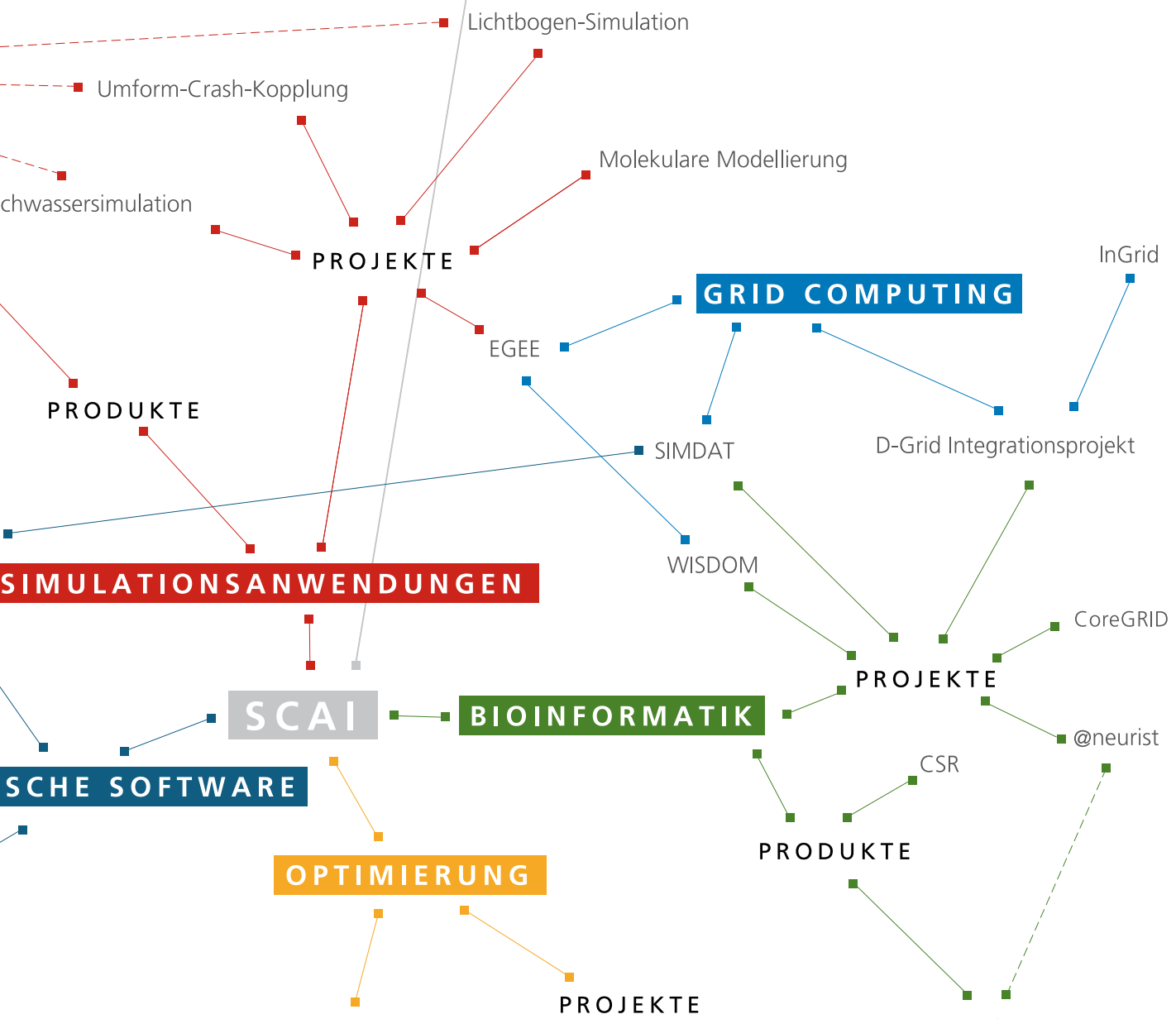
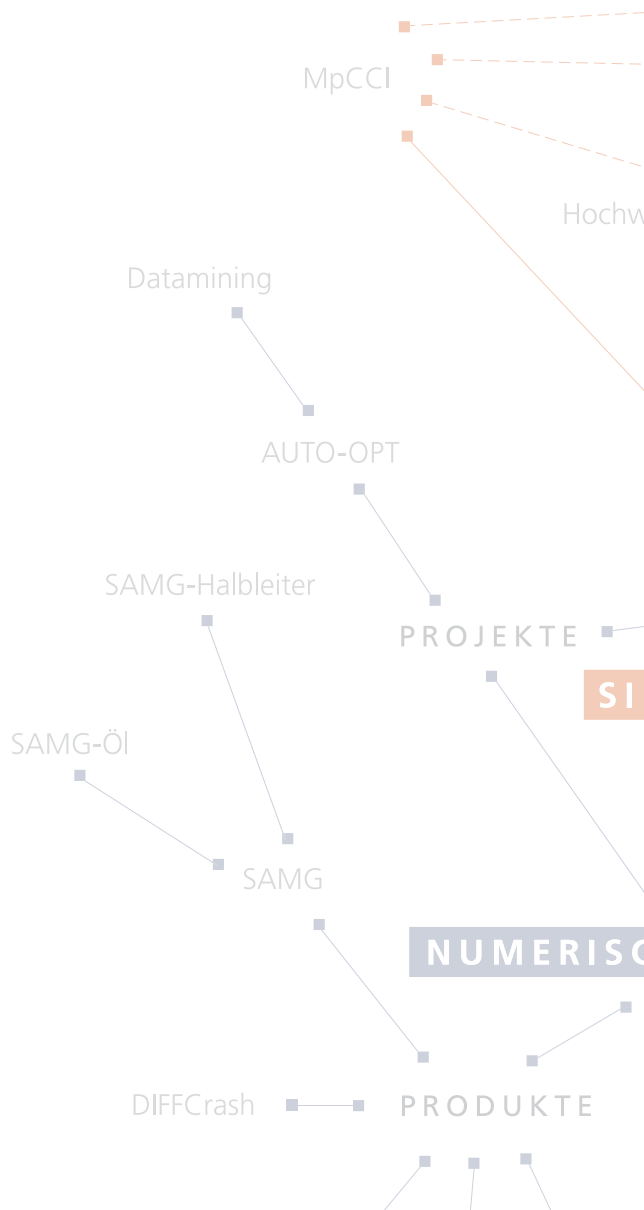


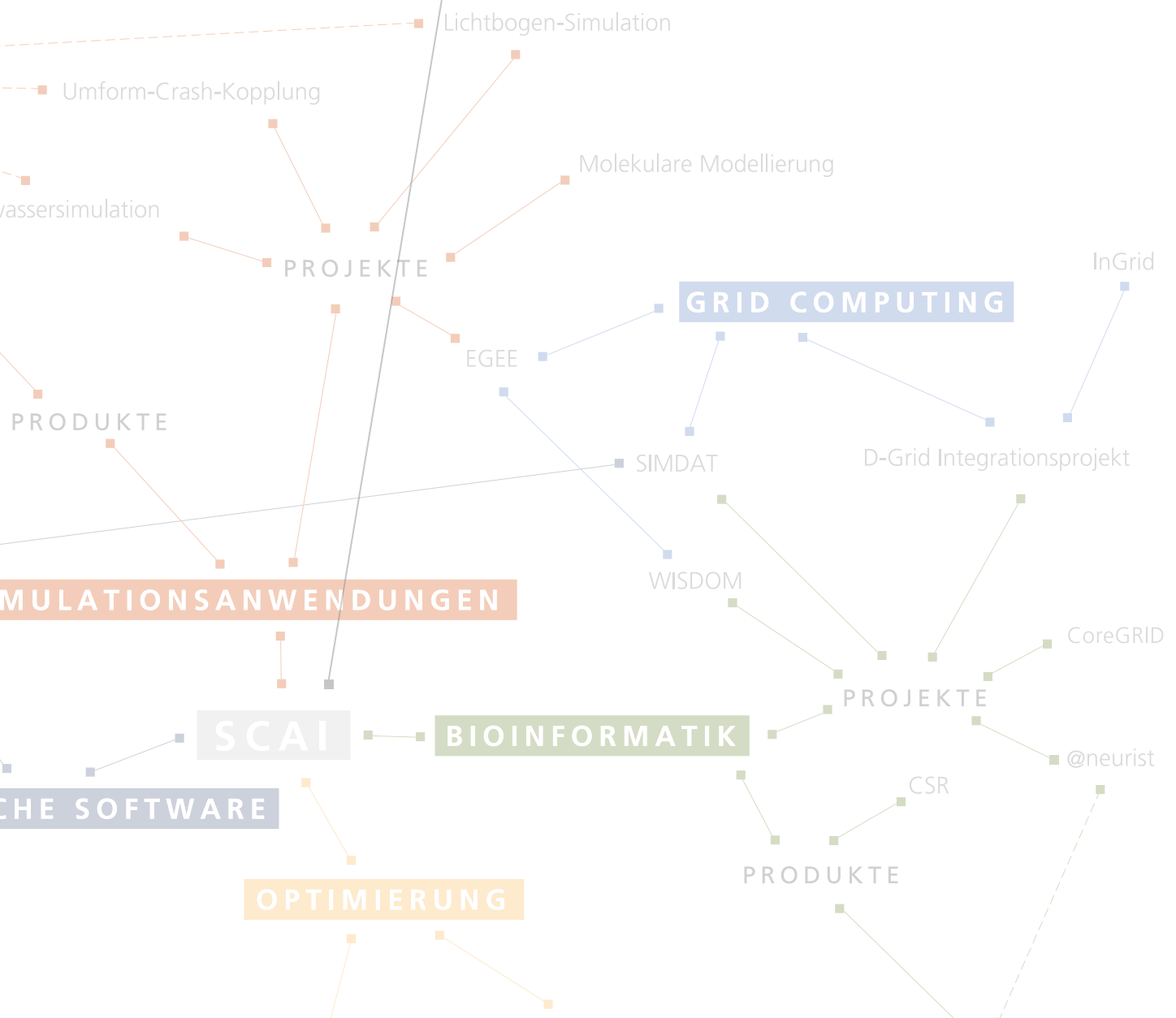


JAHRESBERICHT 2005





JAHRESBERICHT 2005



VORWORT



Professor Dr. Ulrich Trottenberg

Die Aufgabe des Instituts für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI ist die Entwicklung und der Einsatz mathematischer und informatischer Methoden zur Lösung realer, insbesondere industrieller Probleme. Dabei besteht die heutige Herausforderung gerade im Zusammenspiel von Mathematik und Informatik: Erst der Einsatz schneller Algorithmen und der intelligente Umgang mit der Datenflut erlauben es, industrielle Entwurfs- und Geschäftsprozesse realistisch zu simulieren und multidisziplinär zu optimieren, Wissen aus Daten zu extrahieren und für die kooperative Anwendung nutzbar zu machen.

2005 war ein sehr erfolgreiches Jahr für das Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI. Der Aufnahme in die Fraunhofer-Gesellschaft folgten Jahre der Veränderung von Zielen, Arbeitsinhalten und Strukturen – nun ist das SCAI in der Fraunhofer-Gesellschaft angekommen. Wir sind heute ein gefragter Partner – innerhalb und außerhalb der Gesellschaft.

Unser Institut konzentriert sich auf die drei Arbeitsgebiete Numerische Simulation, Optimierung und Bioinformatik. Wir verbinden hier Algorithmenentwicklung und Anwendung, entwickeln Software-

lösungen und bieten unseren Kunden Dienstleistungen und Beratung. Wir streben an, mit unseren Softwarelösungen im Markt hohe Sichtbarkeit und – wo immer möglich – Alleinstellungsmerkmale zu erreichen.

Zusammenspiel von numerischer Mathematik und Informatik

In SCAI führen wir die Methoden der angewandten Mathematik, der Numerik und der Informatik mit dem Anwendungswissen von Ingenieuren und Naturwissenschaftlern in interdisziplinären Teams zusammen. Damit sichern wir die Marktnähe unserer Entwicklungen im Interesse unserer Kunden.

Auf der mathematischen Seite liegen unsere Kompetenzen in der numerischen Simulation, speziell in der Algorithmenentwicklung und in der multidisziplinären Modellierung und Anwendung. Auf der informatischen Seite bilden daten- und informationsorientierte Methoden und Anwendungen den Schwerpunkt, darunter das Data- und Textmining sowie High Performance Computing und Grid Computing. Das enge Zusammenspiel von numerischer Mathematik (schnelle Algorithmik) und Informatik (intelligenter Umgang mit Daten) und deren Zusammenführung ist ein Spezifikum des Instituts.

In den vier Jahren seit dem Übergang in die Fraunhofer-Gesellschaft hat sich SCAI auf Ausbau, Produktentwicklung und Vermarktung vorhandener Stärken konzentriert. Dazu gehören die multidisziplinären Simulationen für natur- und ingenieurwissenschaftliche Anwendungen, die schnelle Lösung großer Gleichungssysteme, etwa in Strömungs- und Struktursimulationen, und die Lösung von Aufgaben der diskreten Optimierung. Die Vorentwicklungen reichen weit in die neunziger Jahre zurück, zum Teil weiter.

Mit den Softwareprodukten AutoNester und PackAssistant für die optimale Lösung von Zuschnitt- und Packungsproblemen, mit der Koppungsschnittstelle MpCCI für multidisziplinäre Simulationen und der Software SAMG für die Lösung großer Gleichungssysteme ist das Institut bei vielen Kunden und in verschiedenen Branchen bereits gut eingeführt. Diese Produkte sind in ihrem Marktsegment weltweit führend und tragen durch Lizenzverkäufe in erheblichem Maße zur Finanzierung des Instituts bei. Darüber hinaus bieten solche Produk-

entwicklungen SCAI die Möglichkeit, mit vielen Kunden direkten Kontakt zu halten und weitergehende Beratungs- und Dienstleistungen rund um die Produkte anzubieten.

Industrielle Anwendungen des Grid Computing

Zudem wurden neue Themen aufgenommen. In der Bioinformatik sind hier Methoden- und Softwareentwicklungen für die Extraktion von Information aus Texten zu nennen, in der numerischen Simulation sind die Themen Datamining und Datenkompression für numerische Daten hinzugekommen.

Grid Computing bildet seit etwa drei Jahren ein weiteres neues und wachsendes Arbeitsfeld, wobei der Fokus des Instituts auf industriellen Anwendungen sowohl im Computational Engineering als auch in der Bioinformatik liegt. Diese neuen Themen werden im Institut in Projekten der Forschungsförderung (Bundesministerium für Bildung und Forschung, Europäische Kommission) bearbeitet.

In der weiteren Entwicklung des Instituts wird der Aufbau neuer Forschungs- und Geschäftsfelder einen zusätzlichen Raum einnehmen. Als Forschungsinstitut lebt SCAI von frischen Ideen, die neue Möglichkeiten im Markt eröffnen können. Sie machen das Institut attraktiv für Studierende, Absolventen, junge Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter und eröffnen die Chance für eine eigene Profilierung und auch längerfristige Bindung an das Institut. Solch ein Thema ist »Computational Chemistry« – molekulardynamische Simulation für pharmakologische und materialwissenschaftliche Anwendungen. Es wird in Zusammenarbeit der Abteilungen Simulationsanwendungen und Bioinformatik entwickelt.

Das Institut ist regional, national und international gut vernetzt

SCAI ist mit einer Reihe von Einrichtungen in der Region verbunden. Voran steht die Verbindung mit der Universität zu Köln über meinen Lehrstuhl für Angewandte Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen. Die Kooperation zwischen Institut und Lehrstuhl entwickelt sich in zwei Richtungen: Zum einen eröffnet die Lehrtätigkeit an der Universität Studierenden die Möglichkeit, durch Studien- und Diplomarbeiten in der Projektarbeit mitzuwirken und neue Forschungsthemen zu bearbeiten. Zum anderen

unterhält die Abteilung Numerische Software eine Außenstelle an der Universität, über welche Beziehungen zur lokalen Wirtschaft ausgebaut werden sollen.

Mit dem Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT), einer gemeinsamen Einrichtung der Universität Bonn, der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen, sowie der Fraunhofer-Institute in Sankt Augustin, besteht eine vertragliche Kooperation in der Bioinformatik. Wissenschaftler der Abteilung Bioinformatik lehren im Masterstudiengang »Life Science Informatics«, Studenten des B-IT leisten ihre Praktika bei uns ab und fertigen Masterarbeiten in den wissenschaftlichen Kernbereichen der Abteilung Bioinformatik an.

Mit der Fachhochschule Bonn Rhein-Sieg in Sankt Augustin ist das Institut über eine Reihe von Lehraufträgen von Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern verbunden. Dr. Wolfgang Joppich wurde dort im Jahr 2004 zum Professor für Ingenieurinformatik berufen.

