden ist eine innovative und flexible Technologie zur Bearbeitung verschiedener Materialien wie Keramik, Stein, Stahl, Titan oder Verbundmaterialien. Es kommt zum Beispiel im Automobilbau oder in der Raumfahrtindustrie zur Anwendung. Ein begrenzender Faktor für die Schnittgeschwindigkeit und die Schnittqualität ist die Ausbildung von Riefen und Rillen an der Schnittkante, die bei zu hohen Vorschubgeschwindigkeiten entstehen. Trotz intensiver Forschungen wurde dieser Strukturbildungsprozess bis vor kurzem nicht gut verstanden.



Schnitt durch gehärteten Stahl von etwa zwei Zentimetern Dicke. Die charakteristischen Riefen und Rillen sind deutlich zu erkennen. Foto: Fraunhofer IPA

In Kooperation mit dem Fraunhofer-Institut für Produktionstechnik und Automatisierung (IPA, Stuttgart) und der Universität Münster entwickelt und untersucht die Professur Komplexe Systeme und Nichtlineare Dynamik der TU Chemnitz Modellgleichungen (nichtlineare, partielle Differentialgleichungen vom Kuramoto-Sivashinski-Typ), die einerseits dieses Phänomen erklären können und andererseits Methoden bereitstellen, um die Riefenbildung zu unterdrücken.

Ähnliche Gleichungen beschreiben verschiedene Wachstums- und Abscheidungsprozesse, so dass die gewonnenen Resultate auch in diesen Gebieten relevant und zu einem gewissen Grad übertragbar sind.

Prof. Dr. Günter Radons  
Professur Komplexe Systeme und Nichtlineare Dynamik

## Die Lösung fürs “Handelsreisendenproblem”

### Physiker erproben parallele Optimierungsverfahren

Verfahren zur Lösung komplexer Optimierungsprobleme, wie sie zum Beispiel für die optimale Steuerung von Verbrennungsprozessen in Motoren vorliegen, sind ein wichtiger Baustein technologischen Fortschritts. Dabei hat sich die Anwendung von Konzepten der statistischen Physik in den vergangenen Jahren als eine sehr wirkungsvolle Methode gezeigt.

Die Aufgabe besteht darin, aus einer sehr großen Menge von Kombinationen diejenige zu finden, die eine als ‘Kosten’ oder auch ‘Energie’ bezeichnete Funktion minimiert. Problematisch sind dabei die auf Grund der Aufgabenstellung oft in großer Zahl auftretenden lokalen Minima dieser Funktion, die durch Barrieren voneinander getrennt sind. Die Barrieren werden über-

wunden, indem das “Energiegebirge” mittels sehr vieler “Zufallswanderer” erkundet wird, die mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit aus lokalen Minima entkommen können. Die Gesetze der statistischen Physik und die geschickte Steuerung der Zufallswanderer über so genanntes “Simulated Annealing”, “Threshold Accepting” und “Extremal Optimization” erlauben es, das globale Minimum mit großer Wahrscheinlichkeit zu finden.

Zur Verbesserung dieser so genannten “Stochastischen Optimierungsverfahren” untersuchen Physiker der Technischen Universität Chemnitz, wie die Steuerung der Zufallswanderer nachweisbar optimal gestaltet und somit leistungsfähige Optimierungsverfahren ent-

wickelt werden können. Dies erfordert die Untersuchung einer großen Anzahl an Optimierungsläufen mit verschiedenen Steuerungsmethoden, wozu parallele Simulationen auf Clustern durchgeführt werden. Die in Chemnitz weiterentwickelten Ensembleverfahren haben sich als besonders effektiv bei ihrer Implementierung für die an der Universität vorhandenen Cluster-Rechner erwiesen. Im Ergebnis konnte für verschiedene Optimierungsverfahren nachgewiesen werden, wie eine optimale Anwendung möglich ist. Beispielsweise können nun sehr große “Handelsreisendenprobleme” gelöst werden.

Dr. Steffen Seeger  
Professur Theoretische Physik

## Ohne Kittel und Bunsenbrenner

### Chemiker berechnen mit Computersimulationen den Mikrokosmos

Bei Chemie denkt man gewöhnlich an Labors und Wissenschaftler mit Schutzbrille und Kittel. In der Theoretischen Chemie sieht es aber ganz anders aus: Hier sind Rechner, Tastatur und Monitor die Arbeitsgeräte. Methoden zur Berechnung der Elektronenstruktur von Molekülen entwickelt eine Arbeitsgruppe, die seit April 2004 an der Technischen Universität Chemnitz besteht.

