

Computersimulationen und Technologiefortschritt – ein symbiotisches Duo

Manfred Krafczyk

Die Effizienz und Genauigkeit computergestützter Analysen und Verhaltensprognosen komplexer Systeme in Natur und Technik basieren auf Fortschritten der numerischen Mathematik, der Informatik und der technischen Fachdisziplinen. An Beispielen ausgewählter ingenieurrelevanter Probleme werden grundsätzliche Anforderungen an Simulationssysteme erläutert. So beeindruckend manche Erfolge im Bereich der computergestützten Simulation (insbesondere dem Laien) erscheinen, zeigt sich jedoch auch eine zunehmende Tendenz, bei der Bewertung solcherart erzeugten „Wissens“, grundlegende Unsicherheitsfaktoren zu ignorieren oder falsch zu interpretieren. Die Bewertung von Ergebnissen computerbasierter Simulationen setzt daher ein vertieftes Wissen bezüglich des Ursprungs potentieller Fehlerquellen voraus. Eine verlässliche Automatisierung der Qualitätssicherung von Simulationen komplexer Ingenieurprobleme bleibt daher noch weitgehend der Zukunft vorbehalten.

Vom Ingenieurproblem zur Formulierung

Ingenieure müssen den Entwurf ihrer Konstruktionen nicht nur gegen Beanspruchungen in den Gebrauchszuständen, sondern auch gegen potentielle Gefährdungen absichern, für die es oft gar keine Erfahrungen gibt. Im letzteren Falle sind Verhaltensprognosen nur durch Simulationen mit computergerechten Modellen gewinnbar. In Abb. 1 ist als Beispiel der simulierte Anprall einer Flutwelle auf eine Brücke dargestellt. Um auch für diesen Fall die Standsicherheit der Brücke nachzuweisen, müssen Brücke, Flutwelle, Baugrund der Widerlager und die Strömungsmechanik in berechenbare Modelle übersetzt werden.

- Wie läuft eine – mit Schlamm und Geröll angereicherte – Flutwelle gegen ein Hindernis?
- Welche Kräfte wirken beim Wellenschlag auf die Brücke? Hält sie stand?
- Ist die Gründung ausreichend, ein Versagen der Fundamente zu verhindern?
- Welche dynamischen Kräfte wirken bei der Überspülung?
- Wird das Flußbett durch die turbulente Strömung im Nahfeld der Pfeiler ausgekolkt?

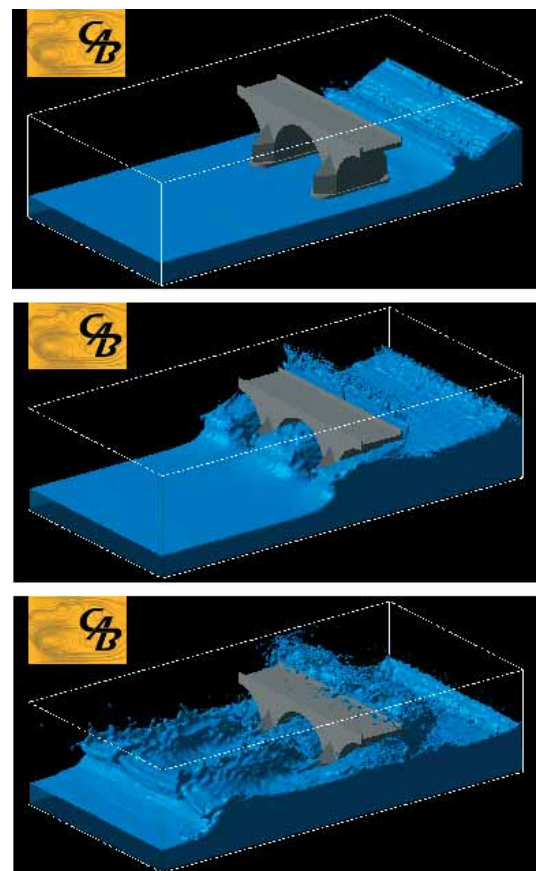
Die prinzipielle Vorgehensweise bei der Lösung solcher Fragestellungen durch Computer-Simulationen wird nachfolgend erläutert.