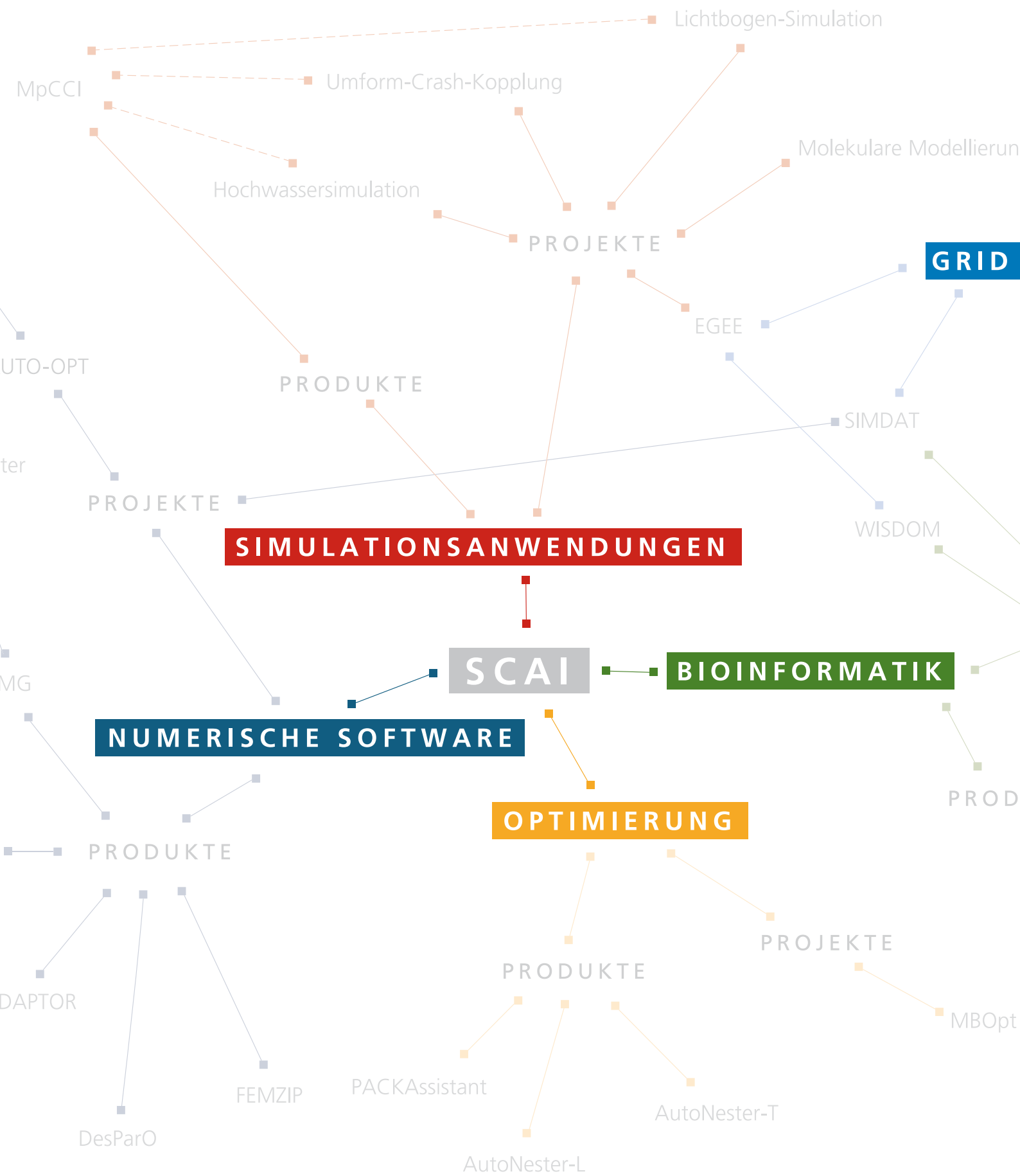
Mit der Einrichtung Simulations- und Softwaretechnik am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Köln-Porz, die gemeinsam von mir und Rolf Hempel (DLR) geleitet wird, bestehen vielfältige direkte Arbeits- und Projektbeziehungen. Aktuelle gemeinsame Themen sind Grid Computing sowie die Kooperation in den vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Verbundprojekten AUTO-OPT (bis Juni 2005) und SESIS (Schiffbauliches Entwicklungs- und Simulationssystem, ab Mai 2005).

In der Fraunhofer-Gesellschaft ist SCAI Teil der Fraunhofer-Gruppe Informations- und Kommunikationstechnik. Ich nehme dort die Aufgabe als stellvertretender Vorsitzender der Gruppe wahr. Die IuK-Gruppe koordiniert die Arbeit der informationstechnischen Institute, erarbeitet Vorschläge für gemeinsame Projekte der Vorlaufforschung und vertritt die Institute bei Industrie und Fördergebern.

Sie sind herzlich eingeladen, sich auf den folgenden Seiten über unsere Forschungsarbeiten und -ergebnisse zu informieren. Meine Mitarbeiter und ich freuen sich auf Ihre Fragen und Anregungen!

Ihr

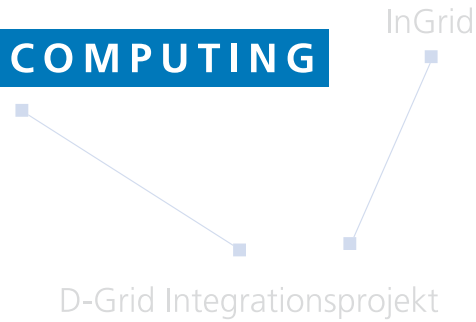




SCAI

Vorwort	5
SCAI-LIGHTS 2005	9
Das Institut im Profil	11
Das Institut in Zahlen	13
Die Fraunhofer-Gesellschaft	15
Die Fraunhofer-Gruppe IuK	16

COMPUTING



SIMULATIONSANWENDUNGEN

MpCCI – Der Industriestandard zur Kopplung kommerzieller Simulationscodes	21
Lichtbogensimulation für Niederspannungs-Schaltgeräte	25
Projekt 3ZM-GRIMEX – Hochwassersimulation	27
Kopplung von Umform- und Aufprallsimulation	29
Molekulare Modellierung von Protein-Ligand-Komplexen	32

NUMERISCHE SOFTWARE

DIFF-CRASH – Stabilitätsuntersuchungen von Aufprall-Simulationen	39
AUTO-OPT – Automobilentwurf durch Simulation und Optimierung	41
SAMG – Skalierbare Lösungsverfahren	43
SAMG-Öl – Beschleunigung von Ölreservoir-Simulationen	46
Beschleunigung von Halbleiter- und Schaltkreissimulationen	49
ADAPTOR – Analyse und Optimierung Numerischer Anwendungen	51
DesParO-I – Interaktive Optimierung von Design-Parametern im virtuellen Entwurf neuer Werkstücke	53
FEMZIP – Datenkompression in der numerischen Simulation	55

BIOINFORMATIK

Maschinelle Erkennung chemischer Strukturformeln	61
Erkennung von Gen- und Proteinnamen in wissenschaftlichen Texten	63

OPTIMIERUNG

MBOpt – Optimierung der Maschinenbelegung	69
PackAssistant – Optimierte Befüllung von Behältern	71

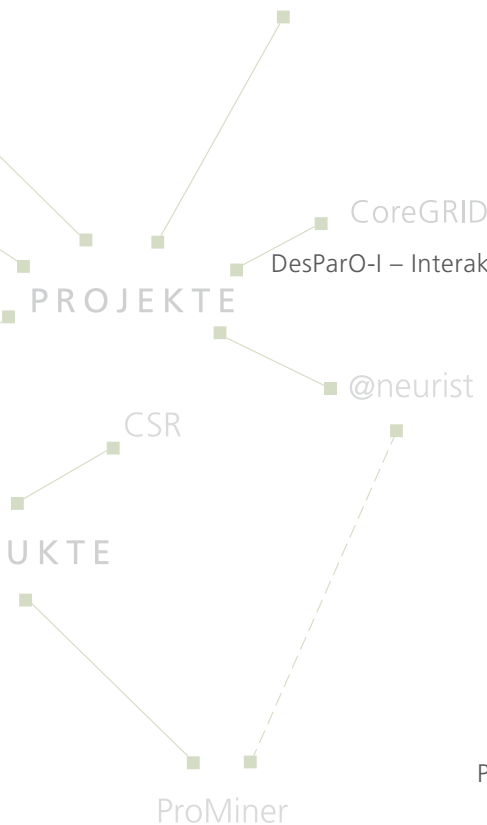
GRID COMPUTING

Projekt SIMDAT – Data Mining und Grid Computing für industrielle Anwendungen	77
Projekt EGEE – Europäische Grid-Infrastruktur für das Wissenschaftliche Rechnen	79
Projekt WISDOM – Einsatz des größten Grids der Welt im Kampf gegen Malaria	80
Projekt @neurIST – Integrierte biomedizinische Informatik auf dem Grid	82
Projekt CoreGRID – Network of Excellence	84
Projekt D-Grid – Management Virtueller Organisationen	85
Projekt InGrid – Multi-Disziplinäre Simulation im Grid	86

ANHANG

Publikationen	87
Graduierungsarbeiten	89
Mitarbeit in Gremien und Lehrtätigkeiten	90
Informationen zur Anfahrt	91
Adressen	92
Impressum	92

PROJEKTE



UKTE

SCAI-LIGHTS 2005



Schneller vom Stapel laufen: Mit den im Projekt SESIS entwickelten Techniken können deutsche Werften den Entwurf von Schiffen beschleunigen – und sich so einen Vorsprung im Wettbewerb am Markt sichern.

Projekt SESIS: Wettbewerbsvorsprung für den deutschen Schiffbau

Im modernen Schiffbau entstehen Unikate und kleinste Serien von hoher Komplexität in kürzester Zeit. Große Innovationsschritte sind aber mit finanziellen Risiken verbunden. Doch der Verdrängungswettbewerb am Markt verbietet einen Ausgleich solcher Wagnisse durch höhere Preise. Für die Werften und ihre Zulieferer können technische Neuerungen daher die Existenz gefährden. Die Lösung dieses Dilemmas ist der Aufbau einer besonderen Entwurfskompetenz: Bereits in der Angebotsphase sichern Simulationen aller wesentlichen

Parameter die Leistungsfähigkeit des Schiffs.

Genau hier setzt das Verbundprojekt Schiffbauliches Entwurfs- und Simulationssystem (SEGIS) an. Die Projektpartner aus Forschung und Industrie entwickeln ein Entwurfs- und Simulationssystem für den Schiffbau, das die frühe Entwurfsphase unterstützt.

Das Projekt SESIS wird vom Fraunhofer-Institut SCAI geleitet. Das Bundesministerium für Bildung und Forschung fördert das Projekt mit rund drei Millionen Euro in drei Jahren.

Textmining wird immer wichtiger

In den Life Sciences ist es aufgrund der enormen Menge an Literatur längst unmöglich, alle relevanten Veröffentlichungen zu verfolgen und zu berücksichtigen. Daher ist der Bedarf nach automatischen Verfahren zur Analyse großer Textmengen, dem Textmining, seit jeher groß und nimmt weiter zu. Mit der TEMIS-Group veranstaltet SCAI jährlich ein Textmining-Symposium, das sich als Szene-Treffen an der Schnittstelle von Forschung und Industrie etabliert hat.



Suche nach sinnvoller Information in großen Textmengen: Die Bedeutung des Textmining in den Disziplinen Pharmazie, Medizin, Chemie und Biologie wird in Zukunft weiter wachsen. Gemeinsam mit Experten des Kooperationspartners TEMIS arbeiten die SCAI-Forscher an neuen Software-Lösungen.

Mit neuer Software Automobile schneller auf den Markt bringen

Verbesserte Software-Werkzeuge verkürzen die Entwicklungszeiten im deutschen Automobilbau künftig deutlich. Neue Fahrzeuge gelangen somit schneller als bisher auf den Markt. Das sind Ergebnisse aus dem Projekt AUTO-OPT, in dem führende Fahrzeughersteller, Softwarehäuser und Forschungseinrichtungen drei Jahre lang unter Federführung des Fraunhofer-Instituts SCAI zusammengearbeitet haben. Die Ergebnisse des vom Bundesministerium für Bildung und Forschung

geförderten Projekts haben die Partner am 27. Juni 2005 im Porsche-Entwicklungszentrum in Weissach präsentiert.

Im Projekt gelang es, Simulationssoftware wesentlich zu beschleunigen und Aufgaben zu lösen, die sich bislang nicht bearbeiten ließen. So können Ingenieure Aufprall- und Steifigkeitsverhalten bereits in frühen Projektphasen mit Methoden der numerischen Simulation untersuchen. Außerdem trieben die Projektpartner die Methoden der Fahrzeug- und Werkzeug-

optimierung in allen Phasen der Entwicklung weiter voran. Das macht es möglich, Aufgaben interaktiv zu bearbeiten. Das Resultat sind Kosten sparende Lösungen, die zugleich den hohen Anforderungen an moderne Fahrzeuge genügen – vor allem an die Fahrzeugsicherheit. In der Werkzeugentwicklung erzielte man etwa Erfolge bei der Kompensation der Rückfederung von Bauteilen – ein Problem, das durch Einsatz von Hochleistungsmaterialien heute verstärkt auftritt.

Festes Forum der Nutzer von MpCCI

Die Software MpCCI koppelt mehrere Simulationsprogramme, um multidisziplinäre Probleme zu lösen. Das sind Probleme, die aus mindestens zwei voneinander abhängigen physikalischen Phänomenen bestehen. Anwender sind Ingenieure aus Automobil-, Maschinen-, Anlagen- oder Flugzeugbau sowie aus der Elektrotechnik. Sie treffen sich jährlich zum »MpCCI User Forum« und berichten über aktuelle Lösungen mit MpCCI aus Forschung und Entwicklung.

Festkolloquium zum 60. Geburtstag von Professor Trottenberg

Professor Dr. Ulrich Trottenberg, Inhaber des Lehrstuhls für Angewandte Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen in der Fachgruppe Mathematik-Informatik der Universität zu Köln und Institutsleiter des Fraunhofer SCAI, feierte im Januar seinen 60. Geburtstag.

Wegbegleiter und Institut ehrten ihn mit einem Festkolloquium auf Schloss Birlinghoven. Mit seinen Arbeiten hat sich Trottenberg, der sich 1976 an der Universität zu Köln habilitierte, besonders für die

Angewandte Mathematik und die numerische Simulation eingesetzt. So leistete er einen wesentlichen Beitrag zur Erforschung und Entwicklung von Mehrgittermethoden, die heute als die effizientesten Methoden zur Lösung elliptischer Differentialgleichungen und großer Gleichungssysteme anerkannt sind. Weitere Arbeitsschwerpunkte Trottenbergs sind parallele Algorithmen und Anwendungen schneller numerischer Verfahren in vielen Bereichen des wissenschaftlichen Rechnens.

Grid Computing im Kampf gegen die Krankheit Malaria

Erstmals konnten Wissenschaftler des Fraunhofer-Instituts SCAI in einem Experiment zeigen, dass Grid Computing die Entwicklung neuer Wirkstoffe im Kampf gegen Krankheiten drastisch beschleunigt. In nur 40 Tagen im Juli und August berechneten 1 000 Computer in 15 Ländern simultan 46 Millionen Wirkstoffkombinationen. Dabei nutzen

Forscher die enorme Rechenleistung vernetzter Höchstleistungscomputer, um Millionen von Wirkstoffkombinationen durchzuspielen. Zum Einsatz kam dabei eine vom SCAI entwickelte Software. Das Programm FlexX untersucht die Bindungseigenschaften von Molekülen, auch Liganden genannt, an Zielproteine und ermittelt so aussichtsreiche

Kombinationen. Die Ergebnisse helfen Pharma-Forschern bei der Entwicklung von Medikamenten gegen Malaria. Das Projekt »Wide In Silico Docking On Malaria (WISDOM)« soll die Leistungsfähigkeit des Grids belegen. WISDOM ist ein Teil des Projekts EGEE (Enabling Grids for E-science), das die Europäische Kommission mit 32 Millionen Euro fördert.

Konstituierende Kuratoriumssitzung

Mit seiner ersten Sitzung am 13. September konstituierte sich das Kuratorium des Fraunhofer-Instituts SCAI (von links): Prof. Dr. Dennis Tsichritzis (Fraunhofer-Vorstand), Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, Dr. Daniel Keesman (Genedata AG), Dr. Martin Hofmann, Carl Vogt, Klaus Wolf, Prof. Dr. Norbert Szyperski, Karl Solchenbach (Intel GmbH), Dr. Johannes Linden, Prof. Dr. Tassilo Küpper (Universität zu Köln), Dr. Bernd Thomas (Continental AG), Gerd Fiala (Fraunhofer-Zentralverwaltung), Dr. Ralf Heckmann, Clemens-August Thole, Prof. Dr. Thomas Lengauer (Max-Planck-Institut für Informatik, Saarbrücken), Dr. Eva Eggeling und Stephan Springstube.



DAS INSTITUT IM PROFIL

Das Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI ist Partner der Wirtschaft für Computersimulationen in der Produkt- und Verfahrensentwicklung und Optimierungsfragestellungen in Produktion, Logistik und Planung.

Das Institut modelliert und optimiert industrielle Anwendungen, entwickelt Software und bietet Berechnungen auf Hochleistungscomputern. Ziel dabei sind kürzere Entwicklungszeiten, weniger teure Experimente und optimierte Verfahrensabläufe.

Die Verbindung zur universitären Forschung ist unter anderen über den Lehrstuhl des Institutsleiters Prof. Dr. Ulrich Trottenberg an der Universität zu Köln gegeben. Er leitet zugleich die Organisationseinheit Simulations- und Softwaretechnik (SISTEC) am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR).

Geschäftsfelder

Simulationsanwendungen

Computersimulation beschleunigt den Entwurf von Produkten und hilft, Verfahren zu optimieren. Das Ergebnis sind kürzere Entwicklungszeiten, weniger reale Experimente und die gezielte Konstruktion von Prototypen – kurz: Kostenvorteile.

SCAI bietet Studien, Auftragsrechnungen, Software- und Algorithmenentwicklungen. Wir arbeiten mit Standard-Simulationsprogrammen, die wir auf Kundenwunsch anpassen. Unsere Leistung reicht von der Modellierung des Anwendungsproblems über die Auswahl der Methoden und Simulationswerkzeuge bis zur Berechnungen auf Hochleistungscomputern. Auswertung und Visualisierung der Ergebnisse runden unser Angebot ab. Zudem sorgen wir für eine nahtlose und zeitsparende Integration verschiedener Simulationswerkzeuge: Datenaustausch, Datenverwaltung, Steuerung und Workflow.

Einen Schwerpunkt bilden gekoppelte Simulationen, etwa die gleichzeitige Berechnung von Strömungsvorgängen und daraus resultierende Belastungen von Strukturen, wie Rohre und Behälter. Weitere Beispiele sind die Belastung von Bauteilen bei Aufheizung oder Abkühlung oder die Wechselwirkung elektromagnetischer Felder mit Bauteilen und Strukturen. Dazu haben wir die Kopplungssoftware MpCCI entwickelt, die Simulationsprogramme unterschiedlicher Disziplinen effizient miteinander koppelt.

Numerische Software

Mit steigender Bedeutung numerischer Simulationen für industrielle Anwendungen wachsen auch die Anforderungen an die Methoden und die Software zur Analyse, Auswertung und Optimierung von Simulationsergebnissen. SCAI entwickelt neue Technologien in der Numerik und in der Informatik, die helfen, Rechenzeiten einzelner Simulationsläufe zu verkürzen – dies bei großer Detailgenauigkeit der Modellierung und hoher Auflösung der Simulationen. Kernaspekte der Forschung sind:

- Werkzeuge zur Analyse von Simulationsergebnissen
- Parameteroptimierung
- Skalierbare Lösertechnologie
- Performanceoptimierung (Cache, Parallelrechner)
- Datenparallele Compilertechnologie

Bioinformatik

Die Abteilung Bioinformatik erforscht und entwickelt neue Lösungen in drei Bereichen der angewandten, biomedizinischen Informatik:

- Informationsextraktion/Semantische Textanalyse,
- Angewandte Chemieinformatik
- Semantisches Datengrid/Grid-Infrastruktur

In Übereinstimmung mit der grundlegenden Ausrichtung eines Fraunhofer-Instituts arbeiten wir eng mit Partnern aus der Wirtschaft zusammen, um deren Wettbewerbsfähigkeit durch innovative Ansätze zu verbessern. Zu unseren Partnern und Kunden gehören die forschende Pharmaindustrie und Biotechnologieunternehmen sowie Software-Häuser aus der Life-Science-Informatik. Wir positionieren uns dabei an der Schnittstelle zwischen akademischer und industrieller Forschung und legen großen Wert darauf, zu beiden Forschungsgemeinschaften in engem Kontakt zu bleiben.