### Vielfalt an Möglichkeiten

Die Grundlagen der Theoretischen Chemie stammen aus der Theoretischen Physik. Die Lösung der Gleichungen ist nur mittels Verfahren aus der numerischen Mathematik möglich, die in Form von Computer-Programmen umgesetzt werden. So umspannt die Theoretische Chemie ein breites Themenspektrum, wobei die generelle Regel lautet: Je genauer die Ergebnisse sein sollen, desto komplizierter ist

das Modell dahinter und desto länger ist die Rechenzeit. Mit modernen Rechnern ist es beispielsweise möglich, die Eigenschaften von noch nicht existierenden Verbindungen vorherzusagen. Vor allem aber hat das Computermodell den Vorteil, dass man – anders als in ein echtes Molekül – in das Modell “hineinschauen” kann. So können über die Theorie Einblicke gewonnen werden, die zu tieferem Verständnis und zu neuen Ideen in der Forschung führen.

Im Mittelpunkt der Forschungsarbeiten an der TU Chemnitz stehen die so genannten korrelierten ab-initio-Methoden, die in den vergangenen 20 Jahren wegen ihrer hohen Genauigkeit stark an Popularität gewonnen haben. Der immense Rechenaufwand verhinderte bislang jedoch die Anwendung auf größere Moleküle, wie sie besonders für Biochemiker, in den Materialwissenschaften oder in der Nanotechnologie von Interesse sind.

Deshalb wird intensiv an Methoden gearbeitet, die über neue Ansätze mit geringem Rechenaufwand eine hohe Genauigkeit liefern. Neben der Entwicklungsarbeit spielt auch die Anwendung vorhandener Methoden eine wichtige Rolle. Die so genannte Dichtefunktionaltheorie, deren Entdecker im Jahr 1998 den Nobelpreis für Chemie erhielten, erlaubt es beispielsweise, auch komplexere Strukturen auf molekularer Ebene zu untersuchen oder gar zu entwickeln.

So haben heute die “Computer-Experimente” der Theoretiker in vielen Bereichen der Chemie und Physik Einzug gehalten und die Entwicklung neuer, leistungsfähiger Methoden wird in Zukunft immer mehr Türen für den Blick in den Mikrokosmos, in die Welt der Atome und Moleküle öffnen.

Dr. Alexander A. Auer  
Juniorprofessur Theoretische Chemie

# Alles in Unordnung

Professur Theorie ungeordneter Systeme untersucht, wie Elektronen gerinnen

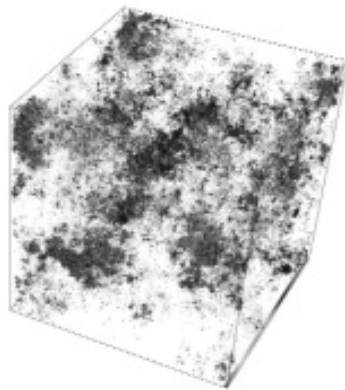
Kristalle wie zum Beispiel Diamanten sind meist wunderschön, was schon Marilyn Monroe in 'Blondinen bevorzugt' besang: "Diamonds are a girl's best friend". Auch für Festkörperphysiker waren kristalline Substanzen Jahrzehnte lang gute Freunde, besonders für Theoretiker, weil die hohe Symmetrie und Ordnung der Atome in Kristallen viele Berechnungen stark vereinfacht. Andererseits sind gerade ungeordnete Systeme besonders interessant, denn hier gerinnen die Elektronen.

Amorphe Materialien wie metallische Legierungen, Gläser, Gele, Keramiken, Gummi oder Plastik sind von großer technologischer Bedeutung. Um Ordnung in die Beschreibung derartiger ungeordneter Systeme zu bringen, werden im Rahmen der Profillinie 6 einfache Modelle mit Hilfe von umfangreichen numerischen Simulationen untersucht.

Auf Grund der Unordnung können sich Elektronen nicht ungestört bewegen, sondern zeigen mehr oder weniger deutlich Lokalisierungseigenschaften, die sich mit Hilfe von fraktalen Konzepten charakterisieren lassen. Von besonderem Interesse ist beispielsweise die elektronische Leitfähigkeit, vor allem beim Phasenübergang zwischen isolierendem und metallischem Verhalten. Da die Elektronen in der Quantenmechanik nicht (nur) als Teilchen, sondern auch als elektronische Welle beschrieben werden müssen, kommt es durch die unregelmäßige Anordnung der Atome zu vielfältigen Reflexionsprozessen, wobei durch konstruktive oder destruktive Interferenz mehr oder weniger starke Lokalisierungseffekte auftreten. Die Elektronenwelle verteilt sich dabei unregelmäßig und auf verschiedenen Größenskalen über das amorphe Material.

