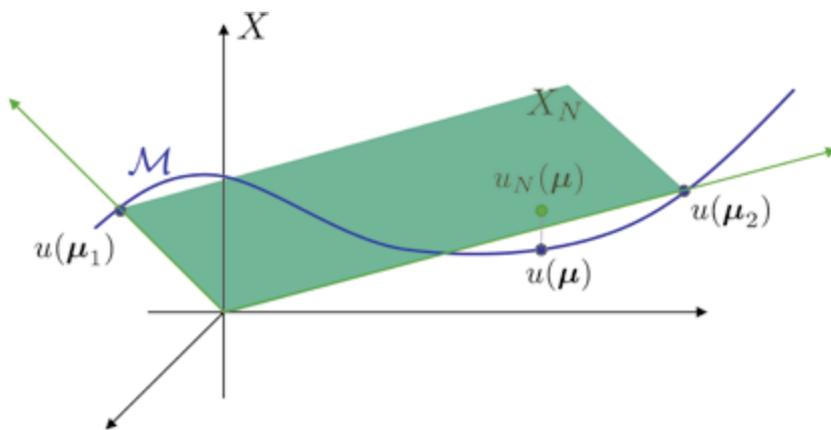


Mathematik als Innovator der Simulationstechnik – Simulationstechnik als Innovator der Mathematik



Dieser Beitrag stellt die Bedeutung der Mathematik für den gesamten Simulationszyklus heraus und gliedert sich in die Kernthemen Mathematische Modellierung, Numerische Simulation sowie Optimierung und Steuerung. Dabei soll aufgezeigt werden wie die Anforderungen aus den Anwendungen neue mathematische Fragen stimulieren und die Grenzen zwischen reiner und angewandter Mathematik verschwimmen lassen.

1. EINLEITUNG

Die großen Herausforderungen der Simulationstechnik entstammen den Natur- und Ingenieurwissenschaften. Die Lösungen der dort aufkommenden Fragen sind nur in der interdisziplinären Zusammenarbeit mit methodisch orientierten Querschnittswissenschaften wie Informatik und Mathematik möglich. Was ist eigentlich genau

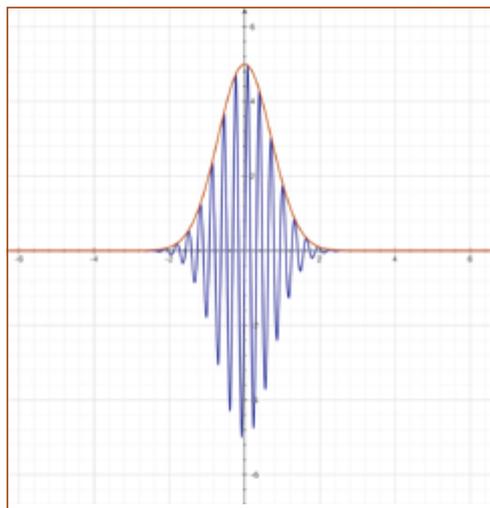
deren Rolle und wie kann eine abstrakte Wissenschaft wie Mathematik hier nützlich sein? Ausgehend von einem Anwendungsproblem gliedert sich der klassische Ansatz der Simulationstechnik in die Schritte *Modellierung – Numerische Simulation – Visualisierung, Validierung und Interpretation*. Vor allem bei den ersten beiden Schritten kommen Teilgebieten der Mathematik, wie Angewandte Analysis und Numerik,

eine Schlüsselrolle zu. Heute möchte man über die reine Simulation eines Prozesses hinausgehen. Aufgrund der Simulationsergebnisse sollen vor allem in technischen Anwendungen die Eingangsparameter optimiert oder – noch ambitionierter – soll der ganze Prozess aktiv gesteuert und kontrolliert werden. Dazu ist die mathematische *Optimierung* und *Systemtheorie* unerlässlich. Ein etwas anders gelagertes Problem ist die Parameteridentifikation. Oft sind die Eingangsparameter nicht exakt bekannt und können auch nicht direkt gemessen werden. Ein Ziel der Simulation ist es, die Parameter a-posteriori zu bestimmen. Dieser Aufgabe widmet sich die mathematische Disziplin der *Inversen Probleme*. Auf allen genannten Gebieten trägt die Stuttgarter Mathematik zum Erfolg des Exzellenzclusters „Simulation Technology“ bei und insbesondere in Stuttgart forciert der Exzellenzcluster die Entwicklung der Mathematik in vielen Bereichen in Richtung einer algorithmisch- und problemorientierten Wissenschaft.

2. MODELLIERUNG

Die unterschiedlichen Fachdisziplinen haben völlig unterschiedliche Ansichten darüber, was ein Modell ist. Oft hat die fachspezifische Fassung dieses Begriffs wenig mit Mathematik zu tun. Die mathematische Modellierung mit partiellen Differentialgleichungen hat sich erst in den letzten Jahren als ein eigenständiges Forschungsgebiet innerhalb der Mathematik etabliert, dessen Grenzen immer noch nicht genau festzulegen sind. Im Rahmen des Simulationszyklus ist mathematische Modellierung auf zwei Ziele ausgerichtet. Einerseits soll das mathematische Modell die Realität möglichst genau abbilden. Andererseits soll es so konstruiert sein, dass es einer effizienten numerischen Simulation zugänglich ist. Beide Ziele können in den seltensten Fällen widerspruchsfrei erreicht werden. Es ist die Hauptaufgabe der modernen Mathematischen Modellierung hier einen akzeptablen Kompromiss zu finden. Der Zielkonflikt wird besonders deutlich, wenn die aufzulösenden relevanten Objekte des Problems viel kleiner sind als die Abmessungen des zu betrachtenden Systems. Ein typisches Beispiel ist die Datenübertragung durch Lichtpulse in Glasfaserkabeln. Licht hat eine Wellenlänge von

10^{-7} Metern. Sollen die einzelnen Schwingungen numerisch aufgelöst werden, führt dies bei einem Glasfaserkabel von hundert Kilometern Länge allein für die räumliche Diskretisierung auf mehr als 10^{12} Punkte. Eine Größenordnung, die vor wenigen Jahren prinzipiell auch mit den schnellsten Rechnern nicht behandelbar war. Ist der Multiskalen-Charakter des Problems zunächst ein Fluch, so erweist er sich hier auch als Segen. Mittels Störungsrechnung lässt sich aus den zu Grunde liegenden Maxwellgleichungen die sogenannte Nichtlineare Schrödingergleichung herleiten. Dies führt auf eine Dimensionsreduktion von vielen Zehnerpotenzen. Die Nichtlineare Schrödingergleichung hat sich als eines der erfolgreichsten Modelle überhaupt erwiesen. Noch heute werden fast alle Simulationen dieser Technologie zur Datenübertragung anhand nichtlinearer Schrödingermodelle durchgeführt. Da es sich um ein abgeschlossenes System handelt, kann die Nichtlineare Schrödingergleichung gegenüber den Maxwellgleichungen mathematisch gerechtfertigt werden. Dies geschieht mittels analytischer Fehlerabschätzung. Eine numerische Rechtfertigung ist zum einen wegen des Aufwands im Original-