Auf akademischer Seite beteiligt sich SCAI an der Ausbildung von Studenten des Studiengangs »Life Science Informatics« am Bonn-Aachen International Centre for Information Technology (B-IT), gleichzeitig sind wir Partner in öffentlich geförderten, nationalen und europäischen Forschungsprogrammen.

Optimierung

Optimierungsaufgaben stellen sich in der Industriepaxis in vielfältiger Form. Beim ressourcensparenden Einsatz von Personal und Material, bei der Auslastung von Produktionsanlagen oder bei der Planung

von Transportwegen und Zulieferung – Methoden der mathematischen Optimierung helfen, unternehmerische Entscheidungen zu treffen, Prozesse zu verbessern und Kosten zu sparen. Typische Anwendungsfelder sind:

- Packungs- und Zuschnittaufgaben: Textilien, Leder, Bleche, Bauteileanordnung, Containerbeladung
- Logistik: Transportoptimierung, Tourenplanung, Standortwahl
- Produktion: Maschinenbelegung, Arbeitspläne, Materialverbrauch
- Planung: Flächen- und Raumnutzung, Platzierung von Sicherungsanlagen
- Kommunikationsnetze

SCAI bietet Standard-Softwareprodukte für Optimierungsanwendungen an (etwa für zwei- und dreidimensionale Packungs- und Anordnungsprobleme). Zudem haben wir uns darauf spezialisiert, im Industriauftrag maßgeschneiderte Lösungen für komplexe Aufgaben zu entwickeln. Dadurch können wir die höchstmögliche Kosten- und Zeitersparnis für Kunden in ihrem speziellen Produktions- und Arbeitsumfeld erreichen. Die Software-Unterstützung bei der Lösung oft zeitaufwändiger Routine-Probleme sorgt darüber hinaus für eine Entlastung und Motivation der Mitarbeiter.

Das Kuratorium

Professor Dr. Dr. h.c. Norbert Szyperski
Vorsitzender
InterScience GmbH, Universität zu Köln

Dr. Bernd Thomas
stellv. Vorsitzender
Continental AG

Touraj Gholami
BMW AG

Dr. Daniel Keesman
Genedata AG

Professor Dr. Dr. h.c. Tassilo Küpper
Universität zu Köln

Professor Dr. Thomas Lengauer, Ph.D.
Max-Planck-Institut für Informatik

Karl Solchenbach
Intel GmbH

Organisation des Instituts

Institutsleiter	Univ.-Professor Dr. Ulrich Trottenberg		02241/14-2759
stellv. Institutsleiter	Dr. Johannes Linden		02241/14-2910
Abteilungen und Geschäftsfelder	Simulationsanwendungen	Dr. Johannes Linden	02241/14-2910
	Numerische Software	Clemens-August Thole	02241/14-2739
	Bioinformatik	Dr. Martin Hofmann	02241/14-2802
	Optimierung	Dr. Ralf Heckmann	02241/14-2810
Zentrale Dienste	Institutsverwaltung, Planung und Controlling	Carl Vogt	02241/14-2692
	Marketing und Kommunikation	Michael Krapp	02241/14-2935
	IT-Infrastruktur	Horst Schwichtenberg	02241/14-2577

DAS INSTITUT IN ZAHLEN

Mitarbeiter

Die Zahl der Mitarbeiter am Fraunhofer SCAI ist in den vergangenen Jahren zurückgegangen. Der Grund ist die Neuausrichtung am Markt nach der Fusion der »GMD – Forschungszentrum Informationstechnik GmbH« mit der Fraunhofer-Gesellschaft e.V. zu nennen. Während Ende des Jahres 2002 noch über 80 Stellen besetzt waren, waren Ende Dezember 2005 nur noch 69 Mitarbeiter auf 62,8 Stellen beschäftigt; hinzu kommen 34 wissenschaftliche Hilfskräfte und drei Doktoranden. Das Institut bildete Ende des Jahres 2005 fünf Auszubildende aus.

Auf Grund der Steigerung der Erträge ist ab dem Jahr 2006 wieder mit größeren Personalzahlen zu rechnen.

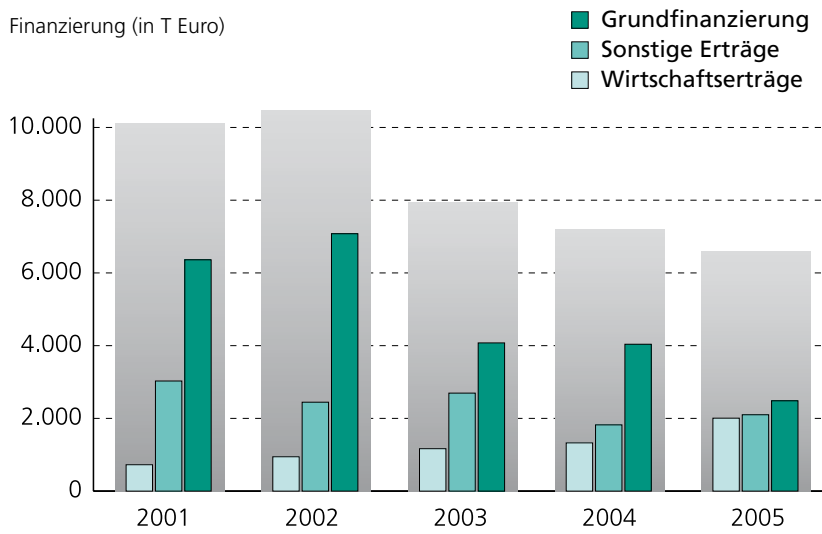
Finanzierung

Die Entwicklung der Erträge ist im vergangenen Jahr sehr positiv verlaufen: Die Gesamtquote externer Erträge stieg von 46,5 Prozent im Jahr 2004 auf 63,5 Prozent im Jahr 2005. Die Quote der Wirtschaftserträge erhöhte sich im gleichen Zeitraum von 20 auf 31 Prozent. Auch für die folgenden Jahre wird ein weiteres Wachstum erwartet.

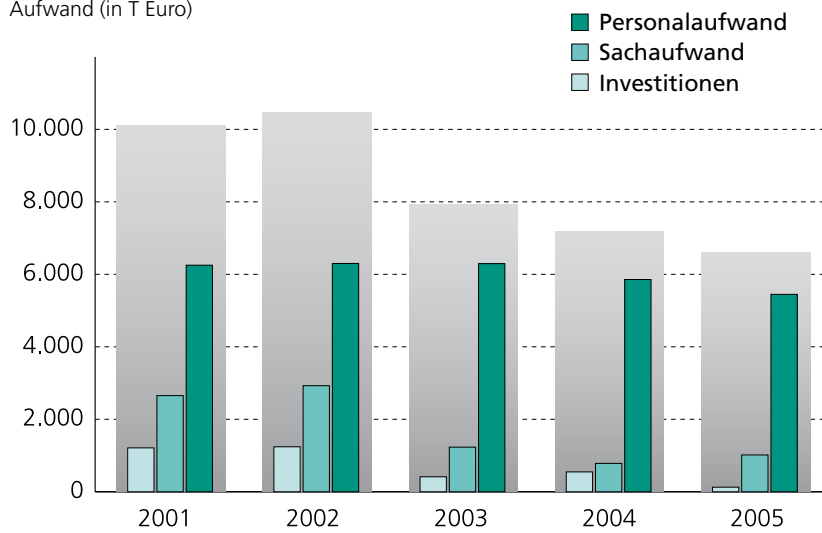
Aufwand

Die Betriebskosten des Instituts sind im Zeitraum von 2003 (7,5 Millionen Euro) bis 2005 (6,5 Millionen Euro) weiter zurückgegangen. Für das Jahr 2006 beläuft sich der Betriebshaushalt auf rund 7,3 Millionen Euro. Der Anteil der Personalkosten erreichte im Jahr 2004 den Spitzenwert 88 Prozent. Mittelfristig wird er auf etwa 75 Prozent sinken.

Finanzierung (in T Euro)



Aufwand (in T Euro)



DIE FRAUNHOFER-GESELLSCHAFT

Die Fraunhofer-Gesellschaft betreibt anwendungsorientierte Forschung zum direkten Nutzen für Unternehmen und zum Vorteil der Gesellschaft. Vertragspartner und Auftraggeber sind Industrie- und Dienstleistungsunternehmen sowie die öffentliche Hand. Im Auftrag und mit Förderung durch Ministerien und Behörden des Bundes und der Länder werden zukunftsrelevante Forschungsprojekte durchgeführt, die zu Innovationen im öffentlichen Nachfragebereich und in der Wirtschaft beitragen.

Mit technologie- und systemorientierten Innovationen für ihre Kunden tragen die Fraunhofer-Institute zur Wettbewerbsfähigkeit der Region, Deutschlands und Europas bei. Dabei zielen sie auf eine wirtschaftlich erfolgreiche, sozial gerechte und umweltverträgliche Entwicklung der Gesellschaft.

Ihren Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern bietet die Fraunhofer-Gesellschaft die Möglichkeit zur fachlichen und persönlichen Entwicklung für anspruchsvolle Positionen in ihren Instituten, in anderen Bereichen der Wissenschaft, in Wirtschaft und Gesellschaft.

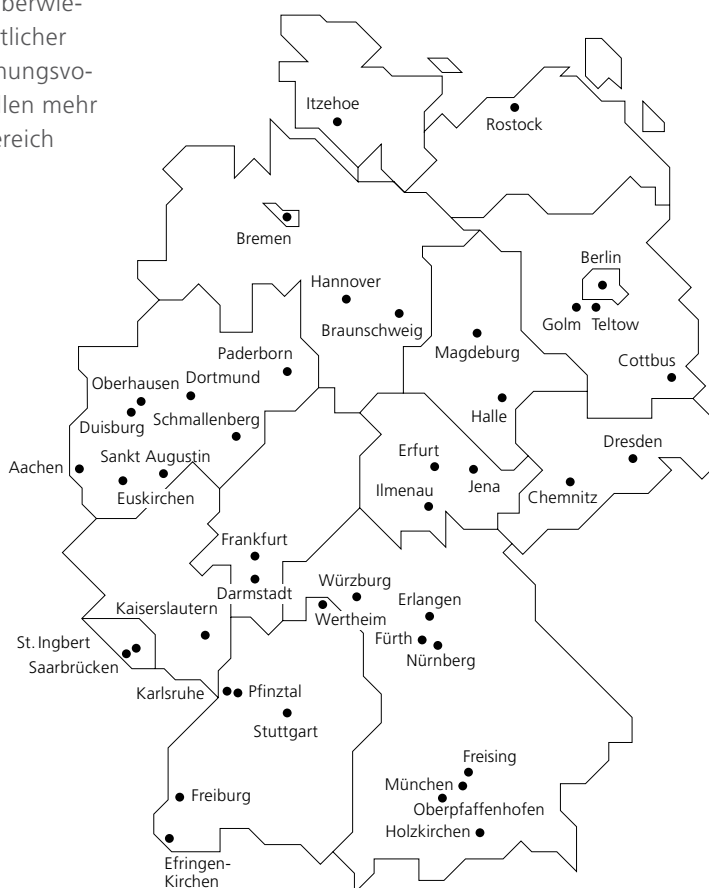
Die Fraunhofer-Gesellschaft betreibt derzeit rund 80 Forschungseinrichtungen, davon 58 Institute, an über 40 Standorten in ganz Deutschland. Rund 12 500 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, überwiegend mit natur- oder ingenieurwissenschaftlicher Ausbildung, bearbeiten das jährliche Forschungsvolumen von über 1 Milliarde Euro. Davon fallen mehr als 900 Millionen Euro auf den Leistungsbereich Vertragsforschung.

Rund zwei Drittel dieses Leistungsbereichs erwirtschaftet die Fraunhofer-Gesellschaft mit Aufträgen aus der Industrie und mit öffentlich finanzierten Forschungsprojekten. Ein Drittel wird von Bund und Ländern beigesteuert, auch um damit den Instituten die Möglichkeit zu geben, Problemlösungen vorzubereiten, die in fünf oder zehn Jahren für Wirtschaft und Gesellschaft aktuell werden.

Niederlassungen in Europa, in den USA und in Asien sorgen für Kontakt zu den wichtigsten gegenwärtigen und zukünftigen Wissenschafts- und Wirtschaftsräumen.

Mitglieder der 1949 gegründeten und als gemeinnützig anerkannten Fraunhofer-Gesellschaft sind namhafte Unternehmen und private Förderer. Von ihnen wird die bedarfsorientierte Entwicklung der Fraunhofer-Gesellschaft mitgestaltet.

Namensgeber der Gesellschaft ist der als Forscher, Erfinder und Unternehmer gleichermaßen erfolgreiche Münchner Gelehrte Joseph von Fraunhofer (1787 bis 1826).



DIE FRAUNHOFER-GRUPPE INFORMATIONSDIENST- UND KOMMUNIKATIONSTECHNIK

Stärken bündeln, Synergien nutzen

Die Fraunhofer-Gruppe Informations- und Kommunikationstechnik (IuK) ist Anlaufstelle für Industriekunden und Medienpartner auf der Suche nach dem richtigen Ansprechpartner. Stärken der 17 Mitgliedsinstitute werden in strategischen Allianzen gebündelt und gemeinsam vermarktet. Diese Vernetzung ermöglicht gezielte, branchenspezifische und ganzheitliche Lösungen aus der anwendungsorientierten Forschung: maßgeschneiderte IT-Lösungen, kompetente Technologieberatung sowie Vorlaufforschung für neue Produkte und Dienstleistungen. Regelmäßige Wirtschaftssummits bringen die richtigen Partner aus Industrie und Forschung an einen Tisch.

Eine gemeinsame Strategie

Die IuK-Gruppe entwickelt Strategien und Visionen für mittelfristige Forschungsschwerpunkte.

Mitgliedsinstitute werden bei Techno-

logietransfer und Forschungsmarketing unterstützt. Durch internationale Forschungsprogramme sind unsere Institute weltweit mit Unternehmen und wissenschaftlichen Einrichtungen vernetzt.

Breites Technologie-Spektrum

Die insgesamt 3 000 Mitarbeiter der 17 Institute sowie ein Jahresbudget von mehr als 190 Millionen Euro machen die IuK-Gruppe zum größten Forschungsverbund Europas. Daher decken auch unsere zehn Geschäftsfelder die gesamte Wertschöpfungskette ab:

- E-Business
- E-Government
- Medizin und Life Sciences
- Verkehr und Mobilität
- Produktion
- Digitale Medien
- Security
- Kultur und Unterhaltung
- Software
- Kommunikationssysteme und interdisziplinäre Anwendungen

Vorsitzender

Prof. Dr. José L. Encarnação, IGD

Stellvertretender Vorsitzender

Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, SCAI

Geschäftsführer

Dipl.-Inform. Boris Groth

Kontakt

Fraunhofer IuK-Gruppe
Friedrichstr. 60
10117 Berlin

Tel.: 030/72 61 - 5660

Fax.: 030/72 61 - 56619

boris.groth@iuk.fraunhofer.de

Berlin

FIRST Rechnerarchitektur und Softwaretechnik
FOKUS Offene Kommunikationssysteme
ISST Software- und Systemtechnik

Ilmenau

IDMT Digitale Medientechnologie

Sankt Augustin

AIS Autonome Intelligente Systeme
FIT Angewandte Informationstechnik
IMK Medienkommunikation
SCAI Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen

Darmstadt

IGD Graphische Datenverarbeitung
IPSI Integrierte Publikations- und Informationssysteme
SIT Sichere Informations-Technologie

Kaiserslautern

IESE Experimentelles Software Engineering
ITWM Techno- und Wirtschaftsmathematik

Karlsruhe

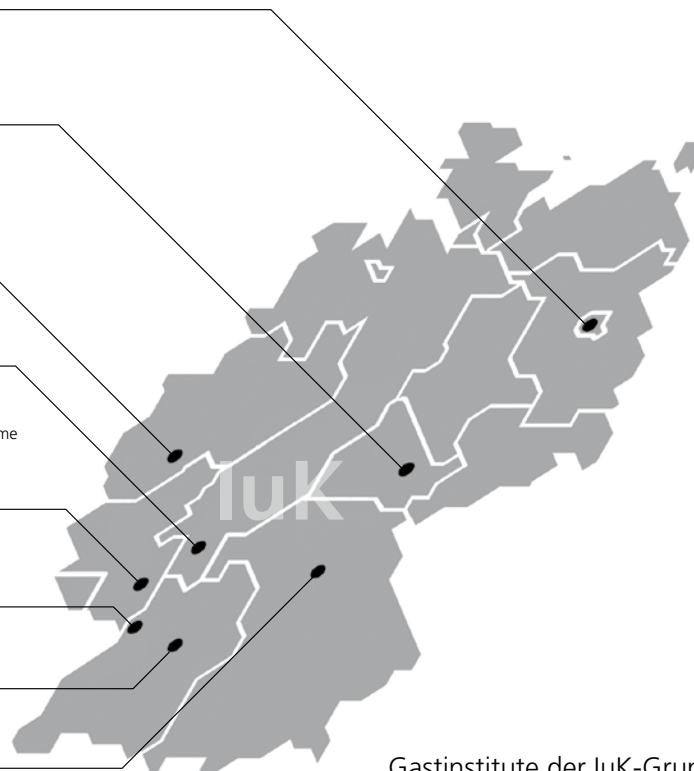
IITB Informations- und Datenverarbeitung

