

Was ist eigentlich Wissenschaftliches Rechnen?

Die Modellierung der Wirklichkeit

| CARSTEN BURSTEDDE | Neben Theorie und Experiment bietet das „Wissenschaftliche Rechnen“ eine weitere Methode, auf wissenschaftliche Fragestellungen eine Antwort zu finden. Was ist neu an dieser Art, Wissenschaft zu betreiben, und wie funktioniert sie?

Der Begriff „Wissenschaftliches Rechnen“ oder seine englische Übersetzung „scientific computing“ erklärt sich nicht gerade von selbst. Tatsächlich geht es um eine klare Zielsetzung: Die Antwort auf wissenschaftliche Fragestellungen soll mit dem Computer berechnet werden. Inwieweit ist dieser Zugang nun eine neue Art, Wissenschaft zu betreiben, und was ist daran spannend?

Traditionell stützt sich die Wissenschaft auf das Zusammenspiel von Theorie und Experiment. Der Legende nach fiel Isaac Newton ein Apfel auf den Kopf: Das war für ihn ein experimenteller Befund, der einer allgemeinen Erklärung bedurfte. In seinem Fall brachte ihn das dazu, die Theorie von der gegenseitigen Anziehung aller Massen aufzustellen; die Entwicklung ging also vom Experiment zur Theorie. Bei Einstein verlief es umgekehrt: Theoretische Überlegungen führten auf kurze aber bis dato unbekannte Gleichungen, die vielen Zeitgenossen so mysteriös erschienen, dass es Jahrzehnte von bestätigenden Experimenten bedurfte, bis die Fachwelt sie für vernünftig hielt. In beiden Fällen galt, was heute noch immer gilt, nämlich dass eine Theorie nur solange akzeptabel ist, wie sie nicht im Widerspruch zum Experiment steht.

Leider sind viele Fragestellungen experimentell unzugänglich. Beispielsweise sind viele chemische Vorgänge für direkte Messungen zu kleinskalig und schnell, während die Entstehung von Gebirgen zu großskalig und langsam ist. Autocrashtests sind umständlich und teuer, und wie sich ein Atomsprenkopf in hundert Jahren verhält kann heute niemand sicher vorhersagen. Auch die Untersuchung von Hypothesen kann interessant sein: Wie würde sich z.B.

»Die Antwort auf wissenschaftliche Fragestellungen soll mit dem Computer berechnet werden.«

das Klima in Europa ändern, wenn der Golfstrom stehenbleibt oder die Erdachse kippt? Wie würde sich der Kosmos mit einem anderen Gravitationsgesetz entwickelt haben?

Die Schwierigkeiten in der Theorie sind ähnlich fundamental. Beispielsweise sind die Gleichungen, die die Strömung von Wasser beschreiben, seit fast zweihundert Jahren bekannt, aber wir wissen bis heute noch nicht einmal, ob sie überhaupt eine Lösung haben.

Das Wissenschaftliche Rechnen versucht, diese Lücken zu schließen, indem eine Theorie dazu entwickelt wird, wie sich reale und hypothetische Szenarien mathematisch formulieren lassen, wie und in welcher Zeit wir mit dem Computer eine Näherungslösung berechnen können, und wie groß der Fehler zur (unbekannten) wahren Lösung ist. Der Vergleich von Simulationsergebnis und Experiment ist ein effektiver Test einer

Simulationsmethode, da er Fehler in der gesamten Kette von der Problemstellung über die Theorie bis zur Programmierung und Auswertung offenbaren und Aufschluss darüber geben kann, an welchen Punkten nachgebessert werden muss.

Wir können nun solche numerischen (Computer-)Simulationen nutzen, um Gedankenexperimente in einem Detailgrad durchzuführen, der auf den ersten Blick nur von der Größe des verfügbaren Computers begrenzt ist. In Wahrheit ist der begrenzende Faktor jedoch die Effizienz der verwendeten Rechenvorschriften, weswegen diese ein ganz zentraler Forschungsgegenstand des Wissenschaftlichen Rechnens ist.