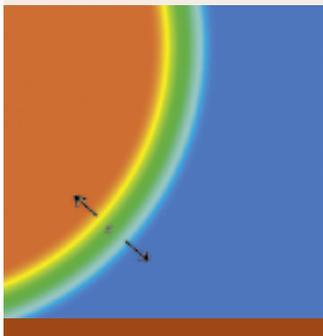
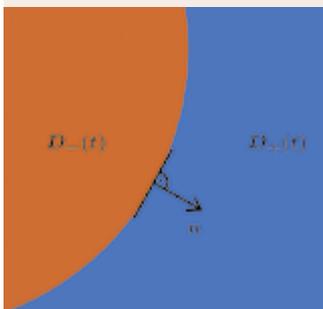
system und zum anderen wegen der Tatsache, dass so nur endlich viele Lösungen verglichen werden können, nicht möglich. Häufig werden weitere Terme zur Nichtlinearen Schrödingergleichung addiert, um Phänomene wie z.B. Dissipation zu beschreiben. Die so entstandenen Modelle sind rein phänomenologischer Art.

Die zeitlich und räumlich oszillierende Lösung (blau) einer nichtlinearen Wellen-/Maxwellgleichung beschreibt einen Lichtpuls und kann über die Dynamik der Einhüllenden (rot) näherungsweise effektiver beschrieben werden. Die Einhüllende entwickelt sich wie die Lösung einer Nichtlinearen Schrödingergleichung.

SHARP VERSUS DIFFUSE INTERFACE MODELLE IN DER STRÖMUNGMECHANIK

Ein sehr aktuelles Beispiel zur Beschreibung des Spannungsfeldes, in dem die mathematische Modellierung sich befindet, ist die Entwicklung der Modellierung von mehrphasigen Strömungen. Auf den ersten Blick könnte man meinen, dass die Modellierung in diesem Bereich eigentlich ihren Abschluss im neunzehnten Jahrhundert gefunden hat. Man unterteilt das betrachtete Gebiet einfach in einen Anteil, in dem das Fluid in flüssiger Phase und einen, in dem es in dampfförmiger Phase vorliegt. Für einen stationären sphärischen Flüssigkeitstropfen mit Radius $r > 0$, der von Dampf umgeben ist, haben schon 1805 Simon Young und Pierre-Simon Laplace herausgefunden, dass der Drucksprung über die Phasengrenze proportional zur Krümmung ist. Später haben Josiah Willard Gibbs und William Thomson (Lord Kelvin) eine weitere thermodynamische Spungbedingung formuliert, die eine vollständige analytische Lösung des stationären Falls ermöglicht. Diese beiden Bedingungen lassen sich auch auf zeitabhängige Strömungen mit Phasenübergang übertragen, wobei die Dynamik der Strömung durch die (kompressiblen) Navier-Stokesgleichungen beschrieben werden kann. Da dieses Modell den Phasenübergang als Unstetigkeit in der Dichtekonfiguration beschreibt, spricht man auch von einem *Sharp-Interface-Modell*. Im Bereich der

Numerik für kompressible Strömungen hat es nun in den letzten beiden Jahrzehnten riesige Fortschritte gegeben, so dass man heute zumindest einphasige Probleme effizient lösen kann. Im zweiphasigen Problem sind aber nicht nur das Dichte, Temperatur und das Geschwindigkeitsfeld unbekannt, sondern auch die Lage der Phasengrenze. Das numerische Verfolgen der Phasengrenze erweist sich schließlich als Flaschenhals für die gesamte Simulation. Dabei ist dies in erster Linie nicht ein Problem fehlender Computerleistung, vielmehr ist es bis heute nicht gelungen einen stabilen numerischen Lösungsalgorithmus zu finden. Schon kleinste Diskrepanzen zwischen der exakten Lage der Phasengrenze und ihrer numerischen Approximation führen zu massiven Oszillationen im Drucksprung und einem verhängnisvollen Fehler in der Young-Laplace Gleichung: Die Simulation muss abgebrochen werden. Die Sharp-Interface Modellierung ist aber nicht nur im Hinblick auf das Ziele einer effizienten numerischen Simulation kritisch. Spannender und technisch viel relevanter als die Dynamik einzelner Tropfen oder Blasen ist natürlich die Interaktion derselben. Wann und unter welchen Bedingungen vereinigen sich eigentlich zwei Blasen? Was passiert beim Aufprall zweier Tropfen? Eines ist dabei sicher: das Young-Laplace Gesetz



02 Scharfe Grenzschicht (oben) und diffuse Grenzschicht (unten).

Asymptotische Fehlerabschätzungen existieren nicht und im Originalsystem führen die entsprechend umgerechneten Terme zum Teil zu komplettem Unsinn. Ein weiteres Beispiel sind langwellige Wasserwellen wie z.B. Tsunamis. Hier können wieder mittels Störungsrechnung Näherungsgleichungen hergeleitet werden. Lange war unklar, ob irgend eine Ordnung in den Zoo der möglichen Näherungsgleichungen gebracht werden kann. Hier konnte die Mathematik helfen. Es lässt sich nämlich beweisen, dass zweidimensionale Oberflächenwellen im Langwellenlimit durch zwei entkoppelte Korteweg-

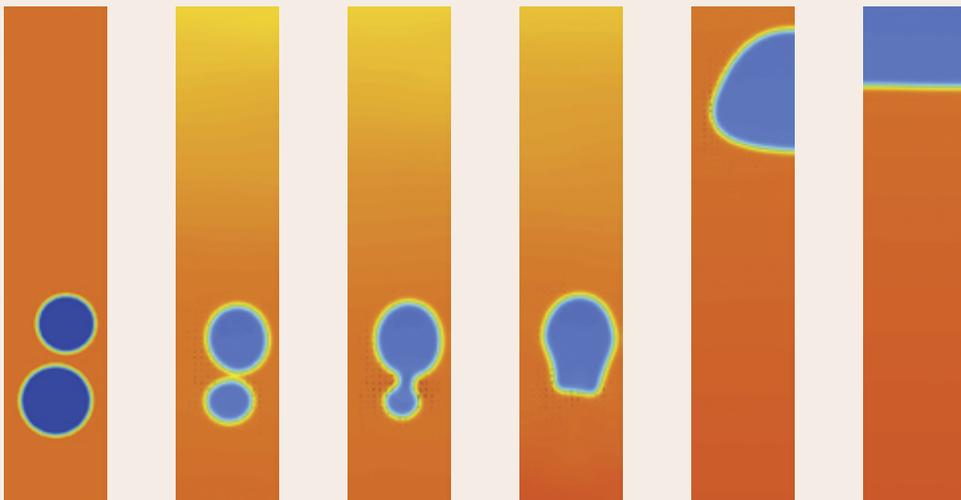
de-Vries-Gleichungen korrekt beschrieben werden. Die Korteweg-de-Vries-Gleichungen sind das einfachste Modell, welches unabhängig vom Störungsparameter ist. Alle anderen Näherungsgleichungen lassen sich asymptotisch durch sie ebenfalls korrekt beschreiben.