Eines der benutzten Simulationsverfahren beschreibt eine un-

geordnete Probe durch einen Würfel, der aus bis zu  $111 \times 111 \times 111 = 1.367.631$  Einzelwürfeln aufgebaut ist. Wird die Unordnung zu stark und ist die Energie des Elektrons zu hoch, dann treten die genannten Lokalisierungseffekte auf. Anschaulich kann man sich das etwa so vorstellen wie das Gerinnen von Milch, die, wenn sie zu sauer oder der Kaffee zu heiß ist, plötzlich ausflockt. Genauso flocken die elektronischen Wellenfunktionen aus, wenn man die Elektronen in



Multifraktale Elektronenflocken in einem Computermodell amorpher Materialien. Die Grauscala gibt die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Elektrons an der jeweiligen Raumposition wieder.

ein Material schüttet, das einen zu geringen Ordnungsgrad aufweist.

Quantitativ kann man dieses Phänomen durch fraktale Strukturen beschreiben, die die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen im Material wiedergeben. Das heißt, dass bestimmte Verteilungsmuster auf unterschiedlichen Größenskalen immer wieder auftreten bzw. dass sich die großen Elektronenflocken aus kleineren, immer wieder ähnlich gestalteten Flocken aufbauen. Charakteristisch für solche Fraktale ist, dass ihre Dimension, das ist eine Zahl, die den Zerklüftungsgrad des fraktalen Musters beschreibt, keine ganze Zahl mehr ist, sondern einen gebrochenen, fraktalen Wert annimmt.

Prof. Dr. Michael Schreiber  
Professur Theorie ungeordneter Systeme

# News

## Arbeitsmarkt 2030

Die demographische Entwicklung hat gravierende Auswirkungen auf den Arbeitsmarkt. Insbesondere kommt es aufgrund des Geburtenrückgangs zu einer quantitativen Verringerung des Arbeitsangebots. Die Dynamik des Arbeitsmarktes wird aber durch eine Vielzahl weiterer Faktoren beeinflusst, zum Beispiel durch Änderungen des Wanderungsverhaltens, der Pendlerströme, der Erwerbsbeteiligung usw. Der Einfluss dieser Faktoren soll an der TU Chemnitz umfassend in einem System Dynamics Modell dargestellt und simuliert werden. Ziel ist es, die Entwicklung in den Jahren 2005 bis 2030 möglichst genau zu beschreiben, die Größe von Unsicherheitsbereichen abzuschätzen und Optionen für die politische Beeinflussung des Prozesses aufzuzeigen.

Prof. Dr. Klaus Dieter John  
Professur Wirtschaftspolitik

## Numerische Berechnungen für die Nanoelektronik

Die Berechnung der elektronischen Eigenschaften von Materialien und Strukturen für die Nanoelektronik führen in den atomaren Bereich, das heißt es müssen aus ersten physikalischen Prinzipien abgeleitete ab-initio-Methoden angewendet werden, bei denen es auf die Position und das Verhalten jedes einzelnen Atoms ankommt. Dadurch steigt die Datenmenge und der Rechenaufwand enorm an. Zur Bewältigung dieser Berechnungen bedarf es eines Höchstleistungsrechners. An der Technischen Universität Chemnitz wird dafür das Chemnitzer Linux-Cluster (CLiC) eingesetzt.

Vor zehn Jahren noch konnten die meisten ab-initio-Methoden nur Systeme mit wenigen Atomen simulieren. Durch die Benutzung von Pseudo-Potenzialen und durch die gesteigerte Rechenleistung heutiger Computersysteme sowie die Verwendung effizienter numerischer Algorithmen ist es heute möglich, Systeme mit wesentlich mehr Atomen numerisch zu simulieren.

Durch die enge Zusammenarbeit mit der Fakultät für Informatik und der Halbleiterindustrie wird es möglich, diese Entwicklungen weiter voranzutreiben. Dabei liegt der Schwerpunkt auf der Entwicklung neuer, hocheffizienter paralleler Algorithmen zur Simulation einiger tausend Atome (siehe auch Profillinie 1, Seiten 3 - 10).