Von der Modellierung zur Ergebnisanalyse

Die Verwendung von Computern hat in den letzten Dekaden unsere Gesellschaft transformiert; ein Prozeß, der weiterhin andauert und in seinen

Folgen durchaus ambivalent bewertet wird. Neben einer weitgehend globalen Verfügbarkeit von Daten über das Internet und dem Einsatz von spezifischer Hardware zur vielfältigen Steuerung technischer Systeme im Bereich des Maschinenbaus, der Telekommunikation, der Medizin und der Elektronik (um nur einige zu nennen) werden

Abb. 1
Simulation einer Flutwelle, die auf eine Brücke trifft. Von Interesse ist neben der mechanischen Belastung der Struktur durch die Welle auch die Frage, ob es zu einer Überspülung des Bauwerks kommt und welche Folgen dies hat



Computer im technischen und wissenschaftlichen Bereich vorwiegend eingesetzt, um das Verhalten bestehender oder geplanter Systeme zu analysieren. Diese Art der Simulation hat sich neben rein theoretischen und experimentellen Methoden als drittes Standbein der Wissenschaft etabliert. In diesem Kontext dient der Computer als sensorische und mentale Prothese, die unseren Erfahrungsbereich drastisch erweitert. Dies wird ermöglicht, in dem Berechnungs-Modelle als Ersatz für reale Systeme entwickelt werden, die uns durch ihr in der Simulation gezeigtes Verhalten ein mehr oder minder detailliertes Bild vermitteln, wie sich das modellierte reale System raumzeitlich zu verschiedenen Szenarien entwickeln würde. Die Prozeßkette der Modellierung und Simulation hat die folgenden funktionalen Bestandteile:

Das physikalisch-mechanische Modell: Hier werden die als wesentlich angenommenen Komponenten des Modellsystems und die zugehörigen Eigenschaften definiert. Ferner erfolgt die Festlegung, welche Effekte (z.B. chemische, mechanische, biologische, thermische, elektrische etc.) berücksichtigt und welche Art von Modellen verwendet werden sollen (Struktur, Strömung, Strahlung u.a.).

Das mathematische Modell beschreibt die quantitative Wechselwirkung zwischen den oben definierten Systemkomponenten und den Einwirkungen. Für das in den Abb. 2 und 3 dargestellte Beispiel der Kühltürme sind dies z.B. die Eigenschaften des Betons und des Baugrunds und als Einwirkungen Windlasten. Die Mehrzahl der heute verwendeten mathematischen Modelle sind partielle Differentialgleichungen, die das Verhalten interessierender Größen (z.B. Kräfte oder Flüsse) aus Erhaltungssätzen (Masse, Impuls, Energie) oder Extremalprinzipien (z.B. Prinzip der kleinsten Wirkung) als algebraische Beziehungen zwischen funktionalen und vorgegebenen Größen sowie zusätzlichen Quelltermen repräsentieren.

Rand- und Anfangsbedingungen: Da meist räumlich und zeitlich beschränkte Systeme betrachtet werden, muß definiert werden, welche Rand- und Anfangsbedingungen anzunehmen sind und welche Einflüsse von Außen auf das System wirken. Sonneneinstrahlung, Temperaturdifferenzen zwischen Innen- und Außenseite der Bewandung, ungleichmäßige Fundamentsetzungen oder Erdbeben. Weiterhin wird die interne Geometrie eines Problems über spezielle Übergangsbedingungen der primären Variablen sowie ihrer zeitlichen oder räumlichen Änderungen definiert. Ähnlich, wie der Inhalt eines Kreuzworträtsels über die vorliegenden Wortbeschreibungen sukzessive zu ermitteln ist, legen die Rand- und Anfangsbedingungen die Lösung der Modellgleichungen fest.