Das dritte Beispiel sind musterbildende Systeme, für welche in der Nähe der ersten Instabilität die sogenannte Ginzburg-Landau-Gleichung hergeleitet werden kann. Neben Fehlerabschätzungen lässt sich sogar zeigen, dass jede Lösung des Originalsystems, sich so entwickelt, dass sie nach einer bestimmten Zeit durch die

gilt zumindest in der elementaren Form nicht mehr; denn im Moment der Vereinigung ist die Krümmung und damit die Oberflächenenergie unendlich groß.

Diese Misere, die ganz analog auch bei anderen Phasenübergangsprozessen auftritt, war der Ausgangspunkt ganz neu über die mathematische Modellierung dieser Probleme nachzudenken. Einen neuen Ansatz lieferten dabei *Diffuse-Interface-Ansätze* oder auch Phasenfeldmodelle. Die Ausgangsidee ist verblüffend einfach. Wie die Bezeichnung schon nahelegt, ersetzt man die bisher als scharf vorausgesetzte Phasengrenze durch einen steilen aber glatten Übergang. Dies koppelt die beiden Phasengebiete automatisch, so dass die lästige Verfolgung der Phasengrenze entfällt. Und es wird noch viel besser. Die in der diffusen Grenzschicht enthaltene Energie kann selbst bei

topologischen Änderungen wie der Blasen-/Tröpfcheninteraktion kontrolliert werden, so dass das Modell auch in diesen Situationen gültig bleibt. Diese Vorteile haben *Diffuse-Interface-Modellierungen* sehr beliebt gemacht. Aber auch die Diffuse-Interface Modelle sind sicherlich nicht das Ende der Entwicklung. Zwar ergeben sich riesige Vorteile für die numerische Simulation, da man keine explizite Grenzfläche vorliegen hat. Gleichzeitig muss aber die zwar glatte, aber doch auf einen kleinen räumlichen Bereich beschränkte Übergangzone aufgelöst werden. Dies wäre selbst mit modernsten Rechnern nicht zu schaffen gewesen, wenn es nicht gleichzeitig im Bereich der Numerischen Mathematik, speziell beim Einsatz adaptiver Rechenmethoden und der Modellreduktion, Entwicklungssprünge gegeben hätte.



Simulation des Aufstiegs und der Vermischung zweier Dampfbläschen.

dazugehörige Ginzburg-Landau-Gleichung beschrieben werden kann. Es stellt sich aber heraus, dass nicht alle asymptotischen Modelle die Wirklichkeit richtig beschreiben. So hat sich die Forschung in den letzten Jahren auch darauf konzentriert, Gegenbeispiele zu finden, bei denen die Methode der Störungsrechnung bei Multiskalenproblemen versagt. Die großen Fortschritte bei den Simulationstechnologien haben hier neue Möglichkeiten eröffnet. Partielle Differentialgleichungen auf großen räumlichen Gebieten lassen sich effektiv parallel und auf Grafikprozessoren lösen. Diese Herangehensweise ist

durch eine Kooperation innerhalb von SimTech mit der Informatik stark motiviert. Obwohl sich so kein Beweis führen lässt, dass diese asymptotischen Modelle nicht korrekt sind, finden Anwendungswissenschaften solche Simulationen häufig überzeugender als einen mathematischen Beweis.

Auch bei neueren Entwicklungen wie der Beschreibung von Ultrakurzpulsen in der Spektroskopie oder der Untersuchung von Monsterwellen bedient man sich der Methode der asymptotischen Modelle. Vielfach stehen hier Untersuchungen ihrer Gültigkeit noch aus.

3. NUMERISCHE SIMULATION

Wie in den bisherigen Abschnitten beschrieben wurde, führt die mathematische Modellierung häufig auf ein System von partiellen Differentialgleichungen. Die gesuchte Lösung dieses Systems ist nicht ein einfacher Zahlenwert, sondern eine orts- und zeitvariante Funktion, d.h. eine Funktion, welche von den Ortskoordinaten (x, y, z) und der Zeit t abhängt. Explizite Lösungsformeln für Lösungen partieller Differentialgleichungen gibt es nur in den seltensten Fällen. Daher wird das mathematische Modell durch ein *diskretes Modell* ersetzt, dessen Lösung numerisch berechnet werden kann. Die *diskrete Lösung* ist i.A. ebenfalls eine orts- und zeitvariante Funktion, welche jedoch bereits durch N Zahlenwerte, die sogenannten *Koeffizienten*, eindeutig bestimmt ist. Die Berechnung der diskreten Lösung reduziert sich damit auf die Berechnung dieser N Koeffizienten und man kennt dann die gesamte diskrete Lösung. Insbesondere kann man diese an beliebig gewählten Punkten auswerten, um sie z.B. grafisch darzustellen. Wir erleben dies tagtäglich bei der Wettervorhersage im Fernsehen, in der uns die diskrete Lösung eines Wettermodells in grafisch aufbereiteter Form Informationen über das Wetter der kommenden Tage gibt. Dieses einfach erscheinende Vorgehen ergibt viele spannende und anspruchsvolle Fragestellungen in der *Numerischen Mathematik*. Eine ihrer Hauptaufgaben ist das Design und die Analyse von Algorithmen, die bei der *Diskretisierung* von Differentialgleichungen eingesetzt werden.

