

ANDREAS SCHRÖDER

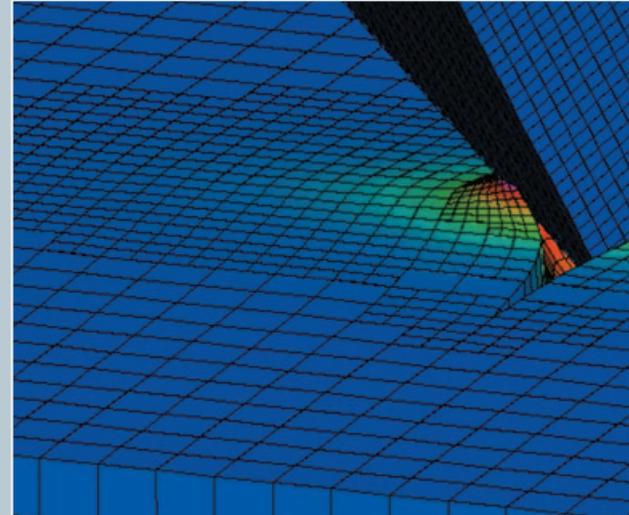
Das »Center of Computational Sciences Adlershof«

Interdisziplinäres Zentrum der Humboldt-Universität

Faszination Computational Sciences

Nach langer Rechnung stoppt das Computerprogramm. Sebastian Wiedemann, Doktorand am Institut für Mathematik der Humboldt-Universität, blickt auf eine farbenfrohe Computergrafik am Monitor. Zu sehen ist die Simulation eines winzigen Schleifkorns aus Diamant, das eine Furche in ein Stück Metall gräbt. Ingenieure, mit denen der Doktorand in einem interdisziplinären Projekt der Deutschen Forschungsgemeinschaft zusammenarbeitet, wüssten nur zu gerne, welche Kräfte am Schleifkorn wirken. Weil Messvorrichtungen den Schleifvorgang stören, können diese Kräfte nicht experimentell bestimmt werden. Die Simulation im Computer ist der einzige Weg und der Grund für die interdisziplinäre Kooperation des Mathematikers mit den Ingenieuren (vgl. Infobox 1).

Computersimulationen wie diese zur Berechnung aussagekräftiger Grafiken von physikalischen Größen werden erst durch eine Kette von ineinandergreifenden Forschungsarbeiten ermöglicht, an denen viele Wissenschaftler unterschiedlicher Fachrichtungen mitwirken und die unter der Überschrift *Wissenschaftliches Rechnen* oder *Computational Sciences* zusammengefasst werden (vgl. Infobox 3 – Grafik aus dem SCALE-Report der US-amerikanischen Regierung). Zwei Faktoren rücken diese neue Disziplin mehr und mehr in den Fokus natur- und ingenieurwissenschaftlicher Forschung. Einerseits bedingt die zunehmende Mathematisierung der Na-



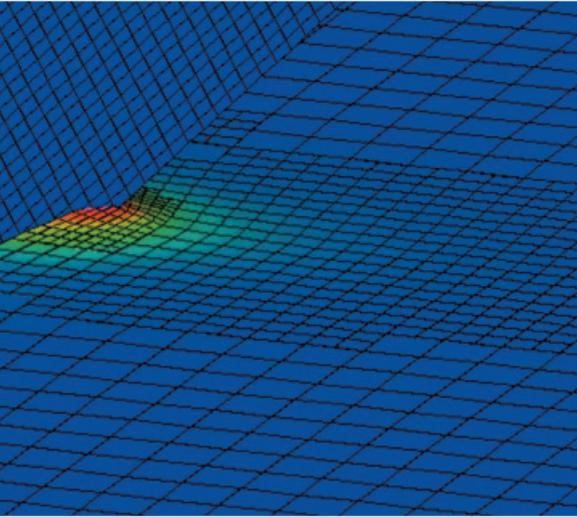
Infobox 1

Numerische Simulation und adaptive Finite-Elemente-Methoden

Die Größe von Prozesskräften spielt eine wichtige Rolle bei der Steuerung von Verfahren in der Fertigungstechnik, z.B. beim Werkzeugschleifen. Um diese Kräfte nicht aufwändig experimentell bestimmen zu müssen, benutzt man mathematische Modelle. Dabei geht man davon aus, dass sich die Spannungen im Material, die während des Eindringens einzelner Schleifkörner in die Oberfläche entstehen, zu den Prozesskräften aufsummieren. Um den Rechenaufwand so gering wie möglich zu halten, werden nur einzelne, re-

turwissenschaften einen Grad der Abstrahierung, der Erkenntnisse rein virtuell und ohne Experimente ermöglicht. Der Computer steht als Werkzeug bereit, die Idee des virtuellen, simulierten Experiments in die Tat umzusetzen. Andererseits ist der Computer selbst einer beispiellosen Entwicklung unterworfen. Rechen- und Speicherkapazität von Großrechenanlagen von vor dreißig Jahren sind heute in jedem Smartphone zu finden. Hinzu kommen enorme Entwicklungen in der Software. Umfangreiche Programmbibliotheken für unterschiedlichste wissenschaftliche Anwendungen stehen nunmehr zur Verfügung. Aber auch die Konzepte des Softwaredesigns und die Modellierung von Daten wurden in den letzten Dekaden mehrfach revolutioniert.