Numerische Diskretisierung: Nur in Ausnahmefällen ist es möglich, die Lösung der im ersten Arbeitsschritt genannten Differentialgleichungen durch Anpassen analytisch vorgegebbarer Funktionen zu erhalten. Hierbei leisten Computeralgebra-systeme, welche eine *symbolische* Manipulation mathematischer Ausdrücke erlauben, wertvolle Dienste. Im allgemeinen Fall wird das Berechnungsgebiet in endlich viele diskrete Teilgebiete zerlegt (Abb. 2c). Für diese Teilgebiete werden die Differentialoperatoren näherungsweise durch arithmetische Ausdrücke ersetzt, deren algebraische Beziehungen eine algorithmisch eindeutige Berechnungsvorschrift zur Ermittlung von Näherungslösungen auf den Teilgebieten oder deren Verbindungsknoten ermöglichen. Die Genauigkeit solcher numerisch ermittelter Näherungslösungen hängt von der gewählten Komplexität der lokalen Näherung und der Anzahl der Gebietsunterteilungen ab, da die unbekannt Lösungen durch die Aneinanderreihung einfacherer lokaler Funktionen meist beliebig angenähert werden können. Beide Möglichkeiten der Ergebnisverbesserung erhöhen die Anzahl der Freiheitsgrade der Näherungslösung (i.e. der zu berechnenden Zahlenwerte) und damit den Berechnungsaufwand, d.h. Genauigkeit hat ihren Preis. Auf Höchstleistungsrechnern sind heutzutage Simulationen mit mehr als zehn Milliarden Freiheitsgraden möglich.

Implementation und eigentliche Berechnung: Für technische Simulationen ist das mathematisch-physikalische Problem für einen vorzuziehenden

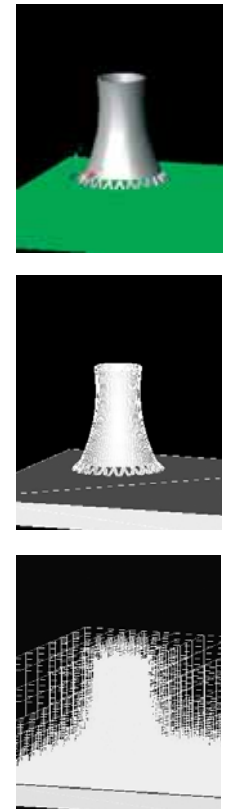


Abb. 2
Modellrepräsentationen eines Kühlturms: a) CAD-Modell (Splines), b) STL-Modell (ebene Dreiecke), c) kartesisches Raumgitter zur numerischen Berechnung von Konstruktion und Luftströmung

Abb. 3
Versagen einer Kühlturmgruppe in Ferrybridge (England, 1965)

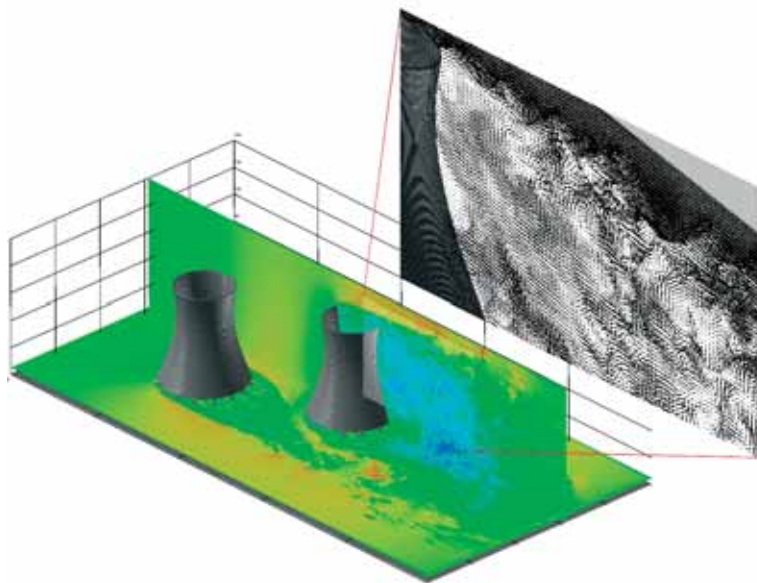
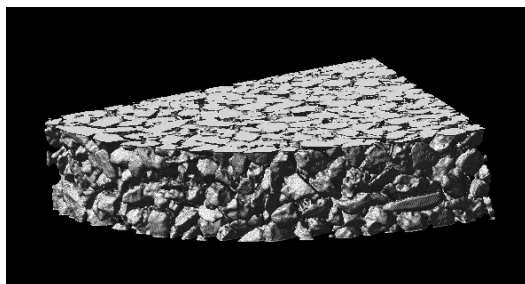