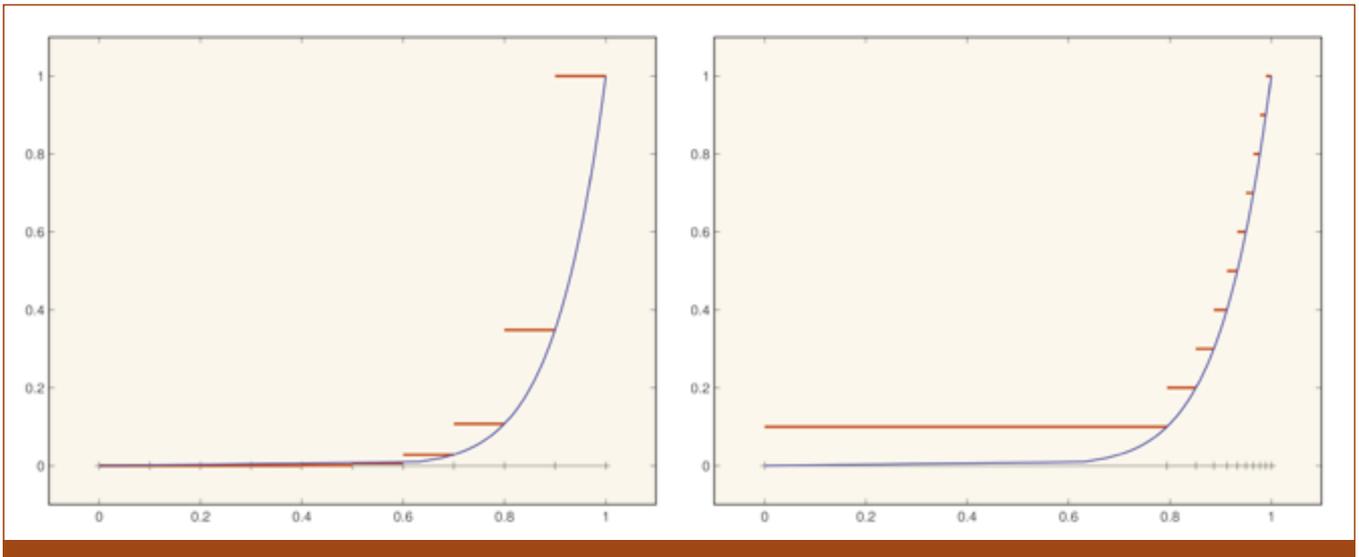
Da wir das mathematische Modell durch ein diskretes Modell ersetzt haben, stimmen die exakte und diskrete Lösung nicht überein. Die diskrete Lösung ist nur eine Näherung an die exakte Lösung. Aufgabe der *numerischen Analysis* ist es, Abschätzungen für den Abstand zwischen diskreter und exakter Lösung zu geben. Solche Abschätzungen sind ein Maß für die Qualität der diskreten Lösung. Haben wir ein „gutes“ diskretes Modell gewählt, so verbessert sich diese Qualität, wenn wir N groß wählen, und für $N \rightarrow \infty$ „konvergiert“ die diskrete Lösung gegen die exakte Lösung. Wichtig hierbei ist die Stabilität des Modells. Das Verständnis, welches die Mathematik von *Stabilität* hat, kann (ohne eine exakte Definition zu geben) wie folgt motiviert werden. Beobachten wir bei der

Wettervorhersage starken Hochdruckeinfluss, so trifft die Prognose meist für einen Zeitraum von mehreren Tagen zu, und dies bezeichnen wir als stabil. Ist das aktuelle Wetter durch verschiedene Tiefs geprägt, so ist die Vorhersage oftmals nur für den kurzen Zeitraum von einem Tag verlässlich. Dies ist ein instabiles Verhalten.

Die praktische Berechnung der Koeffizienten auf einem Computer benötigt effiziente Algorithmen, die in der *Numerischen Algebra* entwickelt und analysiert werden. Eine besondere Herausforderung sind Algorithmen für große nicht-lineare Gleichungssysteme mit deren Hilfe die N Koeffizienten der diskreten Lösung berechnet werden. Typische Werte von N liegen dabei zwischen $N = 10^5$ und $N = 10^{12}$, um eine gute Qualität der berechneten Lösung zu gewährleisten. Bis $N \approx 10^6$ ist eine Berechnung auf einem normalen Computer oder Laptop in akzeptabler Zeit möglich. Ab $N \approx 10^7$ kann das diskrete Modell nur noch auf einem Rechencluster mit einer Vielzahl von Prozessoren und Kernen gelöst werden. Dies erfordert den Einsatz von skalierbaren, parallelen Algorithmen. Hier beobachten wir einen typischen Interessenkonflikt der Numerischen Mathematik, der durch den Entwurf und die Analyse geeigneter Verfahren gelöst werden muss. Eine gute Qualität der diskreten Lösung benötigt ein möglichst großes N , während eine schnelle Berechnung ein möglichst kleines N erfordert. Im Folgenden stellen wir zwei Verfahrensklassen vor, die im Rahmen von SimTech intensiver untersucht wurden.

3.1 Adaptive Approximation

So wie Albert Einstein Gedankenexperimente bei der Herleitung der Relativitätstheorie anstellte, betrachten wir die folgende, einfache Aufgabe. Eine gegebene Funktion u ist auf dem Intervall $[0, 1]$ durch eine stückweise konstante Funktion U auf einer Zerlegung von $[0, 1]$ mit $N + 1$ Stützstellen und N Elementen zu approximieren. Im einfachsten Fall wählt man die Stützstellen äquidistant und alle Elemente haben die gleiche Länge N^{-1} . Dies ist die *uniforme Approximation (04a)*. Man kann zeigen, dass der maximale Abstand zwischen U und u kleiner als CN^{-1} ist, sofern die Ableitung von u beschränkt ist. Dabei hängt die Konstante C



O4

nur von u ab. Insbesondere wird der Abstand kleiner, wenn N größer gewählt wird. Es ergibt sich in natürlicher Weise die Frage, ob man die Zerlegung zu einer gegebenen Funktion u geschickter wählen kann, um damit den maximalen Abstand zu minimieren. Dies ist möglich, wenn man die Elemente nicht gleich groß wählt, sondern die Größe der einzelnen Elemente dem Verhalten von u anpasst. Dies nennt sich *adaptive Approximation*. Für unsere Aufgabe ist sogar explizit die optimale Positionierung der Stützstellen bekannt, die zu gegebenem N den kleinstmöglichen Fehler liefert (O4b). Der maximale Abstand ist ebenfalls kleiner als CN^{-1} . Hier wird nur Integrierbarkeit der Ableitung von u benötigt, was eine deutlich schwächere Forderung als Beschränktheit ist.

Betrachten wir nun die Funktion $u(x) = x^\alpha$ mit einem $0 < \alpha < 1$, so ist die Ableitung von u integrierbar, allerdings nicht beschränkt. Ein solches Verhalten nennen wir *singulär* und dies hat dramatische Auswirkungen in der Praxis. Soll z.B. für $\alpha = 0,1$ ein maximaler Fehler von einem Prozent eingehalten werden, so benötigt die uniforme Approximation 10^{20} Elemente, während die adaptive Approximation die gleiche Genauigkeit mit lediglich 100 Elementen erreicht. Letztere kann auf jedem beliebigen Laptop innerhalb von Bruchteilen einer Sekunde berechnet werden, während die uniforme Approximation mehr als einen Tag auf dem schnellsten Rechner des HLRS, Hermit, benötigen würde. Eine solche Rechenzeit ist für diese einfache Aufgabe nicht akzeptabel. Zudem

würden Stromkosten in Höhe von mehr als 5000 Euro zu Buche schlagen. Der Zusammenhang zwischen unserem Gedankenexperiment und der numerischen Lösung von Differentialgleichungen ergibt sich wie folgt. Die exakte Lösung des mathematischen Modells ist in vielen Fällen singular mit einem vergleichbaren Verhalten wie die Funktion x^α unseres Beispiels. In einem solchen Fall können vorhandene Computerressourcen mit uniformen Approximationen nicht adäquat genutzt werden. Dies ist nur mit Hilfe von adaptiven Methoden möglich. Im Gegensatz zu unserem Experiment kann die adaptive Zerlegung nicht explizit angegeben werden, da diese auf Information der exakten Lösung basiert, welche nicht bekannt ist.