Wissenschaftliches Rechnen hat viele Facetten, seine Grenzen sind nicht leicht zu bestimmen. Da sind zum einen die Entwicklung von mathematischen Algorithmen, ihre Abbildung auf dem Computer sowie die theoretische wie praktische Verifizierung – die Algorithmen sollen auch bei wechselnden Eingabeparametern stets das richtige Ergebnis liefern. Zum anderen ist ein physikalischer Prozess zu si-



präsentative Schleifkörper betrachtet und die entstehenden Spannungen mit Hilfe von Finite-Elemente-Methoden (FEM) berechnet (siehe Bild). Zur Effizienzsteigerung werden heutzutage adaptive Finite-Elemente-Methoden eingesetzt, bei denen gezielt der Rechenaufwand in den Bereichen erhöht wird, in denen die unvermeidbare Rechengenauigkeit von numerischen Verfahren, der Diskretisierungsfehler, am größten ist. Adaptive Finite-Elemente-Methoden bilden ein wichtiges Forschungsgebiet der Arbeitsgruppen »Numerische Mathematik« (Prof. Carstensen, Institut für Mathematik) und »Computational Mathematics« (Prof. Schröder, Institut für Mathematik).

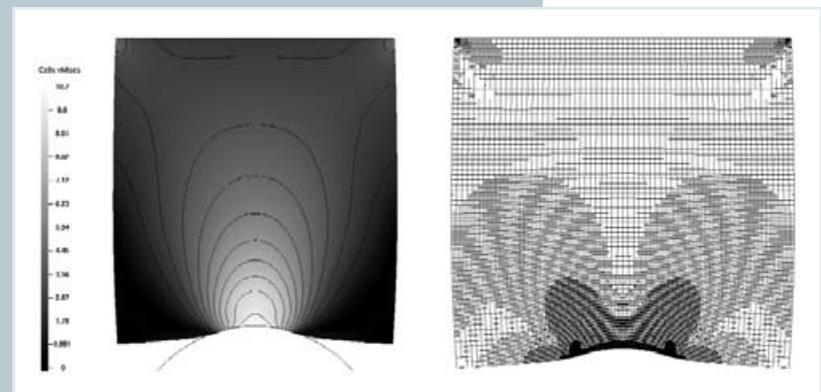
mulieren. Dieser erfordert eine geeignete mathematische Modellierung sowie Verfahren zur Visualisierung und Interpretation der berechneten Ergebnisse. Vor allem die Überführung der mathematischen Gleichungen in eine computer-gerechte Beschreibung, die Diskretisierung, ist ein schwieriges Unterfangen. In seiner binären Beschränktheit kann der Computer nur mit endlichen Werten umgehen und verfügt nur über endlich viel Speicherplatz. Das mathematische Konstrukt des »Unendlichdimensionalen« ist dem Computer fremd (vgl. Infobox 2 – Diskretisierungsverfahren). Ein weiteres Thema ist die Rechenzeit, die der Computer für eine Simulation benötigt. Die Hoffnung, dass gemäß dem Moore'schen Gesetz zukünftige Rechenpower schnelle Al-

Infobox 2
Diskretisierungsverfahren

Mathematische Modelle sind oft Anfangswertaufgaben (AWRA) mit partiellen Differentialgleichungen, die Lösungen in einem unendlichdimensionalen Vektorraum besitzen, der mathematisch sehr abstrakt formuliert, aber im Prinzip verstanden ist. Computer können nur mit endlich vielen Gleichungen umgehen und so muss man diese ARWA durch ein diskretes Analogon approximieren. Dabei kann man einen Diskretisierungsfehler strukturell nicht vermeiden. Die a priori und a posteriori Abschätzung dieses Fehlers und die geschickte Steuerung einer Folge von Diskretisierungen durch Auflösen immer feinerer Strukturen mit Hilfe von adaptiven Multilevelverfahren sind Arbeitsgebiete der Angewandten Mathematik in Adlershof.

Die Bilder zeigen die Simulation eines einfachen Kontaktproblems mit adaptiven Finite-Elemente-Methoden: Ein viereckiges Objekt wird gegen

ein Hindernis (unterer Bogen) gedrückt. Die dabei auftretenden Spannungen sind links im Bild zu sehen. Das rechte Bild zeigt ein adaptives Gitter, in dem die Strukturen in der Nähe des Kontaktbereichs adaptiv aufgelöst werden. Opti-



male Komplexität von adaptiven Verfahren ist für das Teilproblem ohne Kontakt erst seit ein paar Jahren mathematisch verstanden.

gorithmen überflüssig macht, ist trügerisch. Effizienz kann nicht allein durch bessere Hardware erreicht werden (vgl. Infobox 4 – das Mooresche Gesetz). Dass durch die Verbesserung eines Algorithmus die Effizienz systematisch erhöht werden kann, zeigt die Anwendung von adaptiven Verfahren: Der nicht zu vermeidende Fehler zwischen der physikalischen Größe und ihres diskreten Pendant im

Computer ist in der Regel ungleichmäßig verteilt. Überall mit gleichem Aufwand zu rechnen, ist offenbar nicht effizient. Eben dort, wo der Fehler groß ist, muss intensiver gerechnet werden, muss die Zahl der Variablen in der Diskretisierung erhöht werden. Wo und in welchem Umfang der Rechenaufwand zunehmen muss, wird in vollautomatischen, adaptiven Verfahren ganz gezielt ermittelt.