Prof. Dr. Christian Radehaus  
Professur Opto- und Festkörperelektronik

## Verformung ohne Berührung

Für den Entwurf neuartiger Umformverfahren, die berührungslos über die magnetische Kraftwirkung eine Verformung des Werkstücks erzielen, sind geeignete Berechnungsverfahren erforderlich, die eine Vorhersage über die Strom- und Kraftverteilung beim Umformprozess ermöglichen. Die Professur Allgemeine und Theoretische Elektrotechnik stellt die Berechnung des Schaltvorgangs für ein magnetisches Umformverfahren dar (transiente dreidimensionale Wirbelstromberechnung). Diese entstand in Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer-Institut Werkzeugmaschinen und Umformtechnik (IWU).

An der Professur wurde ein alternatives Verfahren zur Berechnung von Induktionsphänomenen entwickelt, die so genannte Finite-Netzwerk-Theorie (FNM). Diese Methode besitzt den Vorteil, dass sie nur elektrisch leitende Gebiete in die Berechnung einschließt. Die elektrisch leitenden Gebiete werden in Widerstandselemente mit induktiver Kopplung zerlegt. Es entsteht ein elektrisches Netzwerk mit induktiver Kopplung, in dem die Ströme einschließlich der Wirbelströme über geeignete numerische Verfahren berechnet werden können.

Prof. Dr. Abbas Farschtschi  
Professur Allgemeine und Theoretische Elektrotechnik

# Schnelle Grids

## Optimierte Software beschleunigt Hochleistungsrechner

Einen wesentlichen Platz in der Software-hierarchie eines Hochleistungsrechners, einem so genannten "Computing Grid", nimmt das Betriebssystem ein. Es ist verantwortlich für die Koordination der parallelen Abläufe auf jedem Knotenrechner des Grids, verwaltet dessen Ressourcen und stellt die Basis zur Sicherung der Systemintegrität. Zusätzlich bietet das Betriebssystem auch Dienste und Abstraktionen für höhere Schichten an, um mit der Hardware zu kommunizieren, zum Beispiel so genannte Gerätetreiber.

Häufig wird Linux als Betriebssystem für die Knoten eines Grids genutzt. Die freie Verfügbarkeit der Quelltexte sowie die Existenz ebenfalls frei verfügbarer Softwarewerkzeuge wie der GNU Compiler Collection erlauben es zum einen, Linux an die Erfordernisse des Grid Computing optimal anzupassen: So können zum Beispiel nicht benötigte Komponenten und Dienste eliminiert werden, damit den Nutzerprozessen ein Höchstmaß an Rechenleistung und Speicherkapazität zur Verfügung steht. Zum anderen aber kann das Betriebssystem auch mit zusätzlichen Funktionen erweitert werden, was Veränderungen in seiner Struktur zur Folge hat.

Mitarbeiter der Juniorprofessur Echtzeit-Systeme sowie der Professur Rechnerarchitektur an der Technischen Universität Chemnitz arbeiten zurzeit gemeinsam an der Verbesserung der Kommunikationsinfrastruktur von zukünftigen Grids. Ausgangspunkt sind Dienste des Betriebssystems, die für die Hochgeschwindigkeitskommunikation notwendig sind, jedoch verhältnismäßig viel Ausführungszeit benötigen und damit die erreichbare Kommunikationsbandbreite beschränken. Diese Dienste werden zunächst analysiert und dann durch gezielte Manipulationen der Softwarestruktur beschleunigt. Darüber hinaus versuchen die Wissenschaftler, durch die Verlagerung von Teilen der Applikation in den privilegierten Modus des Prozessors die Kommunikationsbandbreite weiter zu erhöhen.

Ziel der Forschungsarbeiten ist letztlich, die durch das jeweilige Medium – beispielsweise die populäre InfiniBand-Schnittstelle – angebotene Kommunikationsleistung bestmöglich an die Rechenprozesse weiterzugeben und die Verluste durch das Betriebssystem zu minimieren.

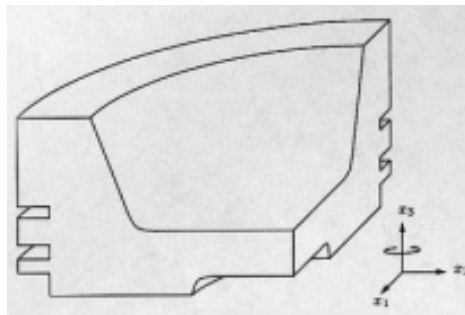
Dr. Robert Baumgartl  
Juniorprofessur Echtzeit-Systeme &  
Torsten Mehlan  
Professur Rechnerarchitektur

# Diskretisierung bei komplizierten Daten

## Angepasste Finite-Elemente-Methode zur numerischen Simulation

Die numerische Simulation eines technischen oder naturwissenschaftlichen Problems führt in vielen Fällen über die Modellierungsstufen "Physikalisch-technisches Modell", "Mathematisches Modell" und "Numerik des mathematischen Modells" zu einer auf dem Computer berechneten Näherungslösung. Ziele der Simulation realer Prozesse sind vor allem die genäherte Berechnung der Problemgröße (direkte Aufgabe), die Modellbewertung sowie die Ermittlung von Parametern zur Anpassung des Modells an die Realität (inverse Aufgabe).