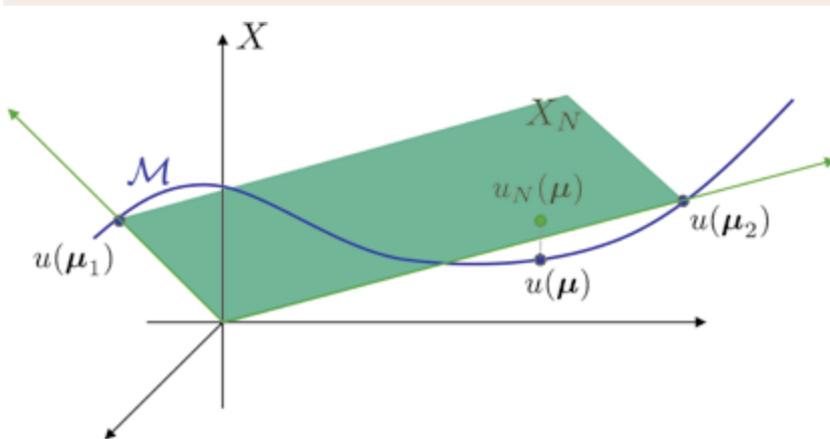
Der Ausweg sind iterative Verfahren, die induktiv eine Folge von Zerlegungen konstruieren und darauf die exakte Lösung adaptiv approximieren. Ein wesentlicher Baustein sind a posteriori Fehlerschätzer, welche den Abstand zwischen berechneter und exakter Lösung abschätzen. Mit Informationen des Fehlerschätzers wird die aktuelle Zerlegung so verbessert, dass bei einer erneuten Berechnung die diskrete Lösung näher an der exakten Lösung liegt. Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass im Falle von singulären Lösungen adaptive Methoden unerlässlich sind, um zur Verfügung stehende Computerressourcen effizient zu nutzen. Die Weiterentwicklung und die Analyse effizienter, adaptiver Verfahren ist ein Themenschwerpunkt in der zweiten Förderungsphase des Exzellenzclusters SimTech.

Uniforme (a) (links) und adaptive (b) (rechts) Approximation von $u(x) = x^{0.1}$ mit jeweils $N = 10$ Elementen. Der maximale Abstand beträgt $\approx 0,65$ für die uniforme und $0,1$ für die adaptive Approximation. Der Abstand der Gitterpunkte verdichtet sich bei der adaptiven Approximation rechts im Bereich hoher Ableitungen von u .

MODELLREDUKTION

Die Modellreduktion hat als Ziel, sehr hochdimensionale Modelle durch niedrigdimensionale Approximationen zu ersetzen. Dadurch wird eine beschleunigte Simulation ermöglicht. Dies erlaubt es, reduzierte Simulationsmodelle in komplexen Simulationsszenarien, wie z.B. der statistischen Analyse, interaktiven Parameter-Exploration, simulationsbasierten Optimierung, Echtzeit-Regelung, etc. einzusetzen. Das aktuelle Forschungsgebiet der „Reduzierten Basis Methoden“ zielt insbesondere auf parametrische Probleme, bei denen die (hochdimensionale) Lösung $u(\mu) \in X$ von

einem Parametervektor μ abhängt und aus einem hochdimensionalen Raum X stammt. Das Ziel ist nun die Bestimmung einer approximativen Lösung $u_N(\mu) \in X_N$ in einem niedrigdimensionalen Unterraum X_N . Dies ist in (05) illustriert. Mathematische Fragen hierbei sind: Wie kann ein geeigneter reduzierter Raum X_N bestimmt werden, so dass die gesamte parametrische Fläche M der hochdimensionalen Lösungen gut approximiert wird? Gegeben ein solcher Raum, wie kann darin eine gute Approximation $u_N(\mu)$ gefunden werden? Wie kann eine solche Approximation effizient berechnet werden? Kann man den Fehler der Approximation zur unbekannt hochdimensionalen Lösung durch Fehlerschätzer einschränken? Kann garantiert werden, dass die Fehlerschranken nicht zu pessimistisch sind, d.h. den Fehler nicht zu sehr überschätzen? Kann man insgesamt für ein gegebenes Modell garantieren, wie der Fehler mit wachsender reduzierter Dimension abfällt? Für einfache Modelle (stationäre Wärmeleitung) sind diese Fragen vollständig zufriedenstellend beantwortet. Für komplexere Probleme wie zeitabhängige Probleme, nicht-lineare Probleme, gekoppelte Systeme, Systeme mit Nebenbedingungen, etc. sind diese Aspekte meist offen und Gegenstand aktueller Forschung.



05

Illustration der Modellreduktion für parametrisierte Probleme.

3.2 Parameterabhängige Probleme

In vielen Fällen reicht eine Einzelsimulation eines Modells nicht aus. Häufig hängt das Modell von variablen Parametern ab, deren genaue Werte darüber hinaus unbekannt sind. Solche Parameter können z.B. Geometriemaße, Materialeigenschaften, Anfangswert- oder Randwertbedingungen umfassen. Neben deterministischen Modellgrößen können die Parameter auch stochastisch sein, und die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die zufälligen Parameter kann wieder weitere Modellparameter enthalten.

Verschiedene Simulationsszenarien erfordern nun vielfache Simulation von Model-

len: Zum Beispiel sind für statistische Untersuchungen viele Simulationen mit unterschiedlichen Parametern erforderlich. Im Fall der Optimierung wird durch Änderung der Parameter ein Gütefunktional optimiert. Im Fall von Multiskalen-Modellen kann es notwendig sein, ein Mikromodell sehr häufig zu lösen und diese Ergebnisse in ein Makromodell zu übernehmen. Hierfür werden also viele Simulations-Anfragen (engl. „multi-query“) gestellt. Weil die Laufzeit für eine einzelne Simulation nicht vernachlässigbar ist und bei komplexen Problemen auch Tage oder Wochen benötigen kann, sind effiziente numerische Techniken erforderlich.

Neben der Beschleunigung der Berechnung etwa durch die oben beschriebenen adapti-

ven Methoden, ist die Modellreduktion ein für SimTech zentrales Forschungsgebiet. Damit kann eine wesentliche Verringerung der Dimension des numerischen Problems erreicht werden, um somit eine beschleunigte Simulation zu erreichen. So sind zum Beispiel, wie in (06a) und (06b) ersichtlich, interaktive Oberflächen zur Parameterexploration oder sogar Strömungs-Simulationen auf Smartphones möglich, für welche man ohne Modellreduktion Hochleistungsrechner benötigen würde.