Abb. 4
Simulation des zeitabhängigen, räumlichen Strömungsfeldes um zwei Kühltürme mit einer Höhe von 100 m. Der Wind bläst von oben links nach unten rechts. Die Färbung der Schnittebenen bezieht sich auf die Größe der zum Wind parallelen Strömungsgeschwindigkeitskomponente (rot: hohe Geschwindigkeit stromabwärts, blau: hohe Geschwindigkeit stromaufwärts). Die Ausschnittsvergrößerung zeigt die starken Verwirbelungen als Vektordarstellung. Obwohl diese Berechnung fast zwei Milliarden Freiheitsgrade umfaßt, können nur die größeren Wirbel ($> 1\text{m}$) berücksichtigt werden

Abb. 5
Rekonstruktion einer realen Sandprobe (0,2 Kubikzentimeter) durch Mikrotomographie. Solche Proben dienen als Ausgangsgeometrie zur mikroskaligen Simulation des Schadstofftransports in Böden (mit freundlicher Genehmigung ITÖ, ETH Zürich [1])



Prototyp (Gebäude, Auto, etc.) zu lösen, welcher von Entwurfsingenieuren oder Architekten meist als Computer-Aided-Design (CAD)-Modell vorliegt (Abb. 2a). Alternativ kann auch die digitale Rekonstruktion eines natürlichen Objektes eine geometrische Ausgangsbasis darstellen sein (Abb. 5). Das Berechnungsprogramm muß in der Lage sein, unterschiedliche geometrische Modelle zu erfassen, mit den problemspezifischen Rand- und Anfangsbedingungen zu ergänzen, die Struktur und die Zeit zu diskretisieren und dann den eigentlichen Berechnungsprozeß durchzuführen. Im Grenzfall muß die Simulation bis in Zerstörungszustände gehen (Abb. 3 zeigt einen realen Versagensfall).

Ergebnisauswertung: Die erhaltene Näherungslösung liegt im Anschluß an die Berechnung in

einer Form vor, die erst durch Aufbereitung in fachspezifische Darstellungsformen zur Einsicht führt. Für dreidimensionale und zeitabhängige Probleme kann diese Nachbearbeitung selbst einen aufwendigen, iterativen Berechnungsprozeß erfordern, siehe Abb. 4. Weitere Beispiele für Darstellungen komplexer Strömungsprozesse sind in Abb. 6 für die Dynamik von Luftblasen in einem Abwasserreaktor und in Abb. 7 für die lokale Temperaturverteilung in einem Brutkasten für Frühgeburten gezeigt.