Eine große Zahl von Problemen der Praxis – unter anderem in der Festkörper- und Strömungsmechanik oder für die Wärmeleitung – wird durch Randwertaufgaben für partielle Differentialgleichungen beschrieben, die sowohl bei komplizierten Daten als auch bei ihrer schnellen Lösung auf Hochleistungsrechnern eine besondere Herausforderung darstellen.



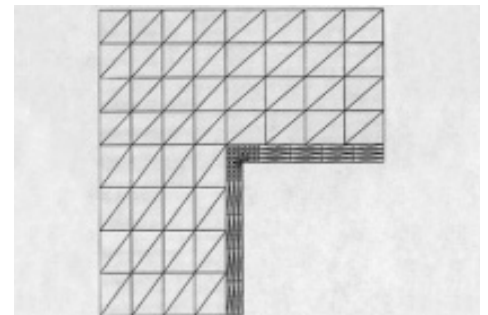
Viertel eines Kolbenoberbauteils  
Grafik: Professur Angewandte Mathematik

Zum Beispiel kann die Geometrie des Gebietsrandes einer Randwertaufgabe Ecken (2D, 3D) oder Kanten (3D) aufweisen, die zu Singularitäten oder zu einer starken Anisotropie der Lösung führen. Das bedeutet, es treten große und sehr unterschiedliche, zum Teil nicht beschränkte Ableitungen der Problemgröße in verschiedene Raumrichtungen auf. Ebenfalls kann es passieren, dass die Koeffizienten der Differentialgleichung wegen abrupten Materialänderungen einen Sprungcharakter entlang eines geometrisch komplizierten "Interface" haben und damit ebenfalls Singularitäten und Anisotropie bewirken.

Die Phänomene sehr großer oder sehr unterschiedlich großer Ableitungen in verschiedene Raumrichtungen sind typisch für Aufgaben der Praxis. Sie vermindern die Genauigkeit von Standarddiskretisierungen und erfordern angepasste Finite-Elemente-Diskretisierungen. An der Professur Angewandte Mathematik wurden solche

Diskretisierungen – zum Teil als Projektrealisierung im SFB 393 mit weiteren Kollegen der Fakultät – entwickelt, mathematisch begründet und implementiert:

1. Finite-Elemente-Diskretisierungen auf der Basis der lokalen Netzverfeinerung für Gebiete mit einspringenden Ecken, desgleichen für Gebiete mit einspringenden Kanten in 3D mittels anisotropen Diskretisierungen.
2. Fourier-Finite-Elemente Approximationen (Fourier Dekomposition kombiniert mit der Finite-Elemente-Methode) zur optimalen Approximation von Kanten- und Interfacesingularitäten in 3D sowie gleichzeitig zur parallelen Lösung dreidimensionaler Probleme auf axialsymmetrischen oder prismatischen Gebieten mit folgenden Vorteilen: Die 3D-Probleme werden auf endlich viele Aufgaben in 2D zurückgeführt. Diese sind entkoppelt und werden parallel gelöst (Parallelrechner), zum Beispiel bei der Berechnung des nichtaxial-



Isotrop-anisotrope Mortarnetzverfeinerung  
Grafik: Professur Angewandte Mathematik

symmetrischen Temperatur- und Verschiebungsfeldes von Kolbenoberbauteilen (siehe linke Grafik).

3. Mortar-Methoden (approximatives "Verkleben" un stetiger Finite-Elemente-Ansätze) für Zerlegung eines Gebietes in mehrere Teilgebiete, deren Triangulationen auf dem inneren Rand der Gebietszerlegung nicht konsistent in den Knoten sind ("nonmatching meshes"). Mortar-Methoden zur Kopplung geometrisch nichtkonformer Triangulationen besitzen die Vorteile, dass die Netzgenerierung in den Teilgebieten unabhängig voneinander und damit parallel erfolgen kann, dass unterschiedliche Diskretisierungstechniken in den Teilgebieten verwendet werden können und isotrope Netze mit anisotropen Netzen ohne Übergangzone – und damit sehr einfach – gekoppelt werden können (siehe rechte Grafik).

Prof. Dr. Bernd Heinrich  
Professur Angewandte Mathematik