4. INVERSE PROBLEME, OPTIMIERUNG UND REGELUNG

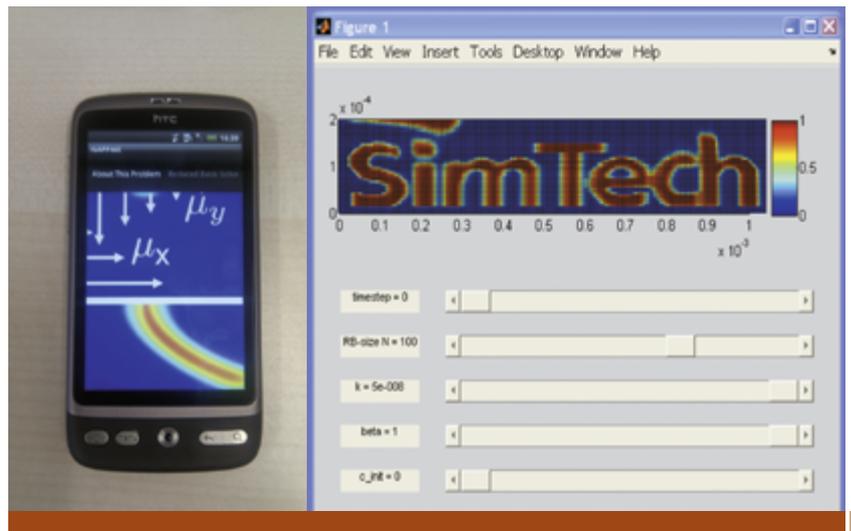
4.1 Optimierung und inverse Probleme

Durch numerische Simulationen kann das Verhalten eines Systems vorhergesagt werden. Dies geschieht bei so unterschiedlichen Anwendungen wie der Wettervorhersage, bei der Simulation von Materialverformungen zur Stabilitätsanalyse oder auch bei der Simulation des Stromflusses durch biologische Medien. Hinter diesen Simulationen steht oft das Ziel, das Verhalten des Systems zu *optimieren* oder durch Vergleich der Simulationen mit realen Messungen Erkenntnisse über das System zu gewinnen (*inverse Probleme*). So werden zum Beispiel die Verformungen verschieden ausgestalteter Stahlträger im Computer simuliert, um eine Form mit optimaler Stabilität zu finden. Inverse Probleme treten beispielsweise bei bildgebenden medizinischen Verfahren auf. Die Computertomographie beruht darauf, die Abschwächung von Röntgenstrahlen beim Durchgang durch den menschlichen Körper zu messen und daraus ein Bild des Körperinneren zu berechnen. Das neuartige Verfahren der elektrischen Impedanztomographie ersetzt die schädlichen Röntgenstrahlen durch schwache, für den Menschen unschädliche elektrische Ströme und wird zur Überwachung der Lungenfunktion durch Strom-/Spannungsmessungen an am Patienten angebrachten Elektroden verwendet.

Zur Beschreibung von Optimierungs- und inversen Problemen betrachten wir vereinfachend das System

$$F(x) = y.$$

Die Abbildung F ordnet einem Satz von Eingabeparametern bzw. Systemeigen-



06

Links (a) Strömungsmechanik auf dem Handy: Smartphone-App zur Strömungs-Simulation. Rechts (b) Interaktive Oberfläche zur Parameterexploration mittels reduzierter Modelle.

schaften x die Ausgabeparameter bzw. Systembeobachtungen y zu. Nebenbedingungen lassen sich durch die Forderung ausdrücken, dass die Eingabeparameter aus einer zulässigen Menge X stammen müssen. In der Formoptimierung würde x beispielsweise eine zulässige Form des Stahlträgers beschreiben und y ein Maß für seine Verformung unter praxisrelevanten Lasten. In der Impedanztomographie beschreibt x das Körperinnere des Patienten



07

Elektrische Impedanztomographie.

und y die Strom-/Spannungsmessungen an den Elektroden, die am Patienten angebracht sind.

4.1.1 Optimierung

Die Optimierung der Ausgabe eines Systems führt auf das mathematische Problem, die Eingabeparameter x des Systems (aus der zulässigen Menge X) so einzustellen, dass das Zielfunktional $F(x)$ möglichst groß oder möglichst klein wird. Einen naheliegenden Lösungsansatz bilden Auf- bzw. Abstiegsverfahren, die – ausgehend von dem besten bisher bekannten Parametersatz – in jedem Schritt eine Verbesserung anstreben. Dazu wird aus den mathematischen Eigenschaften von F eine das Ziel-



Schematische Darstellung eines Wafer Scanners zur Belichtung von Halbleiterscheiben bei der Herstellung integrierter Schaltkreise (Bildquelle: ASML, Veldhoven, Niederlande).

funktional verbessernde Suchrichtung bestimmt und die Parameter (mit einer ebenfalls mathematisch zu bestimmenden Schrittweite) in diese Richtung abgeändert. Einfache Verfahren verwenden den Gradienten von F (bzw. seine Negation) als Richtung des steilsten Auf- bzw. Abstiegs. Schneller noch konvergieren die sogenannten *Newton-artigen Verfahren*, und moderne *Quasi-Newton-Verfahren* schaffen dies sogar ohne weitere Informationen über höhere Ableitungen der Zielfunktion. Abstiegsverfahren verbessern mit jedem Schritt die Ausgabe des Systems. Die Verfahren betrachten jedoch immer nur eine kleine Umgebung des aktuell besten Parametersatzes. Der so ermittelte optimale Parametersatz ist im allgemeinen nur *lokal optimal*, d.h. durch kleine Veränderungen lässt sich zwar keine Verbesserung mehr erzielen, durch eine große Veränderung aber vielleicht doch noch. Um das *globale Optimum* zu finden, verwendet man mathematische Algorithmen, die mehrere Startwerte verwenden oder bei denen auch einmal eine Verschlechterung des Zielfunktions in Kauf genommen wird. So beruht das *Simulated-Annealing-Verfahren* auf der durch physikalische Abkühlungsprozesse motivierten Idee, Veränderungen der Parameterwerte entsprechend einem mathematischen Zufallsprozess so zu wählen, dass eine Verschlechterung der Zielfunktion zwar möglich, aber unwahrscheinlicher als eine Verbesserung ist.

4.1.2 Inverse Probleme

Die Bestimmung der Systemeigenschaften x aus den experimentellen Beobachtungen des Systems y führt auf das mathematische Problem, die Gleichung $F(x) = y$ nach x aufzulösen, also zu invertieren. Beschreibt x die Leitfähigkeitsverteilung im Inneren eines Patienten, so lässt sich aus Kenntnis von x der Stromfluss durch diesen Patienten simulieren und damit alle mittels Elektroden durchführbaren Strom-/ Spannungsmessungen y vorhersagen. Die elektrische Impedanztomographie beruht auf der Lösung des inversen Problems, aus einer real stattgefundenen Strom-/Spannungsmessung y , ein Bild der Leitfähigkeitsverteilung x des Patienten zu erhalten.