Interview mit Prof. Dr. Carsten Carstensen

Geschäftsführender Direktor des »Center of Computational Sciences Adlershof«

Humboldt-Spektrum: Was ist ein Computational Scientist?

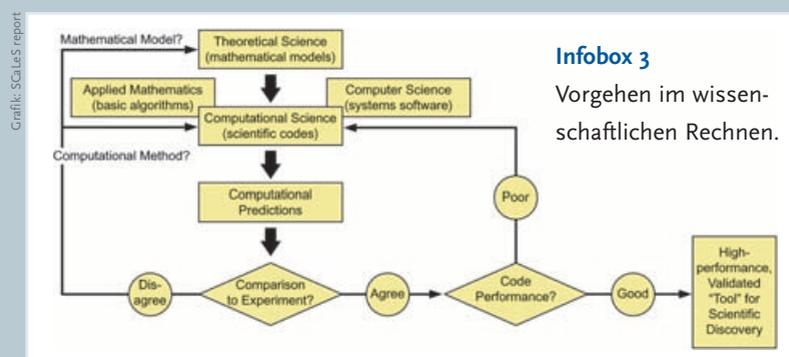
Carstensen: Kern der Computational Science ist die anwendungsbezogene Entwicklung von Algorithmen zur numerischen Simulation. Ein Computational Scientist beschäftigt sich mit Fragestellungen aus mehreren akademischen Fächern wie den Natur- und Ingenieurwissenschaften, angewandte Mathematik und Informatik. Das Diagramm aus dem SCALE-Report (siehe unten) illustriert den genauen Zusammenhang.

Humboldt-Spektrum: Handelt es sich dabei um eine neue akademische Disziplin?

Carstensen: Im Zeitalter der Universalgelehrten waren verschiedene Disziplinen sehr wohl noch in einer Person vereint – Newton war Mathematiker und er war Physiker, Gauß war Mathematiker und hat die Landvermessung revolutioniert, also Vermessungsingenieur, um nur zwei Beispiele zu nennen. In der Diversifizierung der Wissenschaften haben sich immer wieder neue Disziplinen gebildet. Solche Entwicklungen werden auch in Zukunft immer wieder vorkommen und sind für die Computational Science auch geboten. Ein jüngeres Beispiel ist die Informatik. Das US-amerikanische President's Information Technology Advisory Committee (PITAC) hat im Juni 2005 dazu radikale Schritte angemahnt. Ich zitiere mal aus dem Original wörtlich: »Traditional disciplinary boundaries within academia ... inhibit the development of effective research and education in computational science.« Und dann kommt Klartext: »universities must

significantly change their organizational structures to promote and reward collaborative research that invigorates and advances multidisciplinary science.«

Humboldt-Spektrum: Was bedeutet diese starke Aussage des PITAC-Reports für das CCSA?



Hinweis
Die Grafik ist dem SCALE-Report der US-Regierung entnommen.
Quelle: www.cs.odu.edu/~keyes/scales/volume1_3oodpi.pdf

Bei all dem wird offensichtlich, dass wissenschaftliches Rechnen ein hohes Maß an Interdisziplinarität erfordert. Simulationsverfahren, die von Naturwissenschaftlern oder Ingenieuren eingesetzt werden, können vielfach erst durch das Expertenwissen aus den Methodenwissenschaften, also Mathematik und Informatik, verstanden oder verbessert werden. Ein Beispiel liefert die bereits beschriebene Adaptivität:

Die Finite-Elemente-Methode (FEM), ein Diskretisierungsverfahren für partielle Differentialgleichungen, wird zur Simulation vieler Anwendungen der Natur- und Ingenieurwissenschaften eingesetzt und ist mittlerweile ein unentbehrliches Werkzeug. Durch den Einsatz adaptiver Techniken (adaptive FEM) kann die Effizienz der Simulationsverfahren signifikant erhöht werden (vgl. Infobox 1,2,5). Ein weiteres

Carstensen: Die Humboldt-Universität hat mit der Einrichtung von interdisziplinären Zentren schon einen sehr innovativen Algorithmus zur Erneuerung und Erweiterung traditioneller akademischer Disziplinen etabliert. Unser junges Zentrum CCSA ist angehalten, diese anspruchsvolle Vision einer multidisziplinären Computational Science mit Inhalten zu füllen. Es genügt nicht, eine bunte Mischung von hochdekorierten Wissenschaftlern aus unterschiedlichen Disziplinen immer nur paritätisch an einen Tisch zu setzen, sondern Projekte müssen in den Vordergrund geschoben werden. Computational Science heißt für mich eben knapp formuliert: Tun was nötig ist, um ein Problem zu lösen. Die organisatorische Herausforderung allerdings ist es, aus dem Stand sowohl Zeit als auch Gelder sowie geeignete Mitarbeiter für Projekte aufzutreiben und zu motivieren, in denen dann auch tatsächlich interdisziplinär kooperiert wird. Einfacher wäre es, wie bisher nebeneinander her zu arbeiten. Mit internationalen Partnern z.B. in Korea oder Florida wollen wir diese weltweit dringende Herausforderung angehen und den Computational Sciences eine neue Ausbildungsplattform mit der Vision einer »Humboldt School on Computational Sciences« geben. Bis dahin ist es aber noch ein weiter Weg – schließlich geht es auch darum, traditionell gewachsene Grenzen der akademischen Disziplinen aufzuweichen und zu überwinden.