Stuttgart

IAO Arbeitswirtschaft und Organisation

Erlangen

IIS-A Integrierte Schaltungen



Gastinstitute der IuK-Gruppe

Nachrichtentechnik

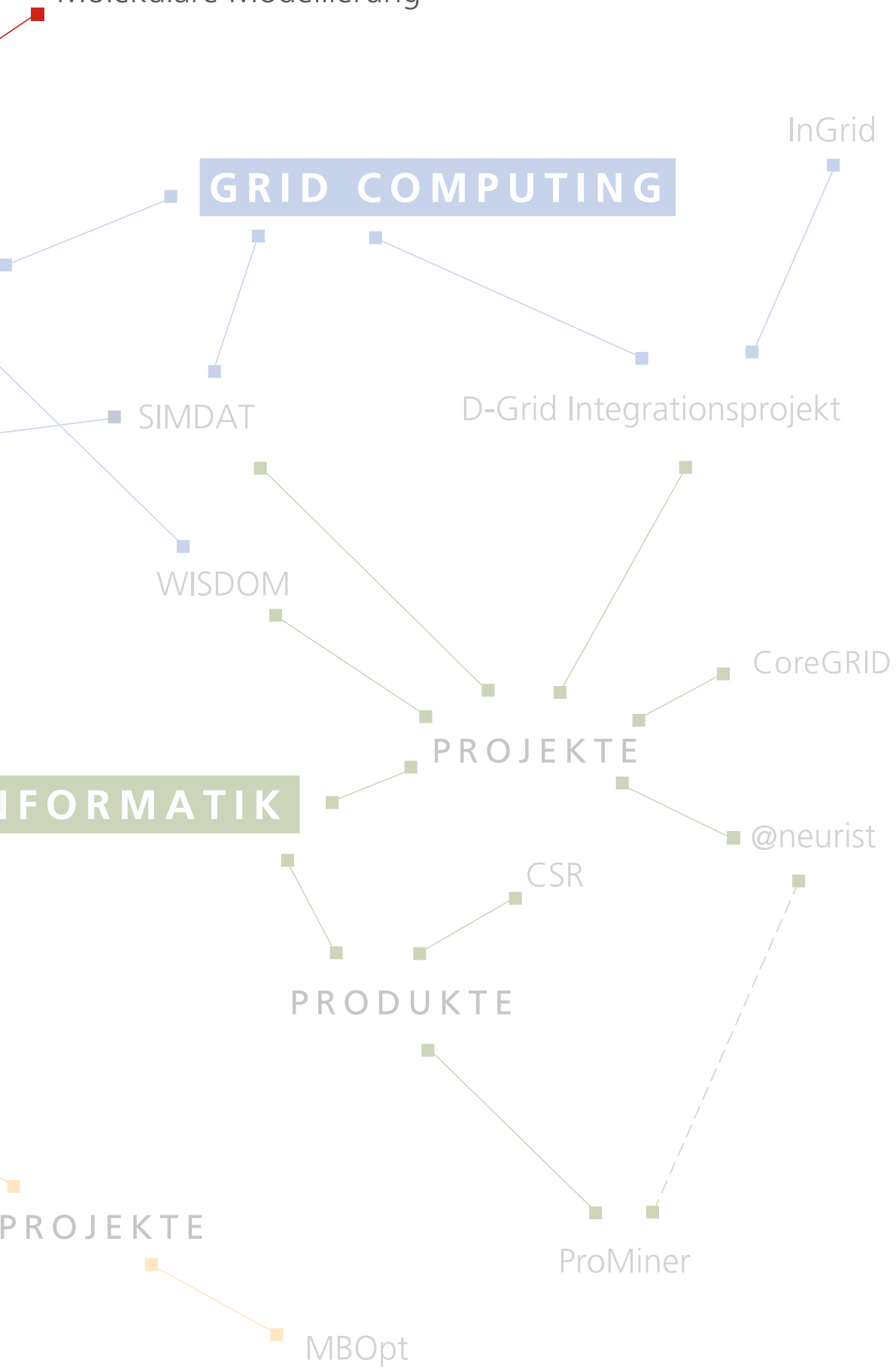
Integrierte Schaltungen

Heinrich-Hertz-Institut HHI, Berlin

IIS-B, Erlangen



Molekulare Modellierung



Die Arbeiten des Geschäftsfeldes Simulationsanwendungen gliedern sich in die Arbeitsbereiche:

- Multiphysics Engineering sowie
- High Performance Computing (HPC) und Grid Computing.

Im Arbeitsbereich Multiphysics Engineering entwickelt das Fraunhofer-Institut SCAI numerische Methoden und Softwarelösungen für multidisziplinäre Simulationen, wobei ingenieurwissenschaftliche Anwendungen im Mittelpunkt stehen. Beispiele sind die Simulation der Interaktion von Strömung und Struktur, von Strömung und Wärmeübertragung oder die Interaktion mit elektromagnetischen Feldern. Mit Anwendungen etwa im Maschinen- und Fahrzeugbau oder der elektrotechnischen Industrie.

Für die einzelnen Disziplinen – etwa Strömungsmechanik, Struktur und Festigkeitsanalyse oder Elektromagnetismus – existieren heute bereits viele leistungsfähige Verfahren und Programme am Markt. Steigende Anforderungen an die Realitätstreue und zunehmend komplexere Aufgaben im technischen Produkt- und Prozessentwurf erfordern es, Simulationen aus den verschiedenen Disziplinen miteinander zu koppeln, um so die Wechselwirkungen verschiedener technischer und physikalischer Effekte realitätsgenau und besser als in einer Einzelbetrachtung in einer Computersimulation abzubilden.

MpCCI koppelt Simulationsprogramme

MpCCI (Mesh based parallel Code Coupling Interface) ist die vom Fraunhofer-Institut SCAI entwickelte Softwarelösung, mit der unterschiedliche Simulationscodes zur Laufzeit miteinander gekoppelt werden können. Mit MpCCI lassen sich multidisziplinäre Simulationen einfach und kostengünstig erstellen. Die umfangreichen Simulationscodes selbst, ob kommerziell oder proprietär, können unverändert genutzt werden.

MpCCI unterstützt die führenden kommerziellen Simulationspakete (ABAQUS, ANSYS, FLUENT, Flux3D, ICEPAK, Maya HTT Codes, MSC.Marc, Permas, StarCD, RadTherm); Kooperationen mit den führenden Software-Anbietern sichern diese Position als Standardschnittstelle für die Simulationskopplung ab. Mit der aktuellen Version 3.0.5 bietet SCAI seinen Kunden seit dem Frühjahr 2006 neue Funkti-

onen und erweiterte Einsatzmöglichkeiten sowie die Unterstützung weiterer Systemumgebungen.

Im Arbeitsbereich Multiphysics Engineering entwickelt und optimiert SCAI im Kundenauftrag gekoppelte Simulationslösungen. Dazu gehören die Einbindung spezialisierter Simulationscodes, die Anpassung an Software-Schnittstellen und Formate, die Portierung auf spezielle Systemumgebungen sowie die Entwicklung numerischer Verfahren bis hin zur Berechnung.

High Performance und Grid Computing

Anwendungen der numerischen Simulation erfordern einen optimalen Einsatz leistungsfähiger Rechner. Hocheffiziente numerische Algorithmen und paralleles Rechnen bilden einen der traditionellen Arbeitsschwerpunkte des Instituts. Mit der rasanten Entwicklung der Grid-Technologie hat dieses Arbeitsfeld eine neue Orientierung erfahren. Grid-Technologie steht für eine Virtualisierung von Rechenressourcen, den transparenten Zugriff auf verteilte Rechner, Daten und Software. Grid-Technologie ermöglicht kooperatives Arbeiten, den Austausch von Daten und Methoden und unterstützt damit das Zusammenwirken von Entwicklergruppen in Unternehmen mit Zulieferern – lokal und weltweit.

SCAI entwickelt für Kunden und in Verbundprojekten mit Partnern aus Industrie und Wissenschaft Grid-basierte Lösungen. Dazu gehören zum Beispiel Erweiterungen existierender Grid-Middleware wie UNICORE, LCG/gLite oder Globus. Das Institut berät Anwender aus Geowissenschaften, Meteorologie und Bioinformatik in der Nutzung von Grid-Systemen und betreibt ein Cluster als Knoten der europaweiten Grid-Infrastruktur im Projekt Enabling Grids for E-science (EGEE) der Europäischen Kommission.

Ein wichtiges Vorhaben in diesem Bereich, welches mit Förderung des Bundesministeriums für Forschung und Bildung (BMBF) als Verbundprojekt im Mai 2005 gestartet wurde, ist das Projekt »Schiffbauliches Entwurfs- und Simulationssystem« (SEGIS). Es geht dabei um die Entwicklung eines Entwurfs- und Simulationssystems als integrierte und flexibel einsetzbare Arbeitsumgebung für die frühe schiffbauliche Entwurfsphase. Das System nutzt aktuelle Softwaretechnologien, darunter Grid-Technologien, Standards der Open Services Gateway Initiative

(OSGI) oder erweiterbare Frameworks zur Erstellung grafischer Benutzerschnittstellen. SESIS wird in verteilten Rechnerumgebungen einsetzbar sein, in denen Unix-, Linux- und Windowssysteme miteinander vernetzt sind.

Als Grid-fähiges System erlaubt es den Zugriff auf verteilte Daten- und Rechnerressourcen und unterstützt insbesondere die wichtige Zusammenarbeit von Werft und Zulieferunternehmen.

Grid Computing wird sich als Paradigma des verteilten Rechnens und des kooperativen Entwurfs durchsetzen. Es ist für die beiden numerischen Geschäftsfelder des Instituts ebenso wie für das Geschäftsfeld Bioinformatik ein zukunftssträchtiges Forschungs- und Entwicklungsgebiet. Die gemeinsamen Arbeiten des Instituts beschreibt der Abschnitt »Grid Computing« dieses Jahresberichts.

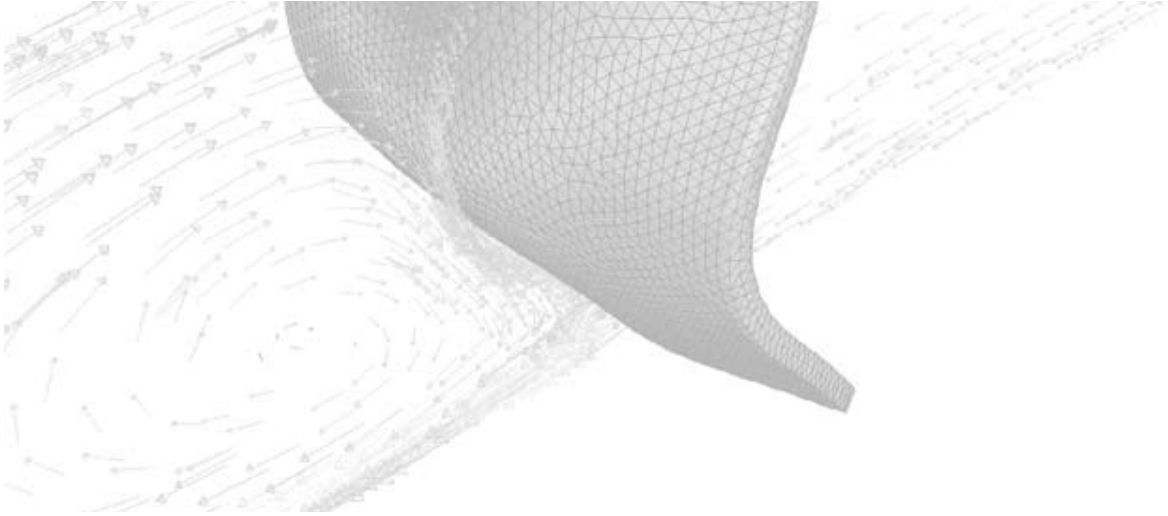
Kontakt

Dr. Johannes Linden
Abteilungsleiter Simulationsanwendungen
Tel.: 02241 / 14 - 2910
Fax.: 02241 / 14 - 2167
johannes.linden@scai.fraunhofer.de

Dr. Anton Schüller
stellvertretender Abteilungsleiter
Tel.: 02241 / 14 - 2572
Fax.: 02241 / 14 - 2181
anton.schueller@scai.fraunhofer.de

Dipl.-Informatiker Klaus Wolf
stellvertretender Abteilungsleiter
Tel.: 02241 / 14 - 2557
Fax.: 02241 / 14 - 2181
klaus.wolf@scai.fhg.de

MpCCI – Der Industriestandard zur Kopplung kommerzieller Simulationscodes



Ohne numerische Simulation läuft wenig in Konstruktion und Entwicklung. Es gibt kaum ein hochwertiges Produkt, das nicht mehrfach virtuell getestet wurde. Raketentriebwerke, Auspuffanlagen von PKWs, Bauwerke, Herzklappen, elektrische Schaltanlagen und Druckventile in Kernkraftwerken haben eines gemeinsam: Für eine realitätsnahe Vorhersage ihres Verhaltens müssen jeweils mehrere physikalische Grunddisziplinen berücksichtigt werden.

Für die Disziplinen Strömungsmechanik (CFD), Strukturanalyse (FEM), elektromagnetische Effekte (EMAG) und auch Strahlung gibt es in der Industrie jeweils eigenständige Simulationswerkzeuge. Die Kombination der besten Codes für einen bestimmte Anwendung war jedoch bis vor wenigen Jahren nur mit proprietären Lösungen möglich.

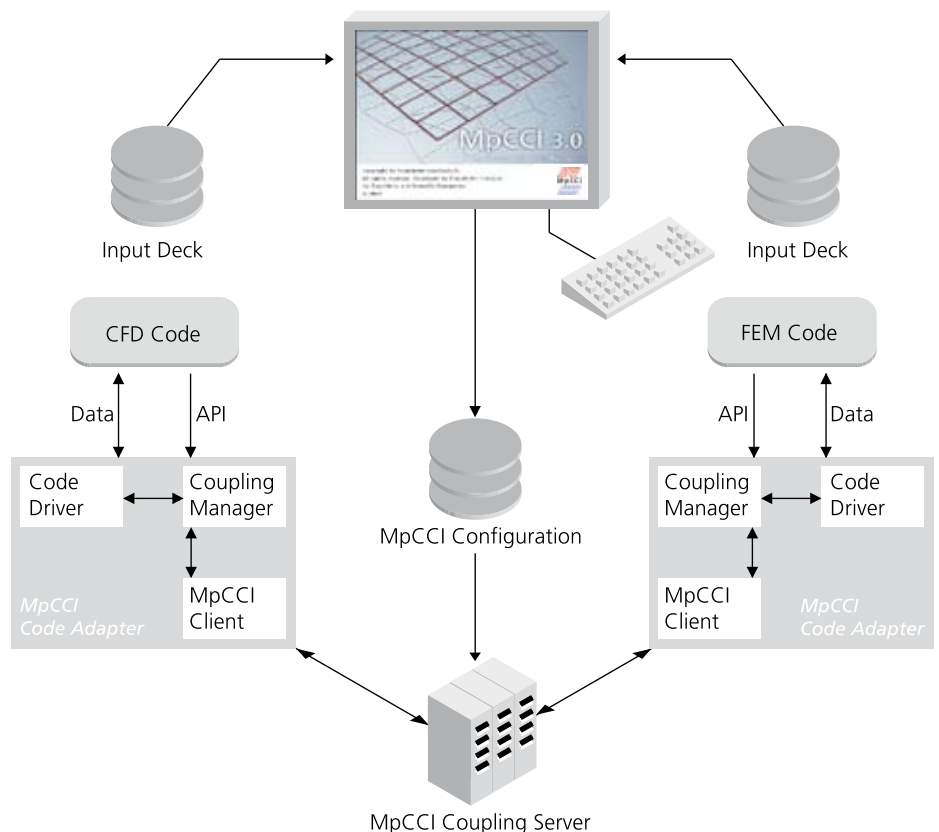
Mit MpCCI (Mesh-based parallel Code Coupling Interface) konnte Fraunhofer SCAI in den letzten Jahren den weltweit führenden Schnittstellenstandard für die direkte Kopplung von Simulationsprogrammen etablieren. Die Lösung ist als Lizenz-Software heute bei zahlreichen Kunden im Einsatz.

Die aktuelle Version 3.0.5 von MpCCI bietet dem Entwicklungsingenieur in Industrie und Forschung eine Komplettlösung für die multidisziplinäre Simulation.

Sie bietet viele Vorteile:

- Anbindungen an die führenden Simulationscodes: ABAQUS, Ansys, Maya ESC, MSC.Marc, Permas, UX Nastran, FLUENT, StarCD, Maya TMG, Flux3D und RadTherm.
- Einbettung in die Infrastruktur

des Kunden zum Computer Aided Engineering (CAE): MpCCI erkennt die schon installierten CAE-Werkzeuge automatisch und koppelt die Simulationsprogramme in ihrer Originalversion miteinander. Auf Seiten der Codes sind keine Anpassungen an MpCCI notwendig.



Die modulare Architektur von MpCCI

- Einheitliche Benutzerschnittstelle: Die MpCCI-Kopplungsumgebung erkennt bereits vorhandene »monodisziplinäre« Rechenmodelle und bietet dem Anwender in seiner graphischen Oberfläche die möglichen Kopplungsflächen und -volumen zur Auswahl. In der grafischen Benutzerschnittstelle definiert der Anwender alle weiteren Kopplungsbedingungen (Kopplungsgebiete, Kopplungsgrößen, Such- und Interpolationsparameter) und startet schließlich das gekoppelte multidisziplinäre Simulationssystem auf einem verteilten Rechnernetzwerk.
- Kopplungsmodelle für typische multidisziplinäre Anwendungsfälle: Fluid-Struktur-Interaktion, thermische und Strahlungs-Kopplung, Elektrothermische Kopplung, Plasma- und Lichtbogensimulationen sowie gekoppelte Prozessketten in der Blechumformung. Weitere Modelle werden auf Kundenanfrage hin bereit gestellt.

Strategische Partnerschaften

Der Erfolg und die Akzeptanz von MpCCI gründet sich nicht allein auf den technischen und methodischen Lösungsansatz der Software. Hinzu kommen die vielen Kooperationen mit führenden Anbietern von Simulationssoftware. Die technische Weiterentwicklung, Lösungen für spezielle und allgemeine Nutzeranforderungen sowie die strategische Marktausrichtung diskutiert das MpCCI-Team vorab mit den Partnern im Bereich Computer Aided Engineering und realisiert sie in enger Kooperation mit ihnen. MpCCI spricht die Kunden etablierter CAE-Lösungen an und bietet ihnen neue Simulationspotenziale:

- FLUENT Inc. und ABAQUS Inc. gründeten im Dezember 2003 eine strategische Initiative zur Fluid Structure Interaction (FSI), um die wachsende Nachfrage aus ihrem Kundenbereich gezielt bearbeiten zu können. Zur Umsetzung ihrer FSI-Initiative haben beide MpCCI als das geeignete Lösungswerkzeug ausgewählt – ABAQUS Inc. und FLUENT Inc. haben

entsprechende Kooperationsverträge mit Fraunhofer SCAI im Frühjahr und im Sommer 2004 abgeschlossen.