Gründe für die wachsende Bedeutung von Computersimulationen

Die oben skizzierte Prozesskette hat sich schon seit mehr als vierzig Jahren bewährt. Zwei Faktoren haben jedoch zum Boom von Computersimulationen besonders beigetragen:

Beschleunigung des Berechnungsvorgangs durch Fortschritte der numerischen Mathematik

Im Laufe der letzten dreißig Jahre wurden im Bereich der numerischen Mathematik qualitativ neue Ansätze entwickelt, die den Berechnungsaufwand zur näherungsweise Lösung von Differentialgleichungen für vorgegebene Genauigkeiten um bis zu sechs Größenordnungen reduzieren. Stichwortartig seien hier Mehrgitterverfahren [2] und adaptive Ansätze [3] erwähnt. Bei letzteren wird durch eine *a posteriori* Fehlerschätzung des lokalen Diskretisierungsfehlers mit anschließender Modifikation der lokalen Diskretisierung der Berechnungsaufwand in die Problemzonen mit den größten Sensitivitäten verlagert (Abb. 8). Dies minimiert bei vergleichbarem Berechnungsaufwand den globalen und lokalen Diskretisierungsfehler.

Beschleunigung des Berechnungsvorgangs durch Fortschritte in der Computerhard- und software

In den letzten sechs Dekaden hat sich die Anzahl der pro Sekunde von einem Computer durchführbaren Rechenoperationen um zwölf (!) Größenordnungen erhöht. Diese Leistungssteigerung erfolgte zum einen durch die Verbesserung von Prozessor und Hardware, zum anderen durch die Verwendung von Parallelrechnern, bei denen sich bis zu Tausende von Prozessoren die Bearbeitung eines Gesamtproblems teilen und somit die Berechnungszeit reduzieren.

Durch diese dramatischen Effizienzsteigerungen wird die Durchführung von numerischen Simulationen auch für komplexe Modelle aus Wissenschaft und Technik mit akzeptabler Genauigkeit ermöglicht. Im Bereich der Elektrotechnik und Informatik tragen aufwendige Simulationen substantiell zur Weiterentwicklung der Computerhardware bei. Hier handelt es sich um eine positive Rückkopplung, deren Ende noch nicht abzusehen ist. Der Hunger nach leistungsfähigerer

Hard- und Software ist ungebrochen. So erfordern beispielsweise Modelle der computergestützten Klimaforschung Berechnungskapazitäten, die viele Größenordnungen über denen der aktuell verfügbaren Höchstleistungsrechner liegen.

Geschwindigkeit ist nicht alles ...

Die staunenswerte Leistungssteigerung der computergestützten Simulation und ihr maßgeblicher Einfluß auf die Entwicklung von Technik und

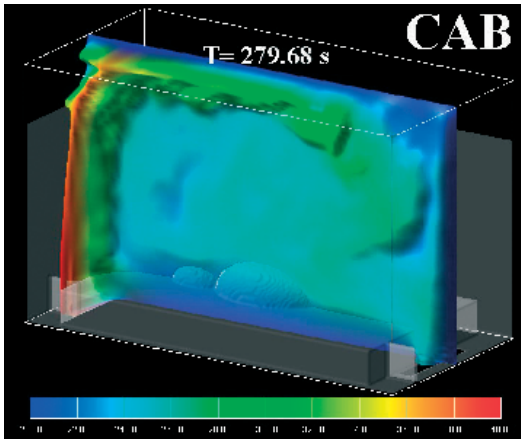
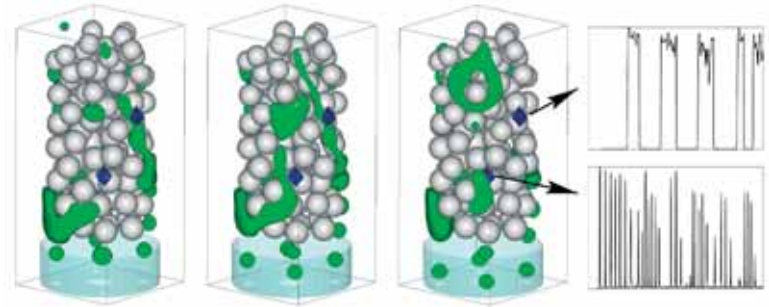