Humboldt-Spektrum: Wie bringen Sie Ihre persönliche Forschung im CCSA ein?

Carstensen: Entgegen der landläufigen Meinung, die revolutionäre Leistungssteigerung in der Hardware sei für die High-Performance-Computersimulationen verantwortlich, gibt es eine wenigstens gleich wichtige Leistungssteigerung auf der Seite der Software, die allerdings öffentlich weniger wahrgenommen wird. Auch bei der Gültigkeit des Mooreschen Gesetzes zeigt die Infobox 4 die dringende Notwendigkeit von Algorithmen optimaler Komplexität. Innerhalb von nichtlinearen Problemen beschäftige ich mich mit adaptiven Algorithmen zur optimalen Diskretisierung mit dem Ziel optimaler Komplexität. Beispiele aus der Computational Mechanics in Infobox 1 und 2 illustrieren, dass und wie dieses in praxi tatsächlich möglich ist. Im CCSA versuche ich, adaptive Algorithmen in andere numerische Anwendungen und computerorientierte Wissenschaften zu tragen. Optimalität basiert dabei auf speziellen Eigenschaften, die nur in Kooperation mit den Spezialisten der jeweiligen Anwendungen als solche identifiziert und im Algorithmus integriert werden können.

Beispiel sind Modellierungssprachen und metamodel-basierte Applikationen aus der Informatik. Maßgeschneidert für eine bestimmte physikalische Anwendung bringen sie Simulationsverfahren, Experiment und Visualisierung in Einklang. Ein Beispiel aus der Nano-Optik ist in Infobox 5 zu sehen.

Im Idealfall arbeiten Methodenwissenschaftler mit ihren anwendungsorientierten Kollegen aus den Natur- und Ingenieurwissenschaften Hand in Hand und überwinden dabei die von ihrem Fach historisch gewachsenen Grenzen. Die angewandte Mathematik und die Informatik haben sich mehr und mehr zu

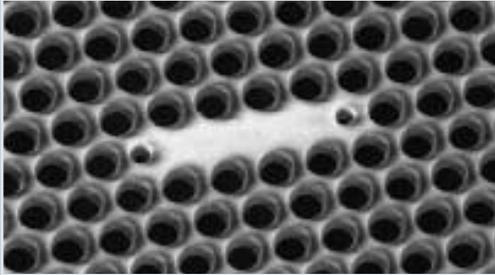
Infobox 4 Das Mooresche Gesetz

Angesichts steigender Computerhardwareleistungen scheint die Notwendigkeit für noch schnellere Software nicht wirklich dringlich. Das Mooresche Gesetz hat der Intel-Chef um 1965 wohl auch zu Werbezwecken aufgestellt (vgl. <http://www.intel.com/technology/mooreslaw/>). Es besagt, dass Speicherplatz und Rechengeschwindigkeit exponentiell wachsen. Es lässt sich beobachten, dass sich beide Kenngrößen der Computerleistung etwa alle 2 Jahre verdoppeln. Zwar wird dieses Gesetz in den nächsten Jahrzehnten mehr und mehr an Gültigkeit verlieren, da die Minimalisierung der Chiptechnologie bestimmte atomare Grenzen nicht überschreiten kann, die Notwendigkeit schneller Algorithmen ergibt sich aber bereits heute schon. Die nachfolgende Rechnung nach Wolfgang Hackbusch »From classical numerical mathematics to scientific computing. Proceedings of the International Congress of Mathematicians, Vol. I (Berlin, 1998). Doc. Math. 1998, Extra Vol. I, 235–254« macht dieses deutlich:

Der Speicherplatz $Memory(t)$ und die Rechengeschwindigkeit $Speed(t)$ wachsen exponentiell in der Zeit t mit einer Halbwertszeit T , d.h. für alle Zeitpunkte t gilt $Memory(t+T)=2Memory(t)$ und $Speed(t+T)=2Speed(t)$. Bei einer Verdopplung alle 2 Jahre ist $T=2$.

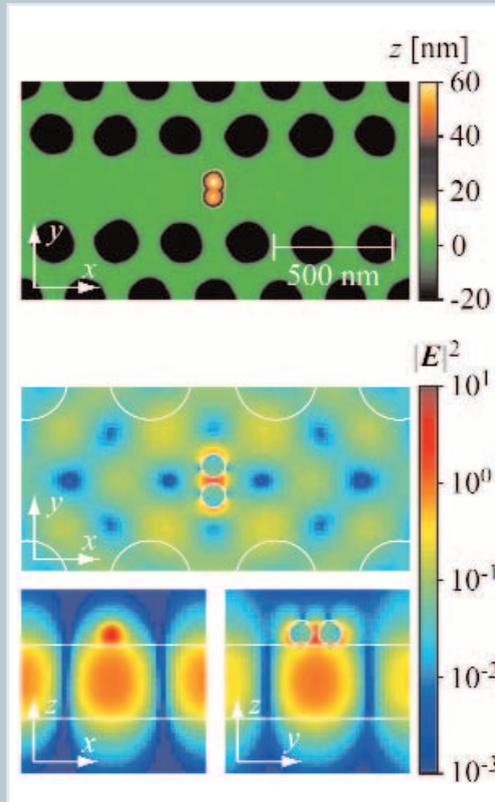
Algorithmen werden über ihre Komplexität klassifiziert: Wenn die Problemgröße N in praxi z.B. mit der Speicherkapazität identifiziert wird, ist die Anzahl der Operationen, die ein Algorithmus der Komplexität $\alpha \geq 1$ benötigt: $Operationenzahl=N^\alpha=Memory(t)^\alpha$. Die Rechenzeit $CPU(t)$ berechnet sich aus $CPU(t)=Operationenzahl(t)/Speed(t)$. Es gilt demnach $CPU(t)=Memory(t)^\alpha/Speed(t)$. Das bedeutet, dass sich die Rechenzeit bei Algorithmen der Komplexität $\alpha > 1$ ebenfalls exponentiell verhält: $CPU(t+T)=(2Memory(t))^{\alpha-1} CPU(t)$