- CD adapco Japan (CDAJ) vertreibt MpCCI in Fernost (Japan, China und Korea). Als langjähriger Simulations-Dienstleister kennt CDAJ den Markt sehr gut und hat die Einführung von MpCCI erfolgreich umgesetzt.
- Mit der Firma MSC.Software entwickelt SCAI die Anbindung von MpCCI für die Strukturcodes MSC.Marc und MSC.Nastran.
- Gemeinsam mit der INTES GmbH wurde MpCCI für den Strukturlöser PERMAS realisiert.
- In einem Projekt für Schneider Electric US sind der spezialisierte EMAG-Code Flux3D von CEDRAT S.A. (Frankreich) sowie die FLUENT/ICEPAK-Umgebung an MpCCI angeschlossen worden. Ziel dabei ist die Simulation thermischer Effekte in elektrischen Bauteilen und Schaltgeräten.
- Der Strahlungscode Posrad von CD adapco wurde in Kombination mit PERMAS und StarCD als Lösung für Temperaturberechnungen im Automobilbau eingesetzt.
- Ein anderer Strahlungscode, RadTherm von ThermoAnalytics Inc., wurde ebenfalls in Kombination mit Strömungslösern (FLUENT oder StarCD) zur Berechnung von Strahlungseffekten genutzt.
- Das Software-Haus Maya Heat Transfer (Kanada) hat seine Codes ESC, TMG und UX Nastran über MpCCI gekoppelt und für thermisch bedingte Verformungseffekte bei Satelliten eingesetzt.
- Die Kopplung eindimensionaler Codes im Bereich Computational Fluid Dynamics (CFD), beispielsweise FlowMaster, mit dreidimensionalen Verfahren zur Simulation von Kühlkreisläufen befindet sich in der Entwicklung. Vorteil dieser 1D-3D-Kombination ist die bessere Effizienz bei komplexen Systemen – im 1D-Code wird der Kühlkreislauf modelliert, während der 3D-Code die detailgenaue Berechnung eines Küh-

lers oder einer Pumpe übernimmt.

- Größere Unternehmen nutzen außer den kommerziellen Software-Lösungen vielfach selbst entwickelte Codes. Die Anbindung und Kopplung dieser Eigenentwicklungen mit den von MpCCI direkt unterstützten Codes wird immer stärker nachgefragt. Die neue Version von MpCCI unterstützt dies mit offenen Programmierschnittstellen.

Markposition

Anwender und Softwarehäuser weltweit schätzen und nutzen MpCCI. In der Zeitschrift »Desktop Engineering« vom Juli 2005 äußern sich FLUENT, ABAQUS und CD-adapco unter der Überschrift »MpCCI – the enabler«:

The partnership between ABAQUS and FLUENT includes a third partner – Fraunhofer SCAI, a nonprofit German developer of software called MpCCI – providing the intercommunication backbone for the coupled capabilities. »This type of integration is easy to extend because it will work with any code that's MpCCI-enabled,« says Barb Hutchings, director of strategic partnerships for FLUENT. [...] »However, Berry (Manager of engineering applications for ABAQUS) points out that the three-way partnership does raise deployment issues. It means users have to pay for and license a third program, but it does make it easier to communicate between the two kinds of code, and provides benefits that make it worth the cost and trouble.«

Dennis Nagy (Vice president of business development for CD-adapco Group) points out that CD-adapco is currently working with MpCCI and directly with structural analysis vendors. »Direct coupling takes more time, and needs developers assigned to program it,« he says, but also notes that whether used together or side by side, structural and fluids codes help users solve problems that could not have been done before. »We recently saw a presentation of the use of STAR-CD on an ABAQUS model of a natural human tissue heart valve, which is terribly difficult to simulate.«

Der Erfolg von MpCCI lässt sich auch an den Lizenzzahlen ablesen. MpCCI 3.0 wird seit August 2004 auf dem Markt angeboten – bis Februar 2006 konnten 85 Lizenzen weltweit (direkt oder über Vertriebspartner) verkauft werden:

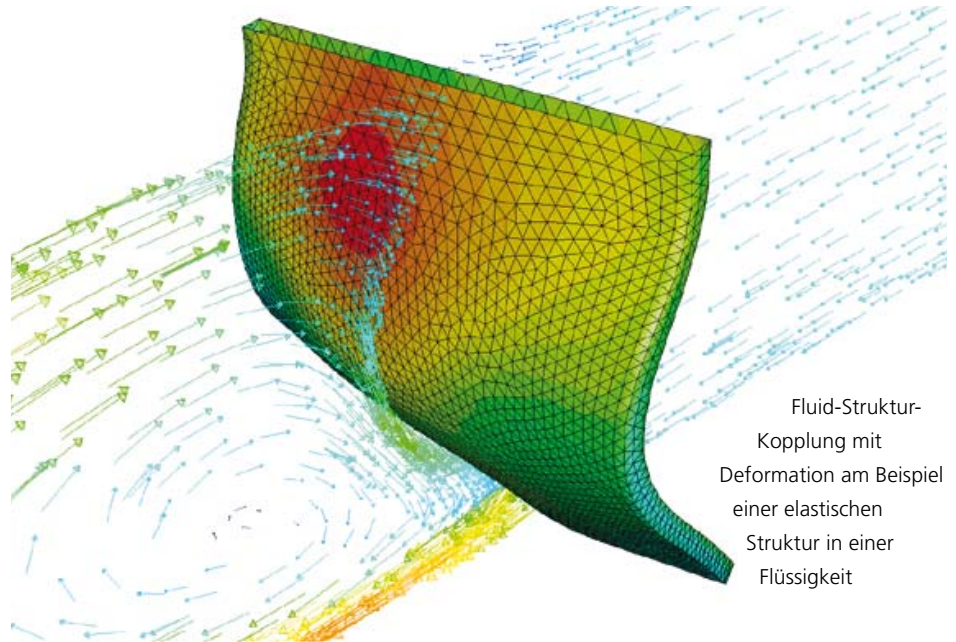
Deutschland:	25
Frankreich:	9
Weitere europäische Länder:	15
Vereinigte Staaten:	22
Asien:	12

Anwendungsbeispiele

Fluid-Struktur-Kopplung mit Deformation

Der überwiegende Teil der gekoppelten Anwendungen befasst sich mit Strukturdeformationen – erzeugt von äußerem Strömungsdruck oder einer anderen externen Kraft – die eine signifikante Änderung des umgebenden Strömungsbereichs zur Folge haben. Die zu kopplenden physikalischen Größen sind dann Strömungsdruck, also Kraftvektoren, von der Strömungssimulation zur Seite der Struktursimulation und Deformationen (als Knotenpositionen) von der Struktursimulation an die Strömungssimulation.

Bei zeitdynamischen Fällen ist die Auswahl der lokalen (jeweils in CFD und FEM) sowie der globalen (Kopplung) Zeitschritt-

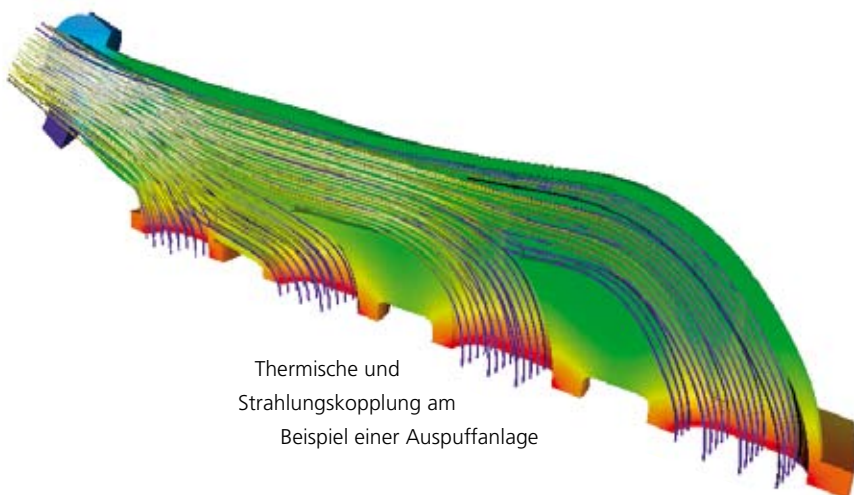


weiten von besonderer Bedeutung. Hier kann es günstig sein, eine Anpassung der Kopplungszeitschrittweiten durch die dominierende Disziplin während der Laufzeit vorzunehmen.

Anwendungen für diese Art der Kopplung mit MpCCI sind:

- Aeroelastik von Segelflugzeugen (Eidgenössische Technische Hochschule Zürich),
- Zeitverhalten von Ventilen und Pumpen (Denso Japan),
- Vibrationsuntersuchungen in HardDisk Drives (Seagate),

- Schließvorgänge bei Türdichtungen (Metzeler Automotive),
- Aquaplaning für Reifen (MSC),
- Explosions- und Berstsimulationen (Fraunhofer-Institut EMI),
- Vibrationen in Kraftwerksanlagen (JAEA/JAERI),
- Deformationen bei Rotationsmaschinen (ProcessFlow),
- Windlasten bei dünnwandigen Strukturen und Zeldächern (Technische Universität München),
- Dynamische Simulation von Aneurismen (Berufsakademie Mosbach).



Thermische und Strahlungskopplung

Außer der Deformation von Strukturen spielt die Übertragung von thermischer Energie zwischen Fluid und Struktur eine wichtige Rolle. Die hier betrachteten Größen sind die Temperaturen in der Struktur sowie die Filmtemperaturen und Übergangskoeffizienten aus der Strömungsberechnung. In vielen Fällen betrachtet man hier stationäre Zustände, bei denen meist wenige Kopplungsiterationen zu einer Konvergenz im gekoppelten System führen.

Beispiele für solche Anwendungen sind unter anderen:

- Strahlungskopplung im Unterbodenbereich Automobil (Berufsakademie Mosbach)
- thermische Kopplung bei Turbinenschaufeln (Brandenburgische Technische Universität Cottbus),
- thermisches Management einer Abgasanlage (DaimlerChrysler in Stuttgart),
- Simulation des Wiedereintritts von Raumfahrzeugen in die Atmosphäre (Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Köln-Porz),
- Thermokopplung im Zylinderkopf eines Dieselmotors (Deutz AG Entwicklungszentrum in Köln-Porz),
- Strahlungseinflüsse und Deformation bei Satelliten (MAYA Heat Transfer Technologies Ltd. in Toronto).

Kontakt

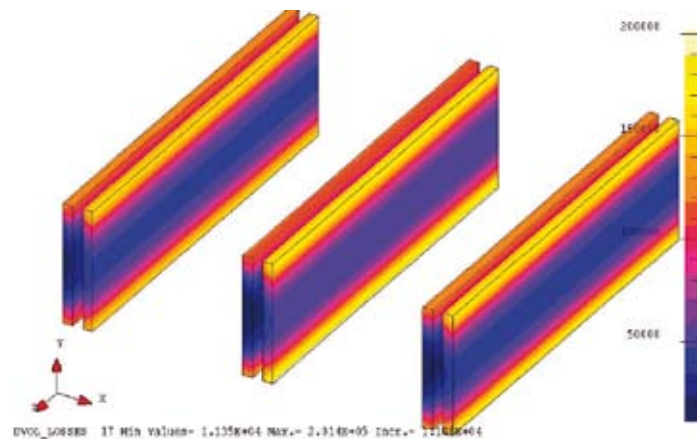
Dipl.-Informatiker Klaus Wolf
 Tel.: 02241/14-2557
 Fax.: 02241/14-2181
 klaus.wolf@scai.fraunhofer.de

Interaktionen zwischen elektromagnetischen Feldern und CFD oder FEM

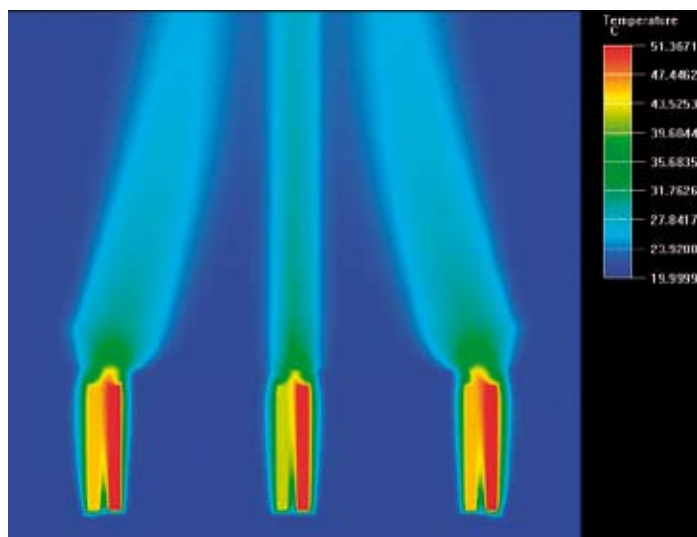
Bei der Entwicklung elektrotechnischer Betriebsmittel spielt die Vorhersage von Erwärmungsvorgängen eine entscheidende Rolle. Der Wechselstromfluss bewirkt durch Ohmsche Verluste eine Erwärmung. Als Kühlmechanismus wirkt im Allgemeinen freie Konvektion. Die zunehmende Tendenz zur Miniaturisierung zwingt die Hersteller, das thermische Belastungspotential auszuschöpfen. Dabei können in Folge der verringerten Wärme abführenden Oberflächen Temperaturen auftreten, die zur Zerstörung von Bauteilen führt.

Ausgewählte Anwender aus der elektrotechnischen Industrie sind:

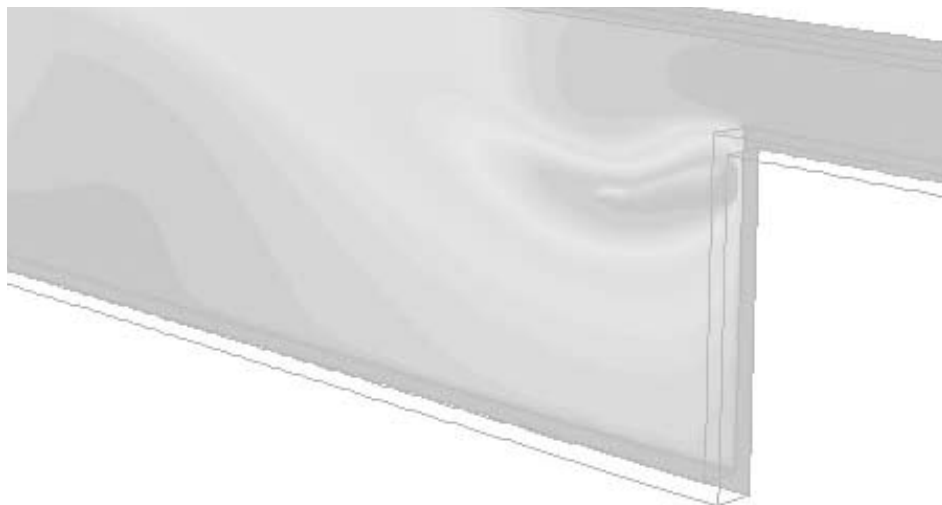
- Schneider Electric, USA (Erwärmung elektrischer Schaltgeräte),
- LS Industrial System, Korea (Leistungsschalter, gasisolierte Schaltanlagen),
- Moeller AG in Bonn (elektrischer Lichtbogen in Niederspannungsschaltgeräten),
- CD adapco, Japan (Piezo-Elemente, Piezo-Fans als aktive Kühlelemente).



Ergebnisse der Simulation elektrischer Leiterbahnen: Dazu wurden ein Code zur Simulation elektromagnetischer Felder und zur Strömungssimulation miteinander gekoppelt. Das obere Bild zeigt die Simulation der Verlustleistungsdichte, das untere die Simulation der Temperaturverteilung (Bilder: Schneider Electric, USA)



Lichtbogensimulation für Niederspannungs-Schaltgeräte



Aufgabe

Elektrische Schaltgeräte (Bild 1) dienen der Verteilung elektrischer Energie, dem betriebsmäßigen Schalten des elektrischen Stromes und der Beherrschung von Fehlerereignissen. Im Falle eines elektrischen Kurzschlusses wird bei der Kontakttrennung ein elektrischer Lichtbogen gezündet, der als Schaltelement dient.

Das Schaltgerät ist dabei hohen thermischen und mechanischen Beanspruchungen ausgesetzt, wobei die Temperatur der ionisierten Luft (Plasma) Werte von 25 000 Kelvin und mehr erreicht und Druckspitzen bis 10 Bar auftreten. Für die Entwicklung von Schaltgeräten ist die Kenntnis und Vorhersagemöglichkeit dieser dynamischen Belastungen ein wichtiges Instrument zur Beschleunigung der Entwicklungsarbeit, da Prüfungen im Modellstadium aufwändig und damit teuer sind.



Bild 1: Niederspannungs-Leistungsschalter

Lösung

Der Strömungsberechnung liegen Massebilanz, Impulsbilanz und Energiebilanz zu Grunde, welche mittels Finite-Volumen-Methode mit dem Programm FLUENT gelöst werden. Zusätzliche Quellterme, die durch den Stromfluss im Plasma erzeugt werden, müssen in Energie- und Impulsbilanz eingefügt werden. Ohmsche Verluste sorgen für die Aufheizung des Schaltmediums, Lorentzkräfte für den Antrieb und damit die Lichtbogenbewegung. Weiterhin ist der Energietransport durch Strahlung zu berücksichtigen.

Zur Berechnung von Stromdichte, elektrischem Potenzial und Magnetfeld kommt die Finite-Element-Methode mit dem Softwarepaket ANSYS zum Einsatz.

Die Kopplungsschnittstelle MpCCI ermöglicht die gemeinsame Lösung der gekoppelten partiellen Differentialgleichungen von Strömung und Magnetfeld. Wichtige Impulse für die Entwicklung von MpCCI entstehen hier durch den konkreten Bezug zur Anwendung. Beispielfhaft seien die Anbindung der kommerziellen Simulationsprogramme und die vollständige Unterstützung von Parallelprozessen genannt. Aufgrund des hohen numerischen Aufwandes ist gerade die Nutzung paralleler Berechnungsmöglichkeiten unumgänglich.