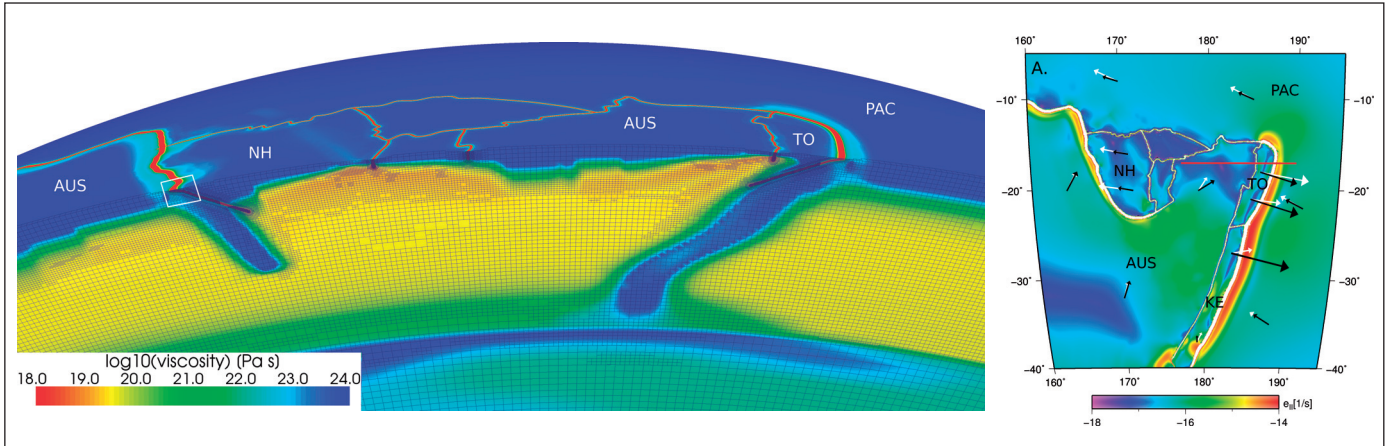
Wie funktioniert das nun genau?

Zunächst muss überlegt werden, wie die oben erwähnten Fragestellungen überhaupt in den Computer kommen, der per se nichts mit Begriffen wie „Molekül“ oder „Galaxie“ anfangen kann. Auf ganz kleinen oder ganz großen Skalen können solche Systeme als Ansammlung von Punkten modelliert werden, die die einzelnen Atome bzw. Sterne darstellen. Aus der Physik wissen wir, welche Kräfte zwischen den einzelnen Punkten herrschen, und wie die Kräfte die Bewegung der Punkte beeinflussen. Die gute Nachricht ist, dass wir daraus Gleichungen ableiten können, die den Ort und die Geschwindigkeit jedes einzelnen Punktes zu einem Zeitpunkt bestimmen, der eine kleine Zeitspanne in der Zukunft liegt, und dass der Computer diese Gleichungen im Prinzip lösen kann. („Klein“ ist hier relativ: in der Moleküldynamik geht es um millionstel milliardstel Sekunden und in der Entwicklung von Galaxien um Jahrmillio-



AUTOR

Dr. Carsten Burstedde ist Professor für Wissenschaftliches Rechnen am Institut für Numerische Simulation der Universität Bonn.



Links: Computersimulation der Gesteinsströme im Erdmantel und der Bewegung der tektonischen Platten (hier gezeigt die australische, pazifische und mehrere kleinere Platten) mit einem Rechengitter variabler Zellgröße. Die Farbskala stellt die Viskosität, also die Zähigkeit des Gesteins dar.. Rechts: Vergleich von Messungen der Plattenbewegungen (weiße Pfeile) mit Simulationsergebnissen (schwarz; Farbskala: Verformungsrate).
 Quelle: Science 329, Seiten 1033-1038, August 2010, <http://www.sciencemag.org/cgi/content/full/329/5995/1033>.

nen.) Die schlechte Nachricht ist, dass die Bewegung jedes einzelnen von N Punkten insgesamt von allen $N - 1$ anderen Punkten abhängt, dass also für jeden Zeitschritt insgesamt etwa N^2 Kräfte ausgerechnet werden müssen. Wir sagen hier, dass die Rechenvorschrift nicht gut skaliert: Schon für eine moderate Zahl von Punkten würde eine Berechnung entschieden zu lange dauern.