Keine bekannte Anwendung erlaubt Wartezeiten über 24 Stunden, im Gegenteil, Simulationen z.B. zur Steuerung eines Flugzeugs werden in Echtzeit erhofft. Daraus folgt, dass lineare Algorithmen mit der Komplexität $\alpha=1$ erforderlich sind, die jedes Datum wenigstens einmal aber eben nicht deutlich häufiger im Algorithmus aufrufen dürfen. Vom Gauß-Algorithmus, der zur Lösung von linearen Gleichungssystemen mit vollbesetzten Matrizen eingesetzt wird, ist die Anzahl $O(n^3)$ Operationen bekannt, was weit von linearer Komplexität entfernt ist. Dieses Beispiel illustriert, dass nur anwendungsspezifische Situationen lineare Komplexität überhaupt möglich machen und adaptive Multi-levelverfahren in den Computational Sciences überall eingesetzt werden müssen.



Infobox 5 Hybride nanophotonische Strukturen

Nanophotonische Strukturen sind als essentielle Bestandteile integrierter optischer Systeme von großer Bedeutung in der Quanteninformationsverarbeitung. Zu ihnen gehören z.B. optische Mikroresonatoren und Lichtwellenleiter. Durch geschickte Kombination verschiedener Materialien können ihre Eigenschaften deutlich verbessert und neue Funktionalitäten erzielt werden. In der Arbeitsgruppe Nano-Optik von Prof. Benson, Institut für Physik, werden sowohl theoretische Aspekte als auch experimentelle Realisierungen von hybriden nanophotonischen Strukturen erforscht. Als Beispiel ist im oberen Bild ein kombinierter metal-dielektrischer Mikroresonator zu sehen, der mit einem Rasterkraftmikroskop aufgenommen wurde. Der Mikroresonator wurde durch gezielte Anordnung einzelner Gold-Nanopartikel auf einem photonischen Kristall erzeugt. Das durch eine numerische Simulation berechnete elektromagnetische Feld nahe einer solchen Struktur ist im unteren Bild dargestellt. Simulationen dieser Art stellen hohe Anforderungen an die eingesetzten numerischen Berechnungsverfahren. Ein neuer Ansatz besteht in der Verwendung von adaptiven Gitternetzen, um die räumliche Auflösung zwischen den metallischen und dielektrischen Materialkomponenten zu variieren.



Ein Beispiel der vom CCSA geförderten interdisziplinären Zusammenarbeit stellt die Kooperation zwischen dem Lehrstuhl für Systemanalyse von Prof. Fischer (Informatik) und der Arbeitsgruppe Nano-Optik dar. Ziel der Kooperation ist, die Ergebnisse der Software-technologischen Forschung zu metamodel-basierten Modellierungssprachen und Werkzeugen auch in anderen Bereichen als der Softwareentwicklung anzuwenden. Im Rahmen der Kooperation werden spezielle Modellierungssprachen und Werkzeuge entwickelt, mit denen Physiker Experimente mit optischen Nanostrukturen beschreiben und auswerten können.

Schlüsseldisziplinen entwickelt, an denen in den modernen Natur- und Ingenieurwissenschaften kein Weg vorbei führt. Das in Berlin ansässige Forschungszentrum MATHEON »Mathematics for key technologies« macht diesen Anspruch eindrucksvoll deutlich. Numerische Verfahren für Differentialgleichungen und Optimierungsprobleme, die der Modellierung von beinahe allen physikalischen Prozessen zugrunde liegen, und Algorithmen der Stochastik

und der statistischen Datenanalyse zur Bewältigung großer, experimentell gewonnener Datenmengen sind heutzutage im Alltag der meisten Naturwissenschaftler und Ingenieure nicht mehr wegzudenken. Die Informatik bietet adäquate Softwarelösungen an und macht damit die Umsetzung der Verfahren auf heutigen Computeranlagen möglich. Multicore- und Cloud-Computing sind Schlagworte, die weitere Innovationsschübe erwarten lassen.