Experiment

Das Versuchsmodell zur Verifikation der numerischen Berechnungen besteht aus planparallelen Kupfer-Laufschienen, die vorn und hinten mit Wänden abgeschlossen sind, wie in Bild 2 schematisch dargestellt.

In einer Wand sind piezoelektrische Druckaufnehmer positioniert, an der gegenüberliegenden Wand erfolgt der optische Zugang für eine Hochgeschwindigkeitskamera. Die Ausblasöffnungen am oberen und unteren Ende der Laufschienen können mit verschiedenen Öffnungsquerschnitten versehen werden. Neben optischen Aufnahmen, Strom-, Spannungs- und Druckmessung liefern Magnetfeldsensoren Informationen zum Laufverhalten des Lichtbogens.

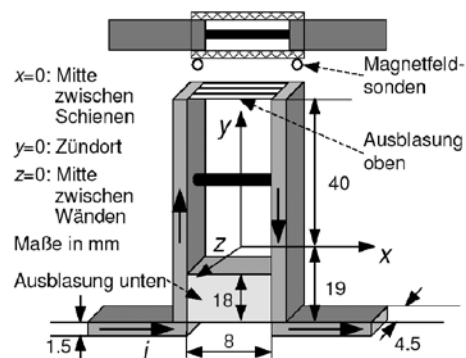


Bild 2: Versuchsmodell mit parallelen Laufschienen

Ergebnisse

Sowohl in der Messung als auch in der Berechnung sind unterschiedliche Phasen der Bogenbewegung festzustellen. Anfangs wird der Gasraum aufgrund des schnell ansteigenden Stromes aufgeheizt. Innerhalb von 0.1 Millisekunden hat der Lichtbogen in der Simulation eine horizontale Ausdehnung von circa zehn Millimetern erreicht. Im weiteren Verlauf ist ein kurzes Verharren und anschließende Beschleunigung erkennbar, siehe Bild 3.

Bild 4 zeigt die berechnete Temperaturverteilung in den ersten 100 µs.

Der Vergleich der Temperaturen zu den optischen Aufnahmen aus Bild 5 zeigt eine gute Übereinstimmung mit der Helligkeitsverteilung.

Perspektiven

Eine Verbesserung der Genauigkeit und Erweiterung der Simulationsmodelle wird angestrebt. Die Erhöhung der geometrischen Komplexität verringert den Abstand zur realen Anwendung im Schaltgerät.

Partner

Die Simulation dieser komplexen Vorgänge steht im Fokus des Projektes mit der Moeller GmbH in Bonn. Die physikalische und numerische Modellbildung unterstützen Versuche an der Technischen Universität Ilmenau (Fachgruppe Elektrische Geräte und Anlagen).

Kontakt

Dipl.-Ingenieur Christian Rümpler
 Tel.: 02241 / 14 - 2135
 Fax.: 02241 / 14 - 2181
 christian.ruempler@scai.fraunhofer.de

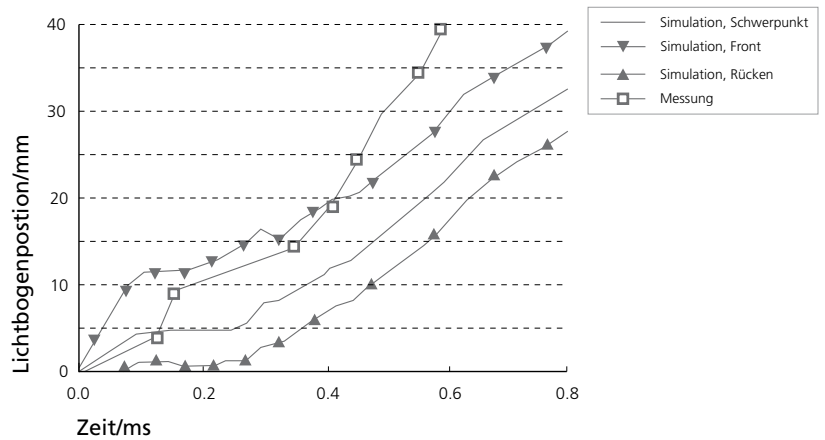


Bild 3: Zeitlicher Verlauf der Lichtbogenposition in Simulation und Messung

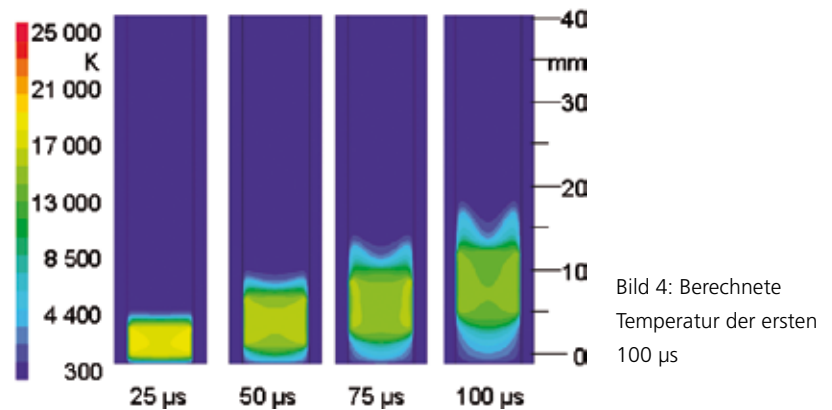


Bild 4: Berechnete Temperatur der ersten 100 µs

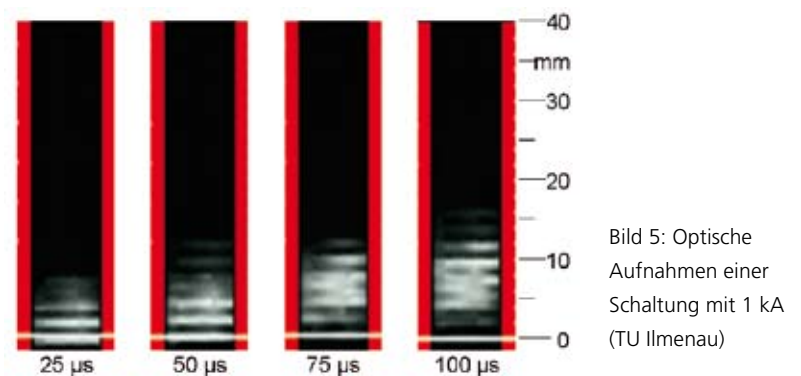


Bild 5: Optische Aufnahmen einer Schaltung mit 1 kA (TU Ilmenau)

3ZM-GRIMEX – Hochwassersimulation



Situation

Das Auguthochwasser 2002 hat allein in Dresden Schäden in der Höhe von circa einer Milliarde Euro verursacht. Dieses Hochwasser hat gezeigt, dass neben den oberirdischen Flutereignissen die unterirdische Wasserausbreitung in Grundwasser und Kanalsystem wesentlichen Schaden anrichten kann.

Aufgabe

Im März 2005 startete das Projekt 3ZM-GRIMEX (Entwicklung eines 3-Zonen-Modells für das Grundwasser- und Infrastrukturmanagement nach extremen Hochwasserereignissen in urbanen Räumen). Im Projekt geht es darum, ein Simulationswerkzeug zu entwickeln, welches das Oberflächenwasser, das Kanalsystem und das Grundwasser – unter Berücksichtigung der Interaktion – simulieren kann. Die Software soll eine Untersuchung der Wechselwirkungen in den Abflussvorgängen bei Hochwasserereignissen erlauben und zur Erarbeitung von Handlungsstrategien eingesetzt werden. Das Testszenario wird das Auguthochwasser 2002 in Dresden sein.

Lösung

Zur Simulation der einzelnen Komponenten werden bewährte Codes eingesetzt. Die beiden Programme RisoSurf (Fraunhofer-Institut ITWM) und TrimR2D (Public Domain) zur Simulation des Oberflächenwassers beruhen auf Varianten



Bild 1: Hochwasser 2002 in Dresden, Semperoper (Quelle: Feuerwehr Dresden)

der zweidimensionalen Flachwassergleichungen. Die Kanalprogramme Hamoka (Universität Kaiserslautern, Fachgebiet Siedlungswasserwirtschaft) und Hystem-Extran (Institut für technisch-wissenschaftliche Hydrologie GmbH, Hannover) beruhen auf den eindimensionalen Flachwassergleichungen. Zur Modellierung des Grundwassers kommt das Programm PCGEOFIM (Ingenieurbüro für Grundwasser GmbH, Leipzig) zum Einsatz, das den Wasserstand unter Ausnutzung des Gesetzes von Darcy berechnet.

Die Vorgänge im Oberflächenwasser,

Kanalsystem und Grundwasser sind über Wasserflüsse miteinander gekoppelt. Zum Beispiel wird der Kanal als poröses Medium betrachtet, das je nach Grundwasserstand Wasser an das Grundwasser abgibt oder vom Grundwasser aufnimmt.

SCAI hat im Projekt 3ZM-GRIMEX die Aufgabe, diese Programme zu einem Simulationstool zusammenzuführen, das die Wasserflüsse zwischen den Gebieten in die Simulation mit einbezieht. Dazu wird die SCAI-Software MpCCI eingesetzt. Bei der Kopplung müssen insbesondere die verschiedenen Zeit- und

Raumskalen berücksichtigt werden. So bildet sich Hochwasser in Tagen, aber nach dem Augusthochwasser 2002 ist das Grundwasser erst nach mehr als einem Jahr auf sein Normalniveau zurückgegangen.

Stand

Die Anforderungen an die Simulation sind spezifiziert und die Implementierung ist in Arbeit. Erste gekoppelte Rechnungen sollen im Jahr 2006 durchgeführt werden.

3ZM-GRIMEX wird vom Bundesministerium für Forschung im Förderschwerpunkt »Risikomanagement extremer Hochwasserereignisse« (RIMAX) gefördert.

Laufzeit ist März 2005 bis Februar 2008.

Kontakt

Dr. Barbara Steckel
 Tel.: 02241/14-2768
 Fax.: 02241/14-2181
 barbara.steckel@scai.fraunhofer.de

Projektdaten

Partner im Projekt 3ZM-GRIMEX sind:

- Dresdner Grundwasserforschungszentrum e.V. (Projektkoordinator),
- Landeshauptstadt Dresden, Umweltamt,
- Technische Universität Dresden,
- UmweltforschungszentrumHalle-Leipzig GmbH,
- Fraunhofer-Institute für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM und SCAI in Kooperation mit der Stadtentwässerung, dem Regierungspräsidium, den Stadtwerken und dem Landesamt für Umwelt und Geologie (jeweils in Dresden)

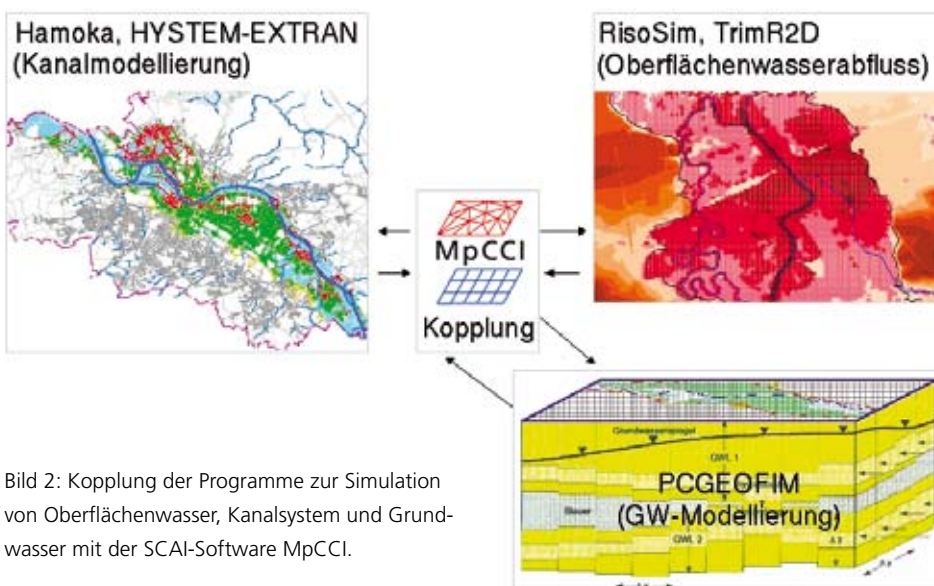
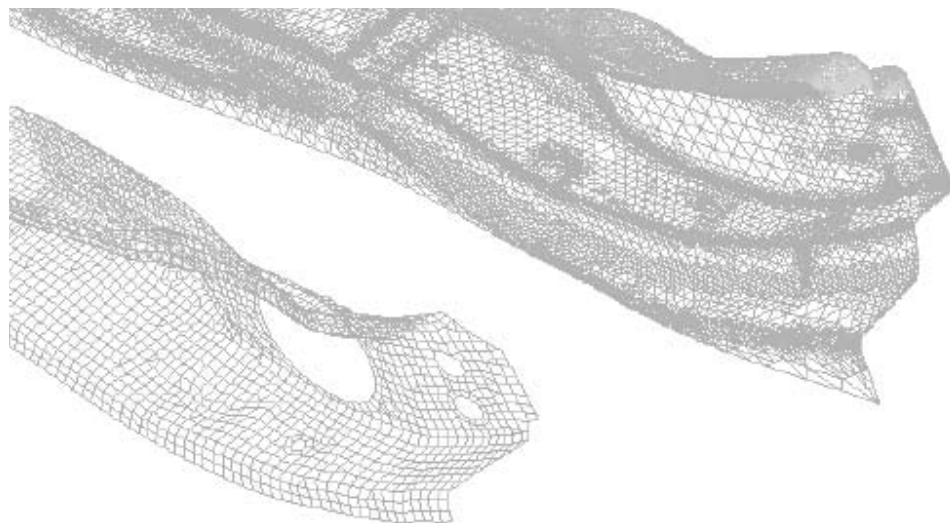


Bild 2: Kopplung der Programme zur Simulation von Oberflächenwasser, Kanalsystem und Grundwasser mit der SCAI-Software MpCCI.

Kopplung von Umform- und Aufprallsimulation



Situation

Bei der Konstruktion neuer Fahrzeugmodelle steht die Gewichtsreduzierung als Entwicklungsziel bei Automobilherstellern und Zulieferindustrie auf der Prioritätenliste weit oben. Zugleich müssen die leichteren Werkstoffe und Bauteilkonstruktionen den gestiegenen Anforderungen an die passive Sicherheit gerecht werden. Hochfeste Mehrphasenstähle können hierzu einen wesentlichen Beitrag leisten.

Die heutige Verwendung von Mehrphasenstählen bleibt gegenüber ihrem Einsatzpotenzial noch zurück. Ausschlaggebend dafür ist die bisher unzureichende Berechenbarkeit des Aufprallverhaltens von Karosserieteilen aus Mehrphasenstählen. Aufprallsimulationen bilden im Entwicklungsprozess von Fahrzeugen eine entscheidende Komponente: Sie dienen nicht nur der Berechnung globaler Verformungseigenschaften der Karosserie, beispielsweise der Gesamtdeformation, dem Verzögerungsverhalten, der Eindringgeschwindigkeiten und der Intrusionen, sondern werden zunehmend zur Berechnung der lokalen Deformationen und Gestaltoptimierung von Karosseriekomponenten eingesetzt.

Nur durch die Berücksichtigung der Herstellungshistorie (Umformsimulation) in der Aufprallsimulation lässt sich das Anwendungspotenzial von Mehrphasenstählen nachhaltig steigern. Dabei wird durch die Kopplung von Umform- und

Crash-Simulation nicht nur der gezielte Einsatz von Mehrphasenstählen für Karosserieteile ermöglicht die beim Aufprall verformt werden. Vielmehr können diese gekoppelten Simulationen insbesondere die Vorteile der Mehrphasenstähle für den Fahrzeugbau aufzeigen.

Am Markt gibt es eine Reihe von Umform- und Crash-Simulationsprogrammen. In den meisten Fällen ist eine Übertragung von Umformergebnissen in die Aufprallsimulation nicht möglich. In den wenigen Ausnahmen, wo es möglich ist, ist diese Übertragung für den Berechnungsingenieur jedoch nicht transparent. Der Ingenieur hat keinen Einfluss auf Art und Güte der Interpolation.

Er kann die Interpolationsergebnisse hinsichtlich der Aufprallsimulation nicht bewerten. Beides sind jedoch wesentliche Faktoren, welche die Qualität und Verlässlichkeit der Aufprallsimulation insbesondere bei komplexen Werkstoffen wie Mehrphasenstählen stark beeinflussen.

Die meisten Simulationstools für Umformung und Crash arbeiten häufig mit inkompatiblen Dateiformaten und bieten keine oder kaum Möglichkeiten des direkten Datenaustauschs. Bei der Vielzahl der in der Fahrzeugindustrie eingesetzten Programme ist auch in Zukunft nicht davon auszugehen, dass sich dies ändern wird.

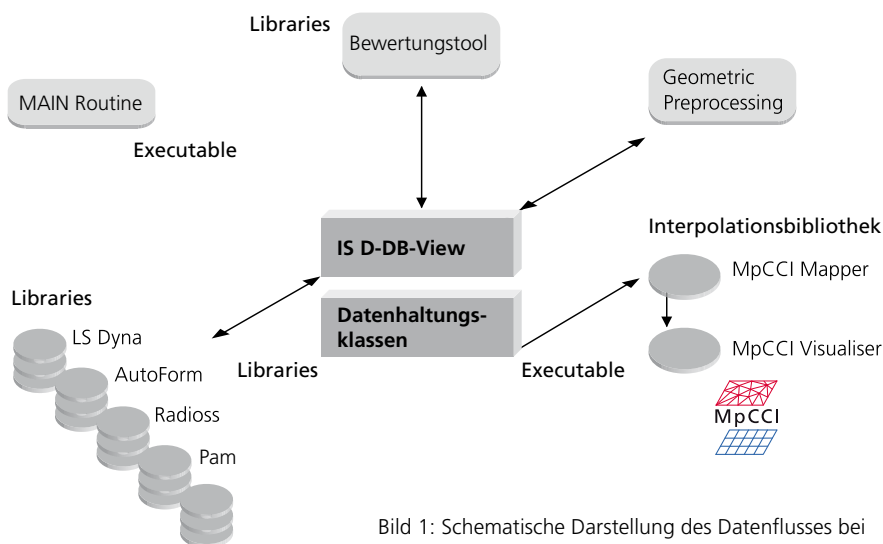


Bild 1: Schematische Darstellung des Datenflusses bei einer Umformsimulation

Aufgabe

Ausgehend von Vorentwicklungen in dem vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Projekt auto>opt wird in Zusammenarbeit mit dem Verband der Automobilindustrie (VDA) eine Software entwickelt, die es erlaubt, Ergebnisse aus Umformsimulationen für die Weiterverarbeitung in Aufprallsimulationen von Karrosseriekomponenten zu verwenden.