Abb. 7
Momentaufnahme der turbulenten thermischen Strömung in einem Brutkasten ca. 5 min. nach einem Kaltstart mit 20° Celsius. Links unten strömt warme Luft zu, rechts strömt die verbrauchte Luft ab. Die Temperaturverteilung ist für die mittlere Ebene durch Farb- und Höhenkodierung dargestellt. Die Matratze des Neugeborenen hat sich noch nicht aufgeheizt. Nach Ansicht von Medizinern beeinträchtigen die in der Simulation auftretenden Temperaturfluktuationen die Gesundheit eines Neugeborenen (durch zwei Ellipsoide im unteren Bildbereich stilisiert) [4,5]

Wissenschaft darf nicht darüber hinwegtäuschen, daß eine alleinige Beschleunigung der Berechnungsprozesse bei weitem nicht den Ansprüchen genügt, die speziell im Bereich der Technikwissenschaften erforderlich sind. In der Ingenieurpraxis zeigt sich zunehmend die Tendenz, teure und komplexe Softwaresysteme einzusetzen und den erzielten Berechnungsergebnissen über Gebühr zu vertrauen, indem z.B. aus der Genauigkeit der numerischen Näherungslösung auf die Realitätsnähe des der Berechnung zugrunde liegenden physikalisch-mathematischen Modells geschlossen wird. Oft wird die eingesetzte Software durch schlichten Kenntnismangel ihrer Funktionalität suboptimal verwendet. Die erste Problematik wird insbesondere dann bedeutsam, wenn die der Berechnung zugrunde liegenden



mathematischen Modelle so komplex sind, daß eine vorausgehende Validierung nicht durchführbar ist. Dies ist insbesondere der Fall, wenn das zu lösende Problem eine Funktion vieler qualitativ unterschiedlicher Prozesse ist (sog. Multi-Physics-Probleme), die auf unterschiedlichen Skalen in Zeit und Raum wechselwirken, z.B. Abb. 4 und 6. Solche Probleme sind in vielen Ingenieurdisziplinen von zunehmendem Interesse. Begnügte man sich beispielsweise früher damit, den Tragfähigkeitsnachweis eines Bauwerkes über vereinfachende Annahmen für statisch-mechanische Lasten zu simulieren, zielen heutige Modelle zunehmend auf die Berücksichtigung dynamischer, deterministischer oder statistischer Lasten durch Windeinwirkung, strahlungsinduzierte Temperaturschwankungen sowie chemischer und geotektonischer Einflüsse, um nur einige zu nennen.

Für solche komplexen Modelle erzielen die oben erwähnten Methoden der numerischen Mathematik oftmals keine signifikante Beschleunigung. Adaptive Fehlerschätzer müssen meist mit großem Aufwand modellspezifisch entwickelt oder angepaßt werden. Als Analogie kann hier das Bild von der hochspezialisierten Numerik als Sportwagen erhalten, der im rauen Gelände komplexer Ingenieurprobleme durch mangelnde Robustheit keine oder nur geringe Geschwindigkeitsvorteile bietet, auf der Autobahn idealisierter Modellprobleme aber seine spezifischen Op-

Abb. 6
Durchströmung eines Labor-Festbett-Reaktors zur Abwasserreinigung mit einem Wasser-Luft-Gemisch. Die grün gefärbten Luftblasen durchlaufen die Kugelpackung und bilden dabei komplexe Blasenformen (die Wasserkomponente ist ausgeblendet). Die beiden blauen Rauten symbolisieren Messorte, an denen der zeitliche Verlauf der Luftkonzentration gemessen wird. Diese variiert innerhalb des Systems deutlich, wie an den beiden rechten Diagrammen zu sehen ist