Infobox 6

Mathematische Bildverarbeitung

Im Kontext der mathematischen Bildverarbeitung werden Daten, die von verschiedenen bildgebenden Verfahren (Modalitäten) stammen können, digital behandelt. Dabei fallen unterschiedliche Arbeitsprozesse an, wie etwa Bildsegmentierung, Bildverzerrung und -entrauschung (siehe Bild o.l. für verrauschte Daten und Bild o.r. für das durch mathematische Methoden verbesserte Bild) oder Bildsegmentierung (siehe Bild u.r. für eine Anwendung im medizinischen Kontext). Die mathematische Formulierung dieser Aufgaben führt auf komplizierte Minimierungsaufgaben, die in weiterer Folge die analytische Behandlung hochgradig nichtlinearer Systeme von partiellen Differentialgleichungen

und deren effiziente numerische Lösung erfordern, um etwa Wartezeiten in der medizinischen Bilddiagnostik zu minimieren. Zur Lösung dieser Probleme werden in der Arbeitsgruppe von Prof. Michael Hintermüller am Institut für Mathematik der Humboldt-Universität verallgemeinerte Newton-Techniken, Methoden der Form- und Topologieoptimierung, adaptive Regularisierungstechniken bei inversen Problemen und adaptive Finite-Elemente-Verfahren entwickelt, analysiert und computergestützt realisiert.



Center of Computational Sciences Adlershof

Auch an der Humboldt-Universität wird sehr erfolgreich wissenschaftlich gerechnet und die theoretischen Grundlagen dieser jungen Disziplin erforscht. Das anfangs erwähnte Forschungsprojekt des Doktoranden Wiedemann ist nur eines unter vielen Projekten mit diesem Fokus. Vor allem Forschergruppen am Standort Adlershof setzen Verfahren des wissenschaftlichen Rechnens intensiv

für ihre Untersuchungen ein oder entwickeln diese weiter. Die Anwendungen reichen von der Quantenfeldtheorie, über die theoretische Teilchenphysik und Nano-Optik bis hin zur Bildverarbeitung, Klimaforschung, Fertigungstechnik, Aerodynamik und Geophysik. Die Methodenwissenschaftler aus der Mathematik und Informatik haben Optimierungsalgorithmen, adaptive Finite-Elemente-Methoden, Datenbanktechnologien und modellbasier-

Infobox 7

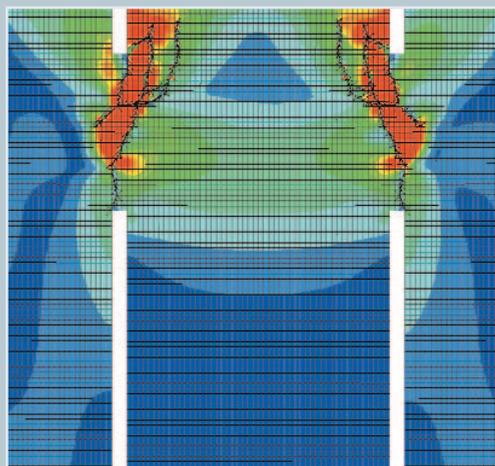
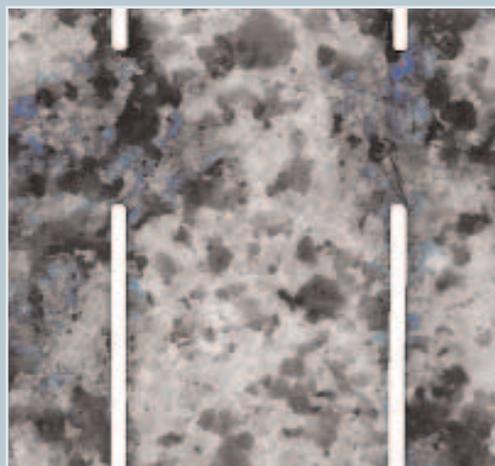
Simulation von Rissausbreitung in Gestein

In vielen geomechanischen Anwendungsbereichen ist die genaue Kenntnis von Rissnetzwerken und Risswachstum entscheidend. Hierzu gehören etwa die Sequestration von CO₂, die Erschließung und Produktivitätssteigerung von Energielagerstätten sowie die Endlagerung atomarer Abfälle. Der Einsatz von computergestützten Simulationen kann zu einer genauen Abschätzung der Risiken sowie zur gesicherten Bestimmung optimaler Betriebsparameter und damit zu einer enormen Minderung der Projektkosten vor der Durchführung von kostenintensiven Bohrungen beitragen.

In einem Forschungsprojekt der Arbeitsgruppe »Computational Mathematics«, Prof. Schröder, am Institut für Mathematik werden moderne erweiterte Finite-Elemente-Methoden (XFEM) zur Simulation von bruchmechanischen Prozessen entwickelt. In XFEM-Ansätzen werden Risse unmittelbar über spezielle mathematische Objekte in die Diskretisierung eingearbeitet, wodurch man eine effiziente, netzunabhängige Beschreibung der Risse erhält. Das Bild (oben) zeigt den Querschnitt einer Gesteinssäule nach Durchführung des PTS-Tests, eines Standardexperi-

ments zur Bestimmung der Brucheigenschaften von Gestein. Im Bild (unten) ist ein Rissnetzwerk und die Spannungsverteilung zu sehen, die durch eine Computersimulation berechnet wurden.

Das Forschungsprojekt wird vollständig von einem Industriepartner finanziert. Die GeoFrames GmbH aus Potsdam ist im Bereich Consulting und Softwareentwicklung für geomechanische Anwendungsfelder tätig. Sie berät weltweit agierende Großunternehmen in der Erdöl- und Energiebranche sowie Montanunternehmen.



