

**Forschungsschwerpunkt
Computational Science and
Engineering
(CSE)**

Univ.-Prof. DI.Dr. Franz Winkler
Institut für Symbolisches Rechnen (RISC)
Technisch-Naturwissenschaftliche Fakultät
Johannes Kepler Universität Linz

11. Juni 2003

1. Beschreibung

1.1 Thematik

Moderne Wissenschaft und Technik ist ohne die Anwendung mathematischer Modellbildung, Analyse und Simulation nicht vorstellbar. Insbesondere gilt dies auch für einige am Standort Oberösterreich angesiedelte Unternehmen, von denen etliche Pionierarbeit beim industriellen Einsatz moderner, computergestützter Simulationsverfahren leisten. An der JKU finden diese innovativen Unternehmen durch die vorhandene mathematische und ingenieurwissenschaftliche Expertise und die Supercomputer-Einrichtungen besonders gute Voraussetzungen für eine fruchtbare Partnerschaft vor.

Bereits derzeit gibt es eine enge Zusammenarbeit zwischen mehreren mathematischen Instituten im Bereich “Numerical and Symbolic Scientific Computing”, an der auch Institute der Informatik und Mechatronik beteiligt sind und waren. Diese Kooperation wird vom FWF als Spezialforschungsprogramm F013 gefördert. Der Forschungsschwerpunkt *Computational Science and Engineering (CSE)* strebt eine noch engere Vernetzung der schon jetzt bestehenden Kooperationen zwischen Angewandter Mathematik, Informatik und Natur- und Ingenieurwissenschaften an. Dabei sollen problemklassenspezifische Methoden aus Angewandter Mathematik und Informatik zur Simulation komplexer Probleme aus den Anwendungswissenschaften verwendet und weiterentwickelt werden. Als typische Beispiele solcher Anwendungsgebiete seien hier etwa Simulation im Automobil- und Flugzeugbau, Automation der Entwicklung elektronischer Bauteile, Simulation und mathematisches Design in der Robotik, Genomforschung in der Biologie oder Computational Chemistry & Physics erwähnt.

Erfolgreiches Arbeiten in CSE benötigt Personen, die die naturwissenschaftlichen Modelle im Detail verstehen, problemklassenspezifische Algorithmen entwickeln und analysieren können und auch diese Algorithmen auf Hochleistungsrechnern effizient implementieren und ihre Ergebnisse visualisieren können.

Der Schwerpunkt CSE beinhaltet sowohl neue Forschung zu mathematischen Algorithmen, fachübergreifende Ausbildung von Studenten sowohl im

Diplom- als auch im Doktoratsstudium und Kooperation mit der Wirtschaft zur Umsetzung der Ergebnisse. Für alle diese Aspekte gibt es an den Instituten der TNF beste Voraussetzungen.

1.2 Die beteiligten Institute

Institut für Industriemathematik: Forschungsschwerpunkt dieses Instituts sind inverse Probleme, die in Anwendungen in Natur- und Ingenieurwissenschaften, neuerdings auch in Computational Finance, zentral sind. Diese Kompetenz wird vom Institut in ein CSE-Forschungsprogramm eingebracht mit dem Ziel gemeinsamer Forschungsprojekte mit Anwendungswissenschaften. Dabei kann auch das Radon Institut der ÖAW, dessen Direktor der Institutsvorstand ist, unterstützend tätig sein.

In der Lehre ist das Institut federführend im international anerkannten europäischen Postgraduate-Programm “Mathematics for Industry” des European Consortium for Mathematics in Industry, das nun zu einem europäischen PhD-Programm ausgebaut werden soll. Dieses Programm ist bisher stark industrieorientiert und sollte im CSE-Schwerpunkt durch naturwissenschaftliche Anwendungen ergänzt werden.

Institut für Numerische Mathematik: Das Institut für Numerische Mathematik betreibt Grundlagenforschung auf den Gebieten der Numerik partieller Differentialgleichungen, der diskreten und kontinuierlichen Optimierung, dem wissenschaftlichen Rechnen und dem parallelen Rechnen.

Diese theoretischen Entwicklungen finden Anwendung in der Festkörpermechanik, der Strömungsmechanik, der Elektrotechnik, der Mechatronik sowie den Life Sciences.

Institut für Symbolisches Rechnen: das Institut RISC betreibt seit vielen Jahren anerkannte Arbeit in Forschung, Lehre und Anwendung auf dem Gebiet des Symbolischen Rechnens. Es handelt sich dabei um die Vernetzung von Mathematik und Informatik, insbesondere um Automatisierung des mathematischen Problemlösevorgangs und auch um die mathematische Durchlage für die Informationswissenschaften.

In der Lehre engagiert sich RISC sowohl im Studienplan der Technischen Mathematik als auch der Informatik. Ein besonderes Augenmerk wird

seit Jahren auf das Doktoratsstudienprogramm in “Symbolic Computation” gelegt. Dieses Programm ist international ausgelegt, es umfasst im Schnitt etwa 25 Doktoranden aus der ganzen Welt (derzeit aus 14 Ländern).

Institut für Technische Informatik und Telematik: Das Institut für Technische Informatik und Telematik, Abteilung für Graphische und Parallele Datenverarbeitung (GUP), beschäftigt sich mit den Themen High Performance Computing und Visualisierung. Beide Bereiche sind wichtige Bestandteile von Computational Science and Engineering, da der Wissenschaftler für die effiziente Anwendung des Computers auf entsprechende Werkzeuge zurückgreifen muss.