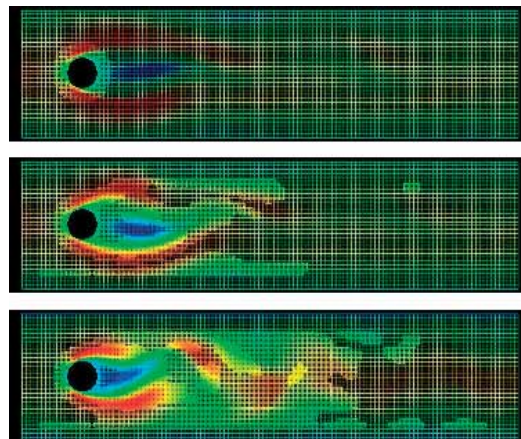
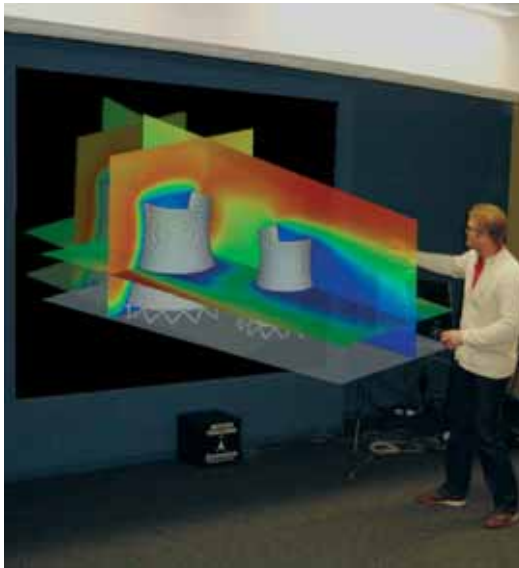


Abb. 8
Adaptive Simulation einer zeitabhängigen Zylinderumströmung zu drei unterschiedlichen Zeitpunkten. Die Farben repräsentieren den Betrag der horizontalen Geschwindigkeitskomponente. Ausgehend von der a priori Diskretisierung (oben) orientiert sich die zunehmende Verfeinerung des Gitters an dem Betrag des lokal geschätzten Fehlers

Abb. 9
 Interaktive Bearbeitung eines Kühlturmmodells in einer Virtual Reality-Umgebung. Die farbigen Schnittebenen charakterisieren die Windströmung wie in Abb. 4. Die Fotomontage vermittelt eine Idee von dem räumlichen Eindruck der Szenerie. Dieser kommt zustande, wenn der Betrachter das von hinten auf die Leinwand projizierte Stereobildsignal mit einer speziellen Brille betrachtet, welche durch unterschiedlich polarisierte Gläser den Augen je ein perspektivisches Teilbild liefert. Dadurch kann der Beobachter in die Szene „eintauchen“ (Immersion) und komplexe räumliche Zusammenhänge erkunden, als ob er Teil des Systems wäre. Mit Ansätzen des Computational Steering können auch direkt an den Objekten der Anschauung Systemmodifikationen vorgenommen werden (z.B. die relative Position der Türme verändern). Der Verbund mit einem Strömungssimulator erlaubt die automatisierte Berechnung der Systemantwort (z.B. die schwingungsinduzierenden Kräfte auf die Bauwerke)



timierungen ausspielen kann. So verwundert es nicht, daß zugunsten der *Robustheit* in vielen kommerziellen Simulationswerkzeugen numerische Algorithmen implementiert werden, die (vergleichbar einem Geländewagen) eine Näherungslösung (das Fahrtziel) nur in suboptimaler Rechenzeit (i.e. im Schrittempo) zu finden erlauben.

Neben der Effizienzsteigerung durch schnelle Hardware und effiziente Numerik wird zunehmend auch der Ablauf einer Simulation selber hinterfragt. In der Industrie erfolgt die computer-gestützte Entwicklung von Prototypen fast ausschließlich als iteratives Durchlaufen eines monodirektionalen Zyklus aus Design, Diskretisierung, Berechnung und Auswertung mit jeweils anschließender Designmodifikation. Dieses Vorgehen ist vor allem bei sehr komplexen Simulationen nicht sehr effektiv, da sich oft erst während der Berechnungsphase herausstellt, wie Randbedingungen oder Prozeßparameter optimal gestaltet werden sollten.