Wir brauchen also eine effizientere Rechenvorschrift (nach dem Mathematiker al-Chwarizmi auch „Algorithmus“ genannt), die idealerweise nur N viele Rechenoperationen für einen Zeitschritt benötigt. Ein erfolgreicher Ansatz dazu ist die Zusammenfassung mehrerer echter Punkte zu einem gedachten, der auf andere Punkte die gleiche Wirkung hat. Der Fehler, den wir dabei machen, ist umso geringer, je größer die Entfernung zu den anderen Punkten ist, weswegen die Kräfte

»Durch Computersimulationen sind wir der Modellierung der Wirklichkeit ein gutes Stück näher gekommen.«

te der nächstliegenden Punkte immer noch einzeln aufaddiert werden – dies ist aber nur noch eine begrenzte Zahl, so dass die Berechnung insgesamt nun weit aus schneller ist.

In der Praxis ordnen wir die gedachten Punkte oft in einer regelmäßigen Unterteilung an, beispielsweise einem Gitter wie auf einem Schachbrett. Ein entscheidender Trick besteht jetzt darin, mehrere der gedachten Punkte weiter zusammenzufassen zu einem gedachten Punkt zweiter Generation und so fort. Am Beispiel des Schachbretts mit 8×8 Feldern bedeutet das, jeweils 2×2 Felder zu ei-

nem neuen und viermal so großen Feld zu machen, und dies zu wiederholen bis wir bei einem einzigen Feld der Größe 64 angekommen sind. Viele der schnellsten bekannten Algorithmen beruhen auf solch einem rekursiven Prinzip.

Bisher haben wir die Unterteilung des Simulationsgebiets als administrativen Vorgang aufgefasst, um den Weg jedes einzelnen Teilchens zu berechnen. Für sämtliche 10^{25} Moleküle in einem Wasserglas ist dies selbst mit einem optimalen Algorithmus unpraktikabel, aber glücklicherweise auch gar nicht notwendig. Wenn wir nämlich die Geschwindigkeiten aller Teilchen in einem Gebiet aufaddieren und den Mittelwert zu unserer Unbekannten erklären, haben wir nur noch so viele Werte zu berechnen, wie es Gebiete gibt. Nach diesem Übergang zum Kontinuum können wir weitere Größen definieren wie z.B. den

Druck im Inneren oder den Fluss durch den Rand eines Gebietes. Die mathematischen Beziehungen zwischen diesen

Größen haben die Form einer partiellen Differentialgleichung, deren numerische Lösung im Wissenschaftlichen Rechnen eine ganz zentrale Rolle spielt.

Bei der Entwicklung von Algorithmen mit möglichst hoher Genauigkeit bei möglichst niedriger Anzahl Rechenoperationen spielt die Art der Unterteilung, das sogenannte Rechengitter, eine entscheidende Rolle. Ebenso entscheidend ist die Anzahl der Unbekannten oder Freiheitsgrade, die man pro Gitterzelle ansetzt. Je feiner die Maschenweite und je höher die Anzahl der Freiheitsgrade, desto genauer ist idealerweise

das Ergebnis, aber desto länger dauert auch die Berechnung. Die theoretische Untersuchung dieser Zusammenhänge nennt sich numerische Analysis und ist die Grundlage jeder Simulation.

Bei vielen aktuellen Fragen aus den Natur- und Ingenieurwissenschaften ist ein einzelner Computer oft nicht mehr ausreichend. Die Berechnung muss dann parallelisiert, also auf mehrere vernetzte Computer verteilt werden, die dann idealerweise entsprechend schneller fertig werden. Da die Wartezeiten im Netzwerk um ein Vielfaches höher sind als die innerhalb eines Computers, kompliziert sich allerdings die Entwicklung der Algorithmen, die nun nicht mehr nur mit der Gesamtzahl der Freiheitsgrade, sondern auch mit der Zahl der Computer eine optimale Laufzeit gewährleisten müssen.

Anspruch und Wirklichkeit

Durch Computersimulationen sind wir der Modellierung der Wirklichkeit ein gutes Stück näher gekommen, und sie sind aus unserer Welt nicht mehr wegzudenken. Trotzdem sind zur Zeit die Simulation eines kompletten Wasserfalls oder die Wettervorhersage für ein ganzes Jahr vollkommen illusorisch. Bei der Weiterentwicklung unserer Möglichkeiten müssen wir uns an den gleichen Maßstäben orientieren wie die übrige Wissenschaft auch: Simulationsergebnisse müssen von Dritten überprüfbar und reproduzierbar sein, gerade weil man dem Ergebnis einer Simulation seine Korrektheit nicht ohne weiteres ansieht. Unter dieser Voraussetzung eröffnet das Wissenschaftliche Rechnen faszinierende Perspektiven in der interdisziplinären und aktuellen Forschung.