Diese Mapping Software überträgt die Umformergebnisse auf das Simulationsgitter der Aufprallsimulation. Dafür kommen spezielle Interpolationsverfahren zum Einsatz, die eine hohe Abbildungs-güte gewährleisten. Die Software erlaubt die Kopplung verschiedener am Markt eingeführter Programme zur Umform- und Crashsimulation. Durch die Unabhängigkeit der Mapping Software von den Umform- und Crash-Programmen wird eine völlige Transparenz der Interpolation und Bewertung der Ergebnisse möglich. Der Anwender ist in der Wahl seiner Simulationswerkzeuge frei und kann diese spezifisch für den Anwendungsfall auswählen. Um die Mapping Software zu erstellen, greift man auf Elemente und Methoden der SCAI-Kopplungsbibliothek MpCCI zurück.

Lösung

Für den Anwender stellt sich der typische Ablauf und Datenfluss in zwei Schritten dar:

1. Die Umformsimulation schreibt für jedes umgeformte Bauteil separat Ergebnisse und Netze in Dateien, der Crashcode schreibt sein Netz ebenfalls in eine Datei.
2. Die Mapping Software liest für jedes Bauteil getrennt die Umformnetze, die Umformergebnisse und das Crashnetz ein. Die Netzdiskretisierungen werden zunächst in das gemeinsame Koordinatensystem transformiert und anschließend werden die physikalischen Größen auf das Crashnetz interpoliert. Die zu übertragenden Größen wie Blechdicke und plastische Vergleichsdehnung werden über Steuerparameter der Mapping Software ausgewählt. Für jedes Bauteil erzeugt der Ingenieur einen entsprechenden Datensatz, in dem die Ergebnisse der Umformrechnung als Initialwerte auf dem Gitter der Crashsimulation vorliegen.

Mit Hilfe eines Bewertungstools der Universität Stuttgart lassen sich die transformierten Umformdaten untersuchen.

Über eine Variation möglicher Interpolationsparameter und -verfahren kann der Anwender den Abbildungsvorgang so lange modifizieren, bis die gewünschte Ergebnisqualität erreicht wird.

Ergebnisse

Die Mapping Software unterstützt eine Reihe von ASCII-Ausgabeformaten unterschiedlicher Simulationscodes:

- Umformsimulation: LS-Dyna, AutoForm, PAM-Stamp sowie InDeed in Vorbereitung,
- Crashberechnung: RADIOSS, LS-Dyna, PAM-Crash sowie ABAQUS/Explicit in Vorbereitung.

SCAI validiert die Abbildungsverfahren an Hand von Testfällen der Projektpartner. Im Ergebnis zeigt sich eine hohe Qualität der Mapping Software, insbesondere auch in Fällen, in denen Umform- und Aufprallgeometrie deutliche Unterschiede aufweisen.

So sind zum Beispiel signifikante Unterschiede allein durch die nicht explizit berechneten Arbeitsschritte

- Simulation der Rückfederung,
- Abschneiden der Ankonstruktion,



Bild 2: Mappingergebnisse für einen Vorderrahmen:

Plastic-Strain-Verteilung auf unterschiedlichen Diskretisierungen (links), Dicken-Verteilung (rechts), (Quelle: VDA/FAT AK27)

- Abkanten und Aufstellen von Flanschen und
- Stanzen von Löchern fast immer gegeben (Bild 2).

Weiterhin können geringere Unterschiede dann auftreten, wenn nicht identische Konstruktionsstände in Umformung und Crash benutzt werden – kleinere Verschiebungen, etwa von Sicken, werden sinnvoll behandelt.

Andere Geometrieabweichungen sind zum Beispiel beim Rohrbiegen ohne Kern zu erwarten – auch hier liefert die Mapping-Software ein gutes Bild der Dicken und Vergleichsdehnungen (Bild 3).

Perspektive

Die Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen »Otto von Guericke« e.V. (AiF) fördert die Arbeiten an dem Mapping-Werkzeug im Projekt

»Untersuchungen zum Einsatz von Wärmebehandlungsverfahren zur gezielten Beeinflussung des Crashverhaltens hochfester Karosseriekomponenten«. Die Arbeiten werden gemeinsam mit der Forschungsvereinigung Automobiltechnik e.V. (FAT) im Verband der Automobilindustrie (VDA), Arbeitsgruppe AK27 »Umform-Crashkopplung« weitergeführt. Spezielle Erweiterungen im AiF-Projekt sind die Unterstützung von Simulationsverfahren zur lokalen Wärmebehandlung (Sysweld) sowie die durchgängige Übertragung tensorieller Spannungswerte in der gesamten Prozesskette.

Kontakt

Dipl.-Informatiker
Klaus Wolf
Tel.: 02241/14-2557
Fax.: 02241/14-2181
klaus.wolf@scai.fraunhofer.de

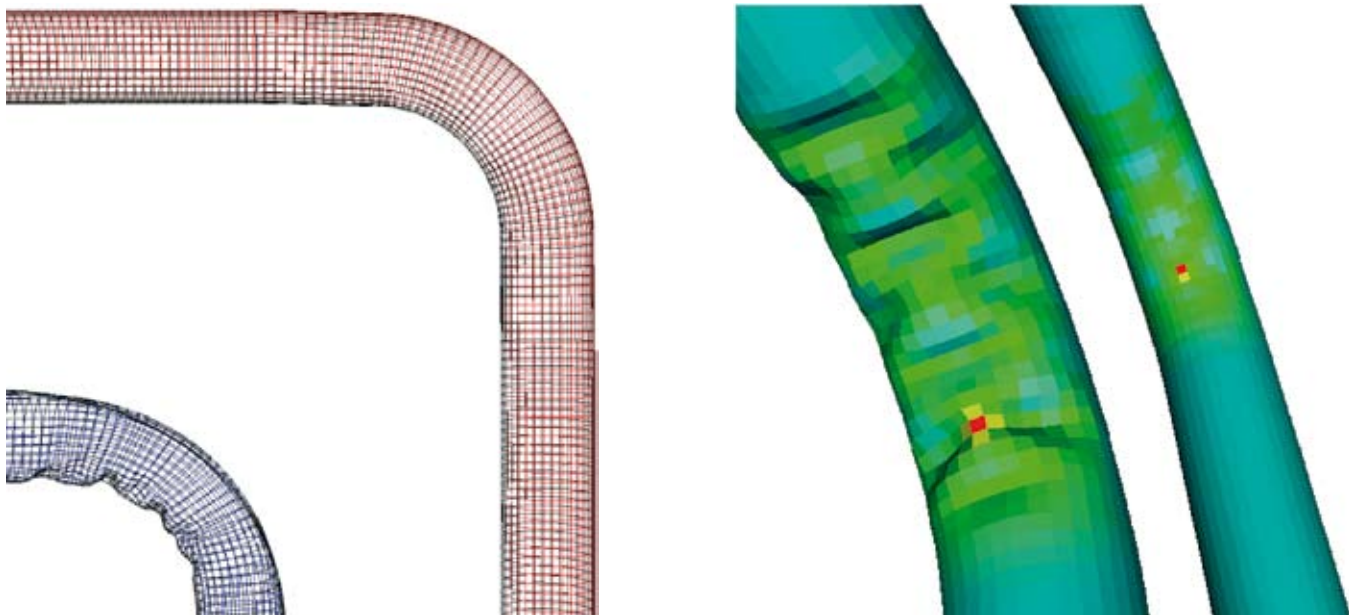
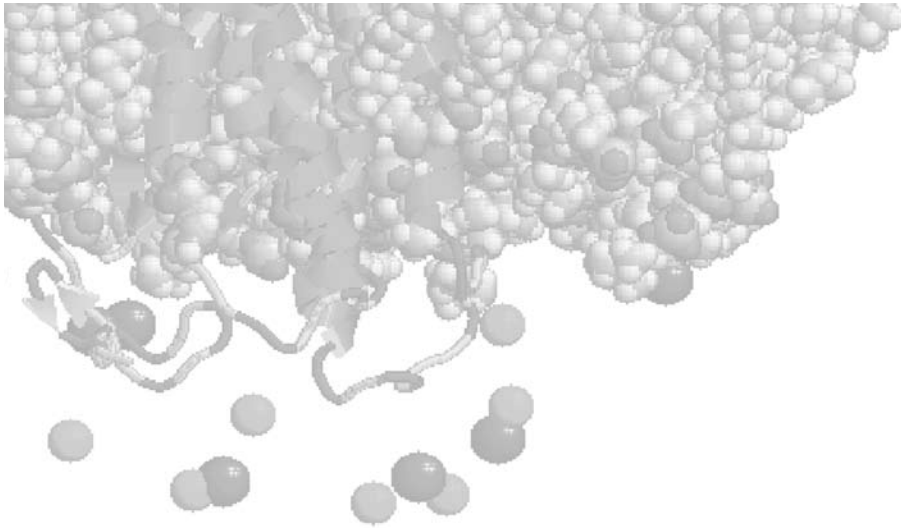


Bild 3: Gezogenes Rohr; stark unterschiedliche Geometrien beim Rohrbiegen ohne Kern (links), Plastic-Strain-Verteilung (rechts), (Quelle: Faurecia)

Molekulare Modellierung von Protein-Ligand-Komplexen



Aufgabe

Die Simulation biologisch relevanter Moleküle, vor allem von Protein-Komplexen, ist ein Thema der Arbeitsgruppe Computational Chemistry.

Proteine steuern und kontrollieren sämtliche Stoffwechselfvorgänge im Körper. Sie bilden dabei Komplexe mit anderen Molekülen, den so genannten Liganden. Das macht man sich zur Behandlung von Krankheiten zunutze, indem man Wirkstoffmoleküle verabreicht, die kritische Proteine zielgenau durch Komplexierung beeinflussen. Um bei der Suche nach neuen Wirkstoffen die Wechselwirkungen zwischen Ziel-Proteinen und Ligand-Kandidaten möglichst genau vorherzusagen, nutzt man Programme für Docking- und der Molekulardynamik (MD)-Rechnungen. Damit lassen sich die beiden Komponenten des Komplexes in atomarem Detail modellieren. Von den beweglichen Liganden wird für das Docking, also den Prozess des Einpassens des Ligand-Moleküls in die zerklüftete Oberfläche des Proteins, lediglich der prinzipielle Aufbau des Liganden als Input benötigt. Von dem Protein hingegen müssen zusätzlich die genauen Atompositionen bekannt sein. Sind sie es nicht, können MD-Simulationen helfen, geeignete Atompositionen zu erzeugen.

Docking-Programme nutzen meist approximative und einfach auszuwertende Bewertungsfunktionen für das Potenzial des Komplexes aus Protein und Ligand. Die Rechenzeiten sind daher in der Regel sehr kurz, sodass man mit diesem Verfahren eine große Menge von Liganden untersuchen kann (high throughput virtual screening). So lässt sich die Zahl der in Frage kommenden Kandidaten zwar wirkungsvoll reduzieren, jedoch sind oft noch weitere Schritte wie MD-Rechnungen für eine genauere Bewertung notwendig.

In der MD werden im Unterschied zum schnellen Docking die sehr aufwändig zu berechnenden, aber entsprechend genaueren Kraftfelder verwendet. Darüber hinaus führt eine zusätzliche Berücksichtigung der natürlichen Umgebung des Komplexes, die meist wässrige Lösung, zu weiter erhöhten Partikelzahlen mit noch größerem Rechenaufwand. Ziel der Arbeiten ist es, Lösungen für die inhaltlichen und technischen Probleme bei der Vorhersage der Eigenschaften von Protein-Ligand-Komplexen zu finden.

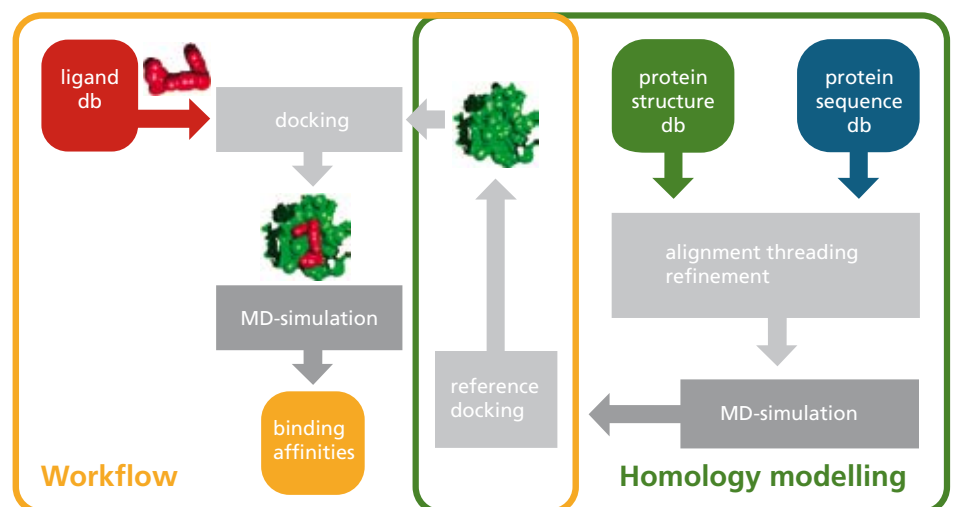


Bild 1: Zweistufiger Prozess zur Vorhersage von Bindestärken zwischen einem bestimmten Protein-Ligand-Paar über Docking und MD-Simulation (linke Seite). Die rechte Seite zeigt, wie Homologie-Modelle von Proteinen erzeugt werden können. Sie lassen sich zur Suche nach neuen Wirkstoffen im Docking-MD-Workflow einsetzen.

Lösung

SCAI hat einen Workflow entwickelt, der das Docking-Programm FlexX mit dem MD-Programmpaket Amber in einer Grid-Umgebung verknüpft. Diese Kette muss einerseits eine sehr wirksame Reduktion der in Frage kommenden Wirkstoffkandidaten ermöglichen, andererseits den unvermeidlichen Rechenaufwand möglichst effizient auf die vorhandenen Ressourcen verteilen. Beide Programme können über die Grid-Middleware UNICORE genutzt werden und sind flexibel miteinander kombinierbar. Dazu wurden verschiedene zusätzliche Tools und Filter zur automatischen Aufbereitung des Inputs für die Docking- und MD-Simulation entwickelt und getestet.

Der Workflow wird nun eingesetzt, um die Einflüsse unterschiedlicher Kombinationen von Parametern zu testen. An Referenz-Datensätzen werden die Parametereinstellungen identifiziert, die im Allgemeinen mit dem geringsten Zeitaufwand die genaueste Reproduktion experimenteller Messergebnisse erlauben. So konnte für einige Fälle eine verbesserte Wiedergabe des Bindungstrends mit gleichzeitig exakteren Platzierungen der Liganden innerhalb der Bindetasche erzielt werden, wie Bild 2 zeigt.

Mit dieser Kalibrierung lässt sich dann bereits vor der Synthese neuer Wirkstoffmoleküle ihr Potenzial für einen bestimmten Anwendungszweck möglichst zuverlässig abschätzen.

Der Docking/MD-Workflow, der bislang die Protein-Komponente als gegeben betrachtet, kann in Fällen, in denen die 3D-Struktur eines therapeutisch interessanten Proteins fehlt, um die Homologie-Modellierung von 3D-Protein-Strukturen erweitert werden, wie Bild 1 in einer Übersicht zeigt. Dazu wird aus der Sequenz des gewünschten Proteins durch Vergleich mit einem strukturell bekannten, möglichst ähnlichen, homologen Protein ein erstes Modell abgeleitet. Dieses Modell wird dann einer MD-Simulation unterzogen, die es dem Protein ermöglicht, seine natürliche, individuelle Konformation einzunehmen. Diese neue Konformation wird durch Docking einer Menge von Liganden mit bekannten Bindeeigenschaften überprüft, um sicherzustellen, dass eine Struktur erzeugt wurde, welche die experimentellen Befunde gut wiedergibt. Mit einer solchermaßen bestätigten Struktur ist nun die Suche nach tatsächlich neuen Wirkstoffen durch das oben beschriebene Virtual Screening möglich.

	test set 1: trypsin (9)	test set 2: HIV-PR (15)	test set 3: avidin (8)
after docking	0.97 Å / r = 0.858	5.91 Å / r = 0.757	1.23 Å / r = 0.777
after MD	1.12 Å / r = 0.832	2.38 Å / r = 0.876	0.81 Å / r = 0.924

Bild 2: Gegenüberstellung der Resultate nach dem Docking-Schritt beziehungsweise nach MD-Verfeinerung. Hinter dem jeweiligen Ziel-Enzym ist die Zahl der Liganden im Testset wieder gegeben. Die Genauigkeit der Platzierungen wird als durchschnittliche Abweichung der Atome von ihren Referenzpositionen in Å bestimmt, der Wert sollte so klein wie möglich sein. Die Qualität der berechneten Bindestärken wird nach ihrer Korrelation mit experimentellen Werten beurteilt, im Idealfall ist $r = 1$. Die Tabelle zeigt, dass die Ergebnisse je nach Test-System mindestens die Qualität erhalten, sie aber auch deutlich verbessern können.

Perspektiven

In einer Fallstudie zur Homologie-Modellierung werden große Systeme, die nicht nur das Protein selbst, hier einen G-Protein gekoppelten Rezeptor, sondern auch seine natürliche Umgebung, das heißt einen Ausschnitt einer Zellmembran und wässrige Lösung umfassen, simuliert. Bild 3 zeigt den Schnappschuss eines solchen Systems aus circa 44 000 Atomen. Zu diesem Thema ist mit dem experimentell ausgerichteten pharmazeutischen Institut der Universität Bonn ein Projektantrag bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft geplant.