Ein wesentlicher Gegenstand theoretischer mathematischer Forschung an inversen Problemen betrifft Eindeutigkeitsfragen, also ob sich die gewünschte Information aus den gegebenen Messungen überhaupt rekonstruieren lässt. Die mathematische Eindeutigkeitsfrage hinter der elektrischen Impedanztomographie hat aufgrund ihrer besonderen Bedeutung und Schwierigkeit als sogenanntes *Calderón-Problem* Berühmtheit erlangt.

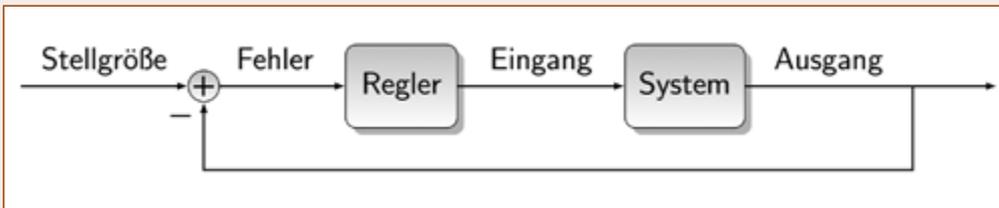
Die praktische Lösung inverser Probleme geschieht oft durch Rückführung auf Optimierungsprobleme. Die wahren Systemeigenschaften x erfüllen die Gleichung $F(x) = y$. Die Simulation des Systems mit diesen Parametern passt also genau zu den real vorgenommenen Messungen. Es liegt daher nahe, die Systemeigenschaften für wahr zu halten, die am besten zu den Messungen passen, d.h. den Abstand von $F(x)$ zur Messung y minimieren. Dieser naheliegende Ansatz liefert jedoch nur für einfache inverse Probleme eine brauchbare Lösung. Viele praktisch relevante inverse Probleme wie die Impedanztomographie besitzen die Eigenschaft der *Schlechtgestelltheit*. Schon kleinste Messfehler verfälschen bei solchen Problemen die am besten zu den Daten passende Lösung bis hin zur völligen Unbrauchbarkeit. Die Geburtsstunde der inversen Probleme als eigenständiges mathematisches Fachgebiet war daher die Erkenntnis, dass sich die wahren Systemeigenschaften nicht durch bestmögliche Anpassung an die gemessenen Daten erhalten lassen, sondern erst durch eine an den Messfehler angepasste mathematische Optimierungsstrategie, die auch

REGELKREIS

Ein offenes dynamisches System besitzt Signaleingänge zu seiner Ansteuerung und Signalausgänge zur Übertragung von Information in die Umgebung. Ein Regler ist ein weiteres meist in einem Computer realisiertes dynamisches System, das mit dem gegebenen System verkoppelt wird. Der in dieser Weise entstehende Regelkreis soll dem Gesamtsystem neue günstige Eigenschaften verleihen.

Für die in (09) gezeigten Konfiguration wäre das Ziel, den Fehler minimal zu gestalten, also den Systemausgang möglichst nahe an die gewünschte Stellgröße heranzubringen.

Balancieren Sie beispielsweise einen aufrecht stehenden Stab auf Ihrer Hand, so bildet der Stab das System, welches Sie als Regler mit Ihrer Handbewegung ansteuern; Ihre Augen dienen als Sensoren, um die Lage des Stabes als Systemausgang zu erfassen, so dass Sie daraus eine geeignete Regelaktion generieren können. Der ohne Regelung instabile Stab wird durch Ihren Einfluss stabilisiert. Haben Sie schon einmal versucht, einen Stab zu balancieren, wobei Sie lediglich den unteren Teil in der Nähe Ihrer Hand ansehen? Ein automatischer Regler wäre dazu in der Lage; die Systemtheorie liefert die mathematischen Einsichten, weshalb dies für einen Menschen i.d.R. unmöglich ist.



Schematische Darstellung eines Regelkreises.

die Regularität der erzielten Lösungen berücksichtigt.

Bei nichtlinearen inversen Problemen tritt auch hier wieder das Problem der lokalen Optima auf. Globale Optimierungsstrategien scheitern oft an der sehr großen Anzahl zu bestimmender Systeminformationen (etwa für ein dreidimensionales Bild des Körperinneren). Die aktuelle mathematische Forschung sucht deshalb auch nach leichter zu rekonstruierenden Teilinformationen. So konnte durch Ausnutzung mathematischer Monotonie-Eigenschaften gezeigt werden, dass Gebietsinformationen in der Impedanztomographie invariant unter Linearisierung sind und sich diese für praktische Zwecke oft ausreichende Teilinformation deshalb vergleichsweise leicht und global konvergent rekonstruieren lässt. Ein weiterer aktueller Forschungsgegenstand ist die Ausnutzung mathematischer Monotonieprinzipien bei der Kombination elektrischer und akustischer Messverfahren zur Erhöhung der Robustheit gegenüber Mess- und Modellierungsfehlern.

4.2 Robust optimale Regelung mit mathematischer Systemtheorie

Die Realisierung fortgeschrittener technischer dynamischer Systeme ist ohne den Einsatz von Regelungstechnik undenkbar. Nur sie ermöglicht beispielsweise die bis in den Nanometerbereich gehende Positionierung eines Silizium Wafers bei der Herstellung integrierter Schaltkreise (08).

Derartige Regler sollten gewisse optimale dynamische Eigenschaften für das gesamte System erzwingen, so dass beispielweise die Positionierung eines Wafers nicht nur sehr genau, sondern auch schnellstmöglich vonstattengeht. Moderne Verfahren machen Gebrauch von mathematischen Modellen der zugrunde liegenden dynamischen Systeme, die meist die Form von gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen annehmen. Solche Modelle entstehen in interdisziplinären Teams in enger Zusammenarbeit mit dem jeweiligen Anwendungsgebiet, wie etwa das der Mechatronik. Mittels geeigneter Optimierungsmethoden wird das Regelungskonzept (beschrieben wiederum durch Dif-

ferentialgleichungen) so entworfen, dass der resultierende Regelkreis vorab formulierte gewünschte Optimalitätseigenschaften aufweist. Ein Hauptaugenmerk der mathematischen Systemtheorie oder der theoretischen Regelungstechnik liegt in der Entwicklung und Bereitstellung von Algorithmen, die den Entwurf derartiger *optimaler Regler* erst ermöglichen.