Eine Korrektur wesentlicher Modelleigenschaften während der Berechnung erlauben neueste Ansätze des sog. Computational Steering. Diese ermöglichen dem Bearbeiter, die Entwicklung und Optimierung der gesuchten Lösung aktiv unter Einsatz seines Fachwissens zu gestalten, anstatt bei jeder Modifikation des Designs die zeitintensive Berechnung komplett zu wiederholen. Solche Simulationskonzepte erfordern neben einer automatischen Gittergenerierung auf Basis des aktuellen geometrischen Modells auch die zur Berechnung parallele Visualisierung des evolvierenden Systemzustandes. Mit einem solchen vereinheitlichten Prä- und Postprocessingwerkzeug führt der Bearbeiter seine Optimierungen an den Objekten seiner Anschauung aus (Abb. 9). Handelt es sich um ein dynamisches Problem in Raum und Zeit, erfolgt die Optimie-

rung idealerweise in einem immersiven Entwurfsraum, der auf Methoden der *Virtual Reality* basiert, bei denen durch z. B. Mehrkanalprojektion dem Betrachter visuell suggeriert wird, er befände sich *innerhalb* des simulierten Systems.

Wohin geht die Entwicklung?

Die wechselseitige Effizienzsteigerung von Simulationsmethoden und der Beschleunigung von Computerhardware wird auf absehbare Zeit andauern, auch wenn die derzeitige siliziumbasierte Technologie sich mittelfristig vielleicht anderer Träger bedienen wird. Dies gilt ebenso für die Weiterentwicklung der numerischen Methoden für mehrskalige Ingenieurprobleme. Die oben skizzierten Ansätze, welche eine direktere und intuitivere Wechselwirkung mit Simulationssystemen ermöglichen sollen, befinden sich noch weitgehend in der Entwicklung. Im Zusammenspiel mit modernen Programmierkonzepten (Objektorientierung und visuellem Programmieren) muß ein langfristiges Ziel sein, die für die Simulation notwendige Qualität und Effizienz der Mensch-Maschine-Interaktion qualitativ zu verbessern. Dieser nur durch interdisziplinäre Arbeiten zu erreichende Fortschritt in Verbindung mit gut validierten Ingenieurmodellen wird uns langfristig in die Lage versetzen, verlässliche Prognosen auch über außergewöhnliche Ereignisse (Abb. 1 u. 3) zu machen, ohne diese erst mit allen unangenehmen Folgewirkungen der Gesellschaft zumuten zu müssen.

Anschrift des Verfassers:

Prof. Dr.-Ing. habil. Manfred Krafczyk
 TU Braunschweig
 Institut für Computeranwendungen im
 Bauingenieurwesen (CAB)
 Pockelsstraße 3
 38106 Braunschweig

Literatur

- [1] Die Tomographie wurde erstellt durch Mitarbeiter von Prof. Fühler, Inst. für terrestrische Ökologie, ETH Zürich (<http://www.ito.umnw.ethz.ch>) an der *Swiss Light Source* des Paul-Scherrer-Instituts (<http://www.psi.ch/>)
- [2] U. Trottenberg, C. Oosterlee, A. Schüller, *Multigrid*, ISBN 0-1-701070-X, Academic Press, 2001
- [3] R. Becker and R. Rannacher, *An optimal control approach to a-posteriori error estimation in finite element methods*, in *Acta Numerica*, A. Iserles, ed., Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2001
- [4] W. J. R Daily., M. Klaus, and H.B.P. Meyer, *Apnea in premature infants: monitoring incidence, heart rate changes, and an effect of environmental temperature*, *Pediatrics*, 43, 510-518, 1969
- [5] P. H. Perlstien, N. K. Edwards, and J. M Sutherland, *Apnea in premature infants and incubator air temperature changes*, *N. Engl. J. Med.*, 282, 461-466, 1970