Die am GUP entwickelten Software-Werkzeuge für Programmentwicklung und -fehlersuche stellen eine wichtige Unterstützung für den Wissenschaftler dar. Diese Software wurde sowohl für die Supercomputer am Campus der JKU, für die Cluster am GUP, als auch für internationale Grid-Projekte implementiert. Im Bereich Visualisierung sind vor allem die Darstellung von Simulationsergebnissen in Virtual oder Augmented Reality ein wichtiger Bestandteil der CSE, wie zahlreiche Projekte am GUP beweisen. Die entsprechende Hardware, vom Head-Mounted Display bis zum immersiven CAVE, ist am Campus vorhanden.

weitere Zusammenarbeit: Darüber hinaus bestehen enge Forschungskontakte zu anderen Instituten der TNF, insbesondere zum Institut für Halbleiterphysik, zum Institut für Theoretische Physik, zum Forschungsinstitut für organische Solarzellen, zum Institut für Regelungstechnik und elektrische Antriebe, sowie zum Institut für Mechanik und Maschinenlehre.

1.3 Anknüpfungspunkte zu anderen Forschungsschwerpunkten

Kooperationen sind mit praktisch allen Exzellenzschwerpunkten der TNF denkbar und wünschenswert:

- Chemical Design and Process Development
- Mechatronik
- Nanoscience and -technology

- Pervasive Computing and Information Management

Gerade die Expertise in rechnergestützten Verfahren und die Kompetenz in konkreten Anwendungsbereichen sollte zu innovativen Resultaten führen.

Auch die Aufbauschwerpunkte

- Biosystemanalyse
- Informationselektronik

werden ohne massive computergestützte Simulations- und Visualisierungsverfahren nicht auskommen. Hier bietet sich die Kooperation mit CSE geradezu an.

2. Relevanz, Ist-Zustand und externe Wertschätzung

Die Relevanz von CSE für die Technisch-Naturwissenschaftliche Fakultät dürfte wohl unbestritten sein. Es handelt sich hier um eine Kernkompetenz, die von allen Instituten der TNF genutzt werden kann, und zu der umgekehrt auch alle Institute beitragen können.

Der bisher bestehende Kern dieses Forschungsschwerpunktes ist der vom FWF geförderte Spezialforschungsbereich “Numerical and Symbolic Scientific Computing”, SFB F013, an welchem das Institut für Industriemathematik, das Institut für Numerische Mathematik und das Institut für Symbolisches Rechnen beteiligt sind. Dieser SFB wurde bisher bereits zweimal durch ein internationales Gutachtergremium evaluiert, und es wurde ein exzellentes Zeugnis für die Forschungstätigkeit dieser Institute ausgestellt.

Die Beteiligten am SFB F013 halten es aber für dringend erforderlich, auch verstärkt Institute aus der Informatik und den Natur- und technischen Wissenschaften in einen Schwerpunkt CSE einzubeziehen.

Die beteiligten Institute haben in der Vergangenheit einen hohen Anteil an Drittmitteln an die TNF gebracht. Auch konnten Aktivitäten im Bereich des Wissenstransfers erfolgreich initiiert werden. Hier sei auf die Kompetenzzentren SCCH (Software Competence Center Hagenberg) und das Kompetenzzentrum für Industriemathematik hingewiesen. Diese Tätigkeit im Schnittfeld zwischen Wissenschaft und Wirtschaft könnte von einer Verstärkung der Kernkompetenz in CSE nur profitieren.

3. Input für Lehre und/oder Weiterbildung

Im Bereich der Lehre denken wir an einen eigenen Studiengang zu Computational Science and Engineering, also

- Diplomstudium,
- Bachelor – Master,
- Doktorat.

Die geplanten Gradientenprogramme könnten maßgeblich von den bestehenden Doktoratsprogrammen der Institute für Industriemathematik und Symbolisches Rechnen abgeleitet werden.

Natürlich sind auch Weiterbildungsprogramme für unsere industriellen Partner angedacht und wünschenswert. Hier sind aber noch weitere Überlegungen notwendig.

4. Standortfrage

Der Standort JKU ist für die Einrichtung des Forschungsschwerpunktes CSE in hervorragender, wahrscheinlich einmaliger Weise prädestiniert. Die wichtigsten Zweiggebiete des wissenschaftlichen Rechnens, nämlich numerisches Rechnen, symbolisches Rechnen und graphische Visualisierung, sind alle in anerkannter Weise am Standort JKU vertreten. Dazu kommen ausgewiesene Forschergruppen in Naturwissenschaften und Technik, welche die Werkzeuge des wissenschaftlichen Rechnens einsetzen.

Mit CSE wird kein neuer Schwerpunkt für die JKU erfunden, sondern ein bereits in der Praxis existierender Schwerpunkt als solcher anerkannt und innovativ in die Zukunft weitergedacht.

5. Finanzierungsbedarf

Die Nachbesetzung der Professorenstelle Bruno Buchberger am Institut für Symbolisches Rechnen wird bereits mit Blick auf den Schwerpunkt CSE vorgenommen.

Darüber hinaus wäre es natürlich notwendig, durch Umwidmungen und/oder Neuschaffung von Stellen (Professoren als auch Assistenten) gerade in der Verbindung von Mathematik und Computational Physics (was nicht als “mathematische Physik” mißverstanden werden sollte) Personal aufzubauen.

Es sollte auch Vorsorge getroffen werden für den Zeitraum nach Auslaufen des SFB F013 (worst case 3/2005, best case 3/2008). Derzeit ist durch die Förderung seitens des FWF ein hohes Maß an Forschungskapazität gesichert. Es wäre sicherlich für die JKU nicht von Vorteil, wenn diese Forschungskapazität nach Ablauf des SFB verloren ginge.