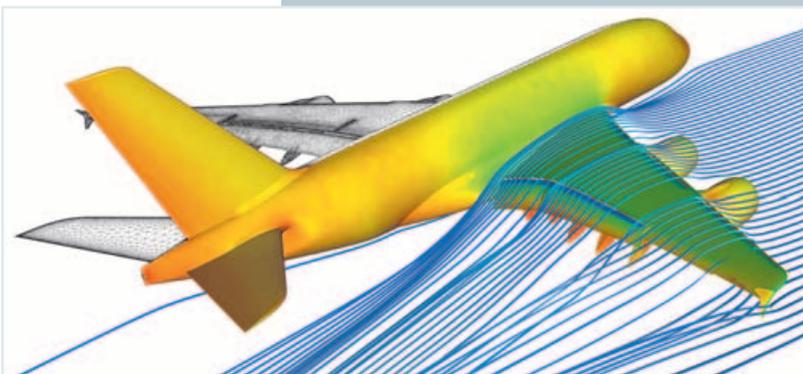
te Hard- und Softwarelösungen in ihrem Repertoire. Eine Auswahl verschiedener interdisziplinärer Projekte ist in den Infoboxen 1,5,6,7 und 8 zu finden. In Adlershof liegen ideale Bedingungen vor, um die besonderen Synergien des wissenschaftlichen Rechnens zu nutzen. Das Know-how ist vorhanden und muss nur zusammengeführt werden.

Im November 2009 wurde deshalb das interdisziplinäre Zentrum »Center of Computational Sciences Adlershof« (CCSA) auf Initiative der Adlershofer Institute für Mathematik, Informatik, Physik und Chemie gegründet und ist nunmehr eines von 13 interdisziplinären Zentren der Humboldt-Universität zu Berlin. Vornehmliches Ziel des Zentrums sind die Schaffung eines Kommunikationsforums und die Bündelung der interdisziplinären Forschungs- und Drittmittelaktivitäten. Das CCSA

soll ein Kristallisationspunkt für alle Forscher werden, die Verfahren des wissenschaftlichen Rechnens einsetzen und gewissermaßen »Science mit dem Computer machen«.

Ein wichtiges Anliegen des CCSA ist die fachübergreifende, gemeinsame Forschung. Zu vereinen sind etwa die verschiedenen Sichtweisen der Forscher. Während sich etwa der methodenorientierte Mathematiker mit vereinfachten Modellen begnügt und sich eher dem strengen Nachweis der Korrektheit seiner Algorithmen verpflichtet sieht, spielt dieser Aspekt in der naturwissenschaftlichen Forschung bisher nur eine untergeordnete Rolle. Der anwendungsorientierte Naturwissenschaftler macht hingegen gerne Gebrauch von Heuristiken auch ohne weitere theoretische Verifizierung der eingesetzten Berechnungsmethoden. Auch die unter-

Quelle: DLR



Infobox 8 Optimierung mit partiellen Differentialgleichungen

Seit den ersten erfolgreichen Flugversuchen gegen Ende des 19. Jahrhunderts durch Pioniere wie Lilienthal und die Gebrüder Wright hat sich die Geschichte der Luftfahrt stark geändert. Die Flugzeuge wurden größer, schneller, effizienter

und zuverlässiger. Heutzutage werden viele Flugzeugmodelle zuerst virtuell berechnet, um die aufwendigen, teuren und langwierigen Versuchsketten in den Windkanälen zu vermeiden. In einer Kooperation mit den Universitäten RWTH Aachen (Prof. Gauger) und CAU zu Kiel (Prof. Slawig) entwickelt die Arbeitsgruppe um Prof. Griewank vom Institut für Mathematik hocheffiziente deterministische Algorithmen zur Optimierung von Flugzeugen. Das Ziel ist etwa die Minimierung des Luftwiderstandes eines Flugzeugflügels in einem aerodynamischen Turbulenzmodell. Das daraus resultierende Minimierungsproblem mit partiellen Differentialgleichungen wird mit Hilfe eines One-Shot-Ansatzes gelöst. Hierbei wird versucht, die Optimalität des Zielfunktional und die Zulässigkeit der Erhaltungsgleichungen mittels einer Fixpunktiteration gleichzeitig zu erreichen.

schiedliche Auslegung von wissenschaftlichen Begriffen kann bereits ein Hindernis für gemeinsame Forschung sein. So ist etwa der viel benutzte Begriff »Modell« für den Mathematiker eine Differentialgleichung oder ein Minimierungsproblem, wohingegen der Informatiker darunter oft eine Datenstruktur und der Ingenieur häufig das Berechnungsverfahren selbst versteht.

Die Verbesserung der Kommunikation und die Vernetzung der Wissenschaftler untereinander

spielt eine wesentliche Rolle im CCSA. Das Zentrum will als Kommunikationsforum den Rahmen für institutsübergreifende Veranstaltungen bereitstellen. So gab es bereits mehrere Workshops, in denen die Mitglieder des CCSA ihre Forschungsinhalte vorstellten. Während des Semesters findet das Kolloquium »Computational Sciences Adlershof« statt. International renommierte Forscher und die Zentrumsmitglieder tragen über ihre aktuellen Forschungsarbeiten vor, wobei besonders die interdisziplinären Aspekte im Vordergrund stehen.