Wie in diesem Artikel an verschiedenen Stellen mehrfach betont, spiegeln mathematische Modelle die Realität nie mit voller Präzision wider, da Parameter nicht genau bestimmt werden können oder gar dynamische Aspekte vernachlässigt wurden. Je genauer die physikalische Wirklichkeit abgebildet werden soll, desto komplexer gestaltet sich ihre mathematische Beschreibung, wodurch gerade der Entwurf von Rückkopplungsreglern aufwändig wird. Daher basiert die Berechnung optimaler Regelgesetze meist auf vereinfachten Modellen, die durch systematische mathematische Reduktionsmethoden erzeugt werden und günstigenfalls mit einer guten Abschätzung des entstehenden Fehlers einhergehen.

All diese Aspekte der Abweichungen eines Modells von der physikalischen Realität werden in der Systemtheorie unter dem Begriff der Unsicherheit subsumiert. Der zu entwerfende Regler sollte dann so gestaltet sein, dass er die gewünschten Optimalitätseigenschaften auch tatsächlich für alle Systeme realisiert, die durch das gehandhabte Unsicherheitsmodell erfasst (oder genauer gesagt nicht falsifiziert) werden – man spricht von einem robusten Reglerentwurf, der sich spezieller Methoden der *robusten Optimierung* bedient. Robustheit ist insbesondere deshalb relevant, weil jeder Regler zunächst durch computer-gestützte Simulationen anhand eines Modells analysiert wird, bevor er in einer Implementierung an das zu regelnde physikalische System gekoppelt werden kann; fehlende Robustheit kann leicht zu unerwünschtem Systemverhalten oder gar zur Instabilität führen.

Aus mathematischer Sicht handelt es sich um spieltheoretische Minimax-Probleme über Strategien, deren exakte Lösung sich aufgrund der numerischen Komplexität häufig als unmöglich erweist. Als erfolgreich hat sich eine Vorgehensweise herausgestellt, die auf gezielte Art ein solches schweres Optimierungsproblem in ein einfacher zu lösendes konvexes Problem

überführt, das zumindest approximativ optimale Lösungen erzeugt. Einige erst in den letzten Jahren entwickelte Techniken basieren beispielsweise auf tiefgehenden Sätzen der reellen algebraischen Geometrie und eröffnen neue Möglichkeiten in der praktischen Regelungstechnik.

Heutige Zugänge dieser Art sind monolithisch und erlauben lediglich für ein einziges System den Entwurf eines robust optimalen Reglers. Die zugrundeliegenden Konzepte sind aber sehr vielversprechend, um auch eine Vielzahl miteinander vernetzter Systeme zu handhaben. Ein typisches Beispiel sind smart grids, intelligente Netze zur effizienten Verteilung elektrischer Energie angesichts heterogener Stromerzeuger und Verbraucher in einem hochdynamischen Umfeld. Mathematisch gesehen entstehen diese aus einer Verkopplung heterogener dynamischer Systeme zu einem zu optimierenden Gesamtsystem. Aus Komplexitätsgründen ist es nicht möglich oder nicht erwünscht, derartige Netze zentral anzusteuern. Idealerweise sollten also lediglich einzelne Systemkomponenten dezentral geregelt werden, um optimales Verhalten auf der Ebene des Gesamtsystems zu erzielen. Ein solches Szenario ist der Quell vielfältiger Unsicherheiten, nicht nur auf der Systemkomponentenebene, sondern auch von struktureller Art in der Vernetzung der Systeme oder der Kommunikationsinfrastruktur zur Implementierung der Regler.

Eine mathematische Systemtheorie vernetzter Systeme steckt hierbei noch in den Kinderschuhen. Die Umsetzung vorhandener struktureller Eigenschaften der Verkopplung – meist gefasst in der Sprache der Graphentheorie – in effiziente Entwurfstechniken ist trotz intensiver Forschung in den letzten Jahren noch nicht sehr weit fortgeschritten. Sowohl die Handhabung der daraus resultierenden numerischen Komplexität als auch deren Umsetzung in robuste Algorithmen und Simulationsumgebungen für den zukünftigen effizienten industriellen Einsatz bilden einen Themenschwerpunkt in der zweiten Förderungsphase des Exzellenzclusters SimTech.

• Bernard Haasdonk
Bastian von Harrach
Christian Rohde
Carsten Scherer
Guido Schneider
Kunibert G. Siebert

DIE AUTOREN



- a) **JUN.-PROF. DR. BERNARD HAASDONK**
 ist seit 2009 Nachwuchsgruppenleiter am Fachbereich Mathematik. Forschungsthemen sind Modellreduktion, Reduzierte Basis Methoden, Kermethoden, Maschinelles Lernen.
- b) **PROF. DR. BASTIAN VON HARRACH**
 folgte nach Professuren an der TU München und der Universität Würzburg dem Ruf nach Stuttgart und leitet hier seit März 2013 den Lehrstuhl für Optimierung und inverse Probleme am Fachbereich Mathematik. Ein Schwerpunkt des Lehrstuhls sind mathematische Inversionsverfahren für neuartige Tomographiemethoden. (Foto: Andreas Heddergott / TU München)
- c) **PROF. DR. CHRISTIAN ROHDE**
 ist seit 2007 Professor an der Universität Stuttgart. Seine Hauptforschungsgebiete liegen im Bereich der Modellierung, Analysis und numerischen Simulation für nichtlineare partielle Differentialgleichungen. Als Anwendungen werden Evolutionsprozesse in der Störungs- und Festkörpermechanik betrachtet.
- d) **PROF. DR. CARSTEN SCHERER**
 leitet seit März 2010 den im Rahmen des Exzellenzclusters SimTech neu etablierten Lehrstuhl für Mathematische Systemtheorie im Fachbereich Mathematik. Ein Schwerpunkt des Arbeitsgebietes ist die Entwicklung optimierungsbasierter Methoden des robusten Reglerentwurfs für komplexe vernetzte Systeme.
- e) **PROF. DR. GUIDO SCHNEIDER**
 ist seit 2006 Professor an der Universität Stuttgart. Seine Hauptforschungsgebiete liegen im Bereich der Dynamik nichtlinearer partieller Differentialgleichungen und insbesondere in der Rechtfertigung effektiver Modelle der Strömungsmechanik, der Nichtlinearen Optik oder der Quantenmechanik.
- f) **PROF. DR. KUNIBERT G. SIEBERT**
 ist seit 2011 Professor an der Universität Stuttgart. Die drei Schwerpunkte seiner Forschung sind die Analyse adaptiver Finiten Elemente für nichtlineare partielle Differentialgleichungen, Entwicklung effizienter adaptive Finiten Elemente Software, sowie Wissenschaftliches Rechnen. In den Forschungsvorhaben beeinflussen sich diese Schwerpunkte gegenseitig.

Kontakt

Universität Stuttgart
 Fakultät 8, Fachbereich Mathematik
 Tel. +49 (0) 711/685-65525
 E-Mail: christian.rohde@mathematik.uni-stuttgart.de
 Internet: <http://www.mathematik.uni-stuttgart.de/fak8/ians/index.html>