Center of Computational Sciences Adlershof

Humboldt-Universität zu Berlin
 Unter den Linden 6, 10099 Berlin
 E-Mail: ccsa@mathematik.hu-berlin.de
 Tel.: +49 (0)30 2093-2353
 Fax : +49 (0)30 2093-2232
www.ccsa.hu-berlin.de

Mitglieder

Prof. Dr. Carsten Carstensen
 Geschäftsführender Direktor
 Numerische Mathematik, Institut für Mathematik

Prof. Dr. Andreas Schröder
 Stellvertretender geschäftsführender Direktor
 Computational Mathematics, Institut für Mathematik

Prof. Dr. Oliver Benson
 Nano-Optik, Institut für Physik

Prof. Dr. Joachim Fischer
 Systemanalyse, Institut für Informatik

Prof. Dr. Johann-Christoph Freytag
 Datenbanken und Informationssysteme, Institut für Informatik

Prof. Dr. Andreas Griewank
 Mathematische Optimierung, Institut für Mathematik

Prof. Dr. Michael Hintermüller
 Mathematische Optimierung, Institut für Mathematik

Prof. Dr. Peter Imkeller
 Stochastik, Institut für Mathematik

Prof. Dr. Jürgen Kurths
 Nichtlineare Dynamik, Institut für Physik

Prof. Dr. Michael Müller-Preußker
 Theorie der Elementarteilchen / Phänomenologie, Institut für Physik

Prof. Dr. Markus Reiß
 Stochastik und Statistik, Institut für Mathematik

Prof. Dr. Lutz Schimansky-Geier
 Stochastische Prozesse, Institut für Physik

Dr. Marek Sierka
 Quantenchemie der Festkörper / Katalyse

Prof. Dr. Igor Sokolov
 Statistische Physik und Nichtlineare Dynamik, Institut für Physik

Internet

www.ccsa.hu-berlin.de

Das Zentrum ist auch die Basis für langfristige Ambitionen in der Adlershofer Forschung und bildet den Ausgangspunkt zur Initiierung von Forschergruppen und vergleichbaren Aktivitäten. Die Schaffung einer institutsübergreifenden Professur für wissenschaftliches Rechnen etwa als Stiftungsprofessur könnte eine angemessene Herausforderung für das CCSA werden.

Interdisziplinarität im wissenschaftlichen Rechnen ist in Deutschland und weltweit seit langem etabliert. Die Einsicht, dass Mathematiker, Informatiker, Ingenieure und Naturwissenschaftler zusammenarbeiten müssen, hat sich mittlerweile überall in der Forschung durchgesetzt. Allerorten werden Zentren und Institute ähnlich dem CCSA gegründet. Die Deutsche Forschungsgemeinschaft legt bei ihren Programmen großen Wert darauf, dass Wissenschaftler verschiedener Disziplinen kooperieren. Das CCSA sieht sich auch in Konkurrenz zu den republikweiten Initiativen und muss ein eigenes wissenschaftliches Profil entwickeln. Es greift aber auch das Prinzip zur fachübergreifenden

Zusammenarbeit als Chance, Kooperationen über den Adlershofer Raum hinaus anzustreben. Ein Thema, das das CCSA in naher Zukunft bei der Ausbildung und Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses angehen will. Ein wichtiges Projekt ist die Beantragung und Gründung eines internationalen Graduiertenkollegs zusammen mit den südkoreanischen Mathematikern Dongwoo Sheen, Professor für *Numerical Analysis and Scientific Computation*, und Eun Jae Park, Professor für *Computational Sciences and Engineering and Mathematics*. Ihre interdisziplinär besetzten Institute »Computational Science & Technology« (CST) und »Department of Computational Science and Engineering« (CSE) in Seoul verfolgen im Grunde die gleichen Ziele wie das Berliner Zentrum. Aufgrund intensiver Forschungskontakte zu CCSA-Mitgliedern war es naheliegend, die Stärken dieser drei Standorte auszuloten und zu einem gemeinsamen Konzept zu verbinden. Erste Vorbereitungen zur Beantragung werden bereits getroffen. Die Deutsche Forschungsgemeinschaft und das Department CSE der Yonsei-University finanzierten einen Workshop des CCSA zum Thema »Computation in the Sciences«. Dieser fand im November 2010 in Seoul statt.



Prof. Dr. Andreas Schröder

Jg. 1973, ist seit Oktober 2007 Juniorprofessor für Computational Mathematics am Institut für Mathematik der Humboldt-Universität zu Berlin. Er ist stellvertretender geschäftsführender Direktor des Interdisziplinären »Center of Computational Sciences Adlershof«.

Forschungsschwerpunkte: Fehlerkontrolle, Adaptive p- und hp-Finite-Elemente-Methoden, XFEM, Strukturmechanik, Kontaktprobleme, Fertigungstechnik, Biomechanik, Geophysik.

Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Mathematik

E-Mail: andreas.schroeder@math.hu-berlin.de

www.mathematik.hu-berlin.de/~compmath/

Die Gründung des CCSA war ein notwendiger Schritt für den Wissenschaftsstandort Adlershof. Er eröffnet ein weites Feld der interdisziplinären Zusammenarbeit über alle Fächergrenzen und vielleicht auch Ländergrenzen hinweg. Dass der Nachwuchswissenschaftler Wiedemann sich bald in einem südkoreanischen Forschungsinstitut wiederfindet, ist da nicht unwahrscheinlich.

Der Beitrag entstand in Zusammenarbeit mit:

C. Carstensen / M. Barth / T. Bosse / O. Benson / J. Fischer / A. Griewank / M. Hintermüller / A. Wiedemann / S. Wiedemann.