Parallel dazu begleitet die Arbeitsgruppe die Modellierungsarbeiten für den Data Challenge »Wide In Silico Docking On Malaria« (WISDOM) im Projekt EGEE (Enabling Grids for E-science) der Europäischen Kommission. Dabei arbeitet die Bioinformatik-Abteilung des SCAI mit französischen Partnern an der Suche nach neuen Wirkstoffen gegen Malaria. Für WISDOM wurden parallel mit zwei Docking-Programmen eine halbe und eine Million Liganden unter insgesamt 52 verschiedenen Szenarios in ein Schlüsselenzym des Malaria-Erregers Plasmodium falciparum platziert und bewertet. Diese Aktivitäten sollen im Folgeprojekt EGEE-II fortgesetzt werden.

Darüber hinaus werden Partner für Forschungsaufträge und Industrieprojekte gesucht, die eine unmittelbare Nutzung der vorhandenen Expertise oder auch mittel- bis langfristig eine Erweiterung um neue Anwendungsgebiete mit dem Schwerpunkt MD-Simulation erlauben.

Kontakt

Dr. Astrid Maaß

Tel.: 02241 / 14 - 2481

Fax.: 02241 / 14 - 2181

astrid.maass@scai.fraunhofer.de

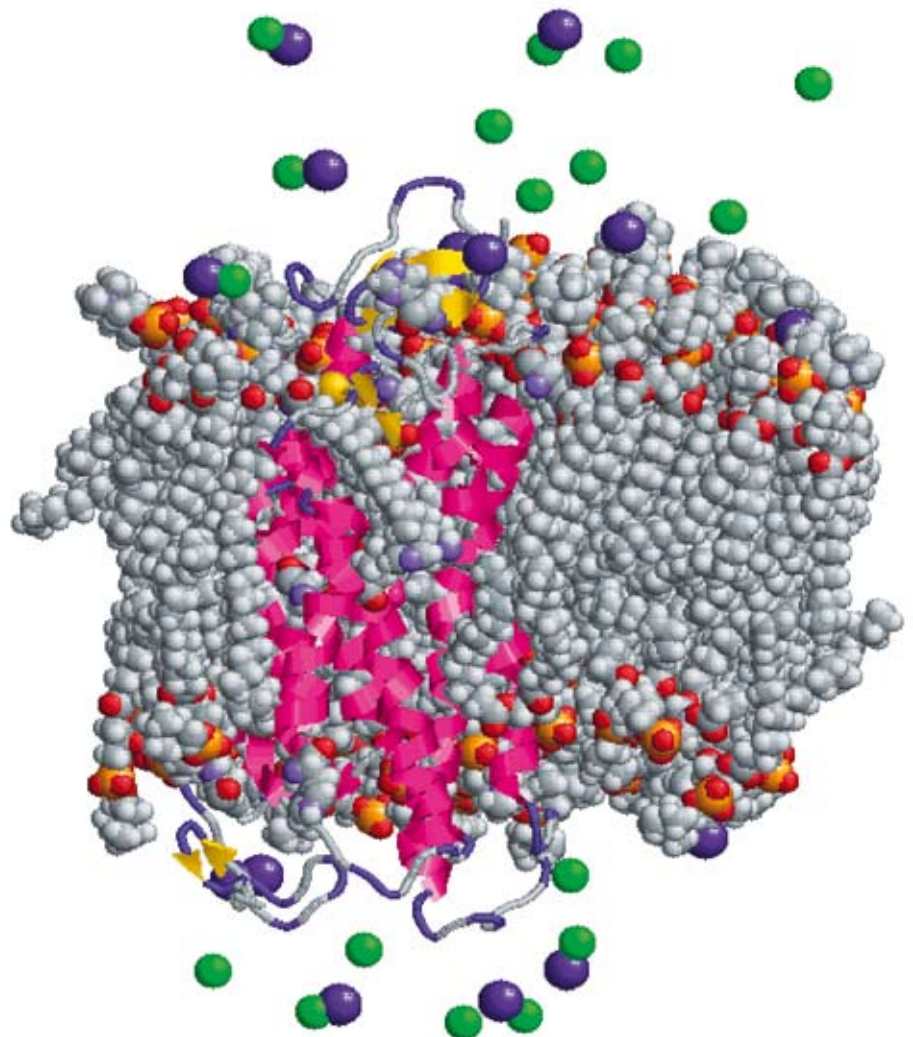
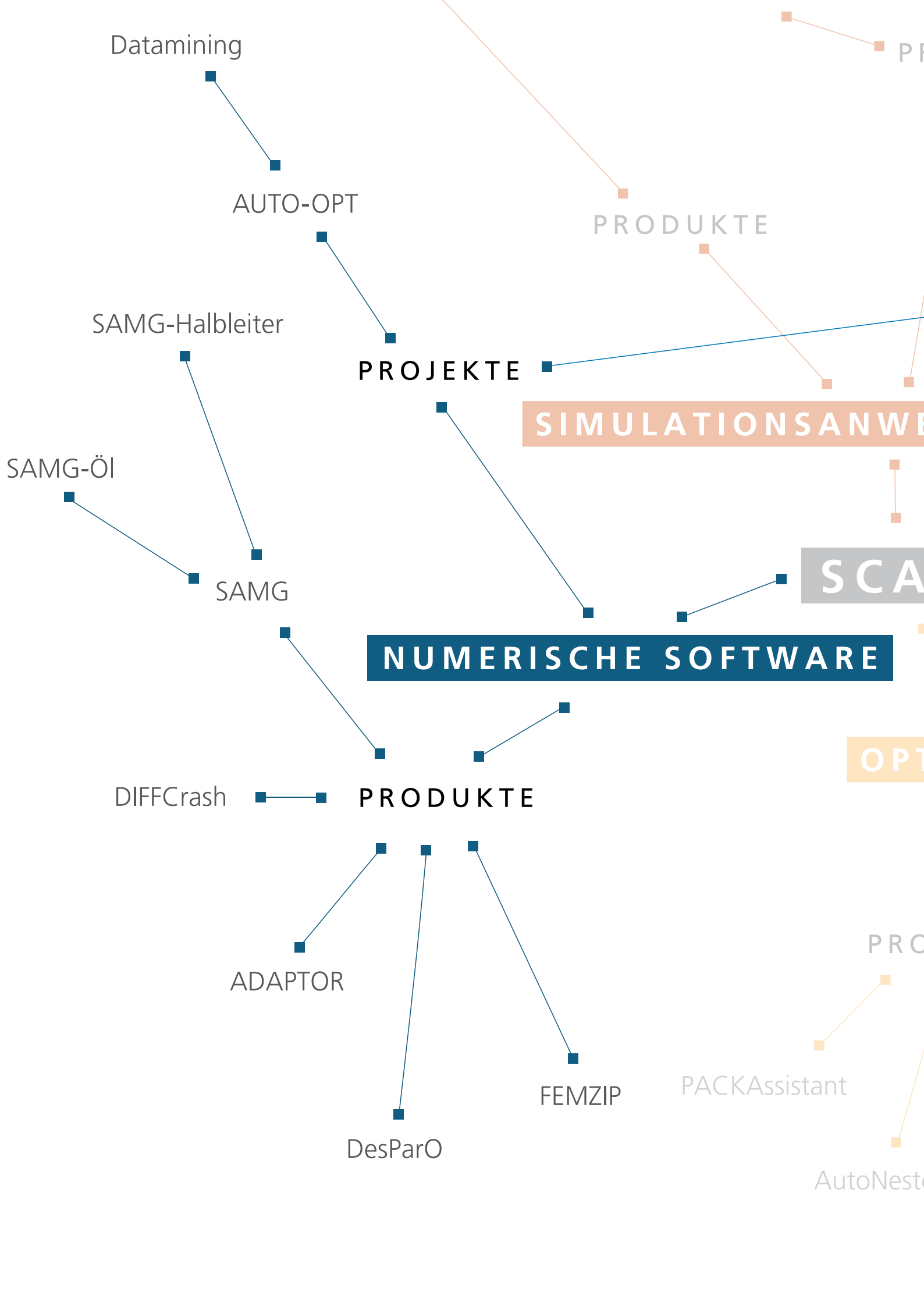
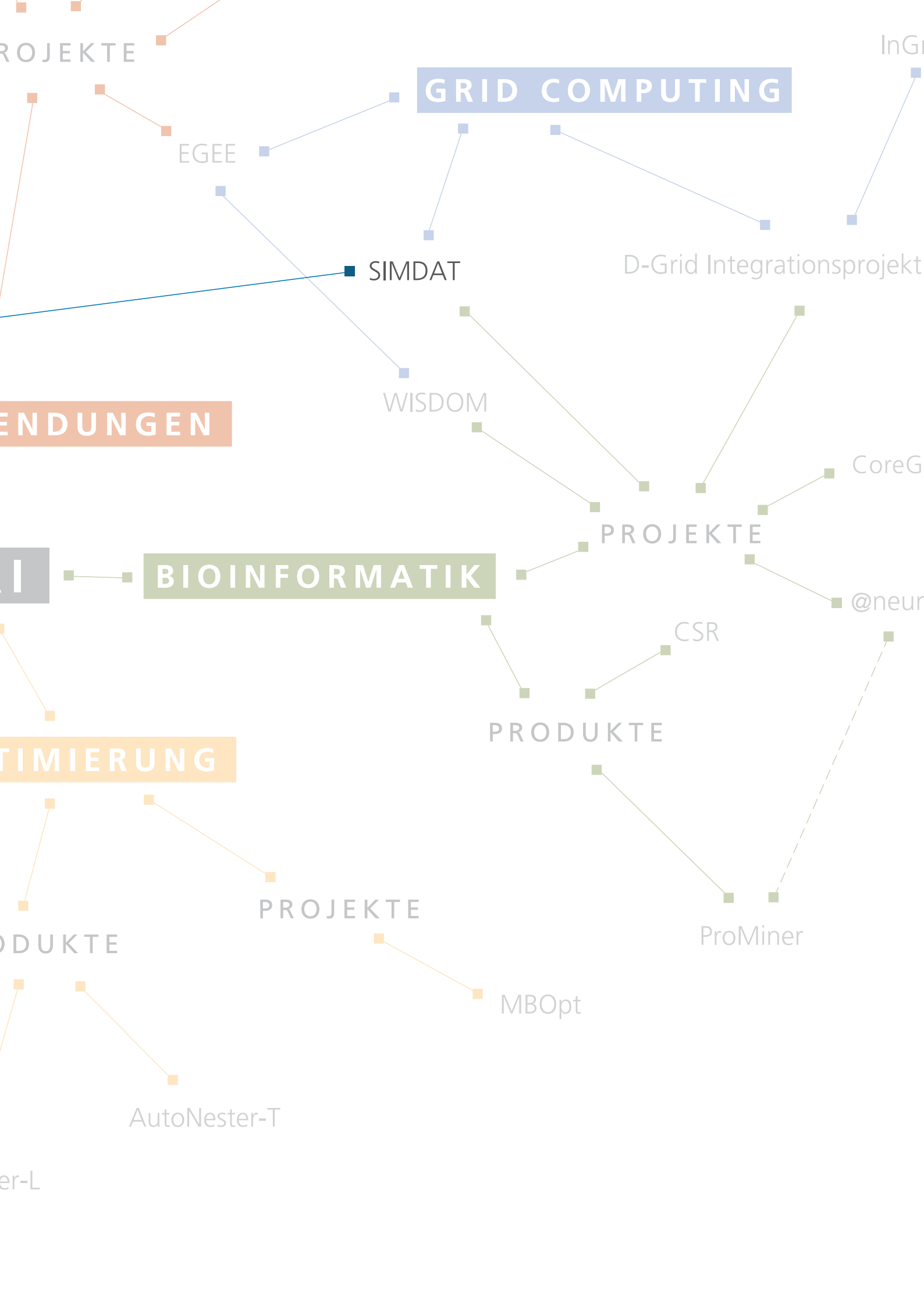


Bild 3: Der einzige bislang kristallisierbare Vertreter der G-Protein gekoppelten Rezeptoren, Rhodopsin, in einer Zellmembran umgeben von Wasser nach einigen Picosekunden einer MD-Simulation. Das Protein ist als langer Faden dargestellt, die helikalen Abschnitte (Magenta) sind breit hervorgehoben. Wasser-Moleküle werden nicht gezeigt, nur die darin gelösten Natrium- (blau) und Chlorid-Ionen (grün) verdeutlichen die Dicke der Wasserschicht.





GRID COMPUTING

EGEE

SIMDAT

WISDOM

D-Grid Integrationsprojekt

ANWENDUNGEN

BIOINFORMATIK

PROJEKTE

CoreG

@neur

CSR

PRODUKTE

OPTIMIERUNG

PROJEKTE

ProMiner

MBOpt

PRODUKTE

AutoNester-T

er-L

Situation

Der Einsatz und die Bedeutung numerischer Simulation zur virtuellen Produktentwicklung und zum besseren Verständnis von Produkteigenschaften wachsen ständig. Die Verkürzung von Produktzyklen – zum Beispiel in der Automobilindustrie – ist ohne den verstärkten Einsatz numerischer Simulation nicht möglich. Bei der Nutzung der Ölreserven dieser Welt kann nur numerische Simulation Einsicht in die Abläufe im Innern eines Ölfeldes liefern und die Analyse verschiedener Explorationsmethoden die bestmögliche Förderung garantieren.

In der Regel werden für industrielle Simulationen kommerzielle Software-Pakete eingesetzt. Vor dem Hintergrund

- eines verstärkten Einsatzes solcher Pakete in numerischen Optimierungsprozessen,
- einer wachsenden Komplexität und Detailgenauigkeit der zugrunde liegenden Modelle und
- des Wunsches, Simulationen interaktiv durchführen zu können,

kommen derartige Pakete oft an ihre Grenzen. So müssen zwingend die typischerweise sehr hohen Rechenzeiten einzelner Simulationsläufe stark reduziert werden. Darüber hinaus fehlen verschiedene Werkzeuge zur gezielten Analyse und einer weitergehenden Verwertung berechneter Daten.

- Um etwa Designentscheidungen bereits vor dem Bau des ersten realen Prototypen treffen zu können, muss die Vorhersagegenauigkeit von Simulationsergebnissen validiert werden. Diese Problematik verschärft sich mit wachsender Nichtlinearität der zu simulierenden Prozesse, wie etwa bei Crash-Simulationen.
- Integrierte Simulationsumgebungen erlauben es heute, Simulationsergebnisse verschiedener Produktentwicklungen konsistent abzulegen. Dataming-Algorithmen könnten hier helfen, Designprozesse deutlich zu beschleunigen.

Lösungen

Der Schwerpunkt des Geschäftsfeldes liegt auf Verfahrens- und Programmentwicklungen, die helfen, industrielle Simulationssoftware effizienter nutzbar zu machen und neue Anwendungen zu erschließen. Ein großer Teil der in folgenden Bereichen entwickelten Software ist das unmittelbare Resultat gemeinsamer Projekte mit industriellen Anwendern wie etwa des großen Verbundprojektes AUTO-OPT, das im Jahre 2005 erfolgreich abgeschlossen wurde.

• Schnelle Lösertechnologie

Bei komplexen industriellen Simulationen geht es letztlich um die Lösung großer Gleichungssysteme mit oft vielen Millionen Unbekannten. Dabei entscheidet die Geschwindigkeit dieses Lösungsprozesses ganz wesentlich mit über die Praktikabilität der Gesamtsimulation. SCAI erweitert systematisch die Programmbibliothek SAMG, deren hocheffiziente, skalierbare Lösermodule bereits in viele kommerzielle Softwareprodukte integriert sind.

• Analyse und Optimierung numerischer Programme

Parallelisierung und Cache-Optimierung von Simulationsanwendungen bieten zwei wichtige Möglichkeiten zu einer wesentlichen Reduzierung inakzeptabler Ausführungszeiten. SCAI entwickelt Werkzeuge (wie etwa das Übersetzungssystem ADAPTOR, siehe Seite 51), die derartige Prozesse unterstützen. Mit ihrer Hilfe können Fortran und C-Programme analysiert und automatisch transformiert werden.

• Analyse von Simulationsergebnissen

Verzweigungen und daraus resultierendes instabiles Verhalten von Kenngrößen ist eine typische Eigenschaft von Crash-Simulationen. Werkzeuge wie unser Tool DIFF-CRASH erlauben es, kritische Instabilitäten aufzudecken, sie zu interpretieren und mit Hilfe spezieller Methoden gezielt die Ursachen in einem konkreten Modellentwurf aufzufinden.

• Parameteroptimierung

Prototypen neuer Produkte werden verstärkt am Computer konzipiert, weiterentwickelt und getestet, bevor ein erster realer Prototyp gebaut wird. Unsere Toolbox DesParO hilft dem Anwender bei der rechnergestützten Optimierung derartiger Prozesse. DesParO enthält insbesondere solche Optimierungsverfahren, die auch noch im Zusammenhang mit hochkomplexen, sehr rechenzeitintensiven Simulationsprogrammen (z.B. aus den Bereichen Umformtechnik und Crash) einsetzbar sind, wie Kriging-Ersatzfunktionen.

• Datenkompression

Die numerische Simulation dynamischer Prozesse erzeugt erhebliche Mengen an Ergebnisdaten. Bei der Speicherung der Daten, kommen in manchen Anwendungsbereichen schnell mehrere Tera- oder gar PetaBytes zusammen. SCAI entwickelt eine Toolbox zur effizienten Kompression numerischer Simulationsdaten auf strukturierten und unstrukturierten Gittern.

- **Datamining auf Simulationsdaten**

Ingenieure, die etwa mit der Entwicklung eines neuen Fahrzeugs betraut sind, könnten maßgeblich davon profitieren, wenn die aus Vorgängerprojekten vorliegenden großen Mengen berechneter und gespeicherter Simulationsdaten effizient wiederverwertet werden könnten. In SCAI wird der Einsatz von Datamining-Techniken zur softwaremäßigen Unterstützung bei der Analyse und Auswertung vorhandener Datenbestände im Sinne eines automatisierten Erkenntnisgewinns untersucht und in entsprechende Software-Werkzeuge umgesetzt.

Kontakt

Dipl.-Mathematiker
Clemens-August Thole
Abteilungsleiter Numerische Software
Tel.: 02241 / 14 - 2739
Fax.: 02241 / 14 - 2102
clemens-august.thole@scai.fraunhofer.de

Dr. Klaus Stüben
stellvertretender Abteilungsleiter
Tel.: 02241 / 14 - 2749
Fax.: 02241 / 14 - 2102
klaus.stueben@scai.fraunhofer.de

Perspektiven und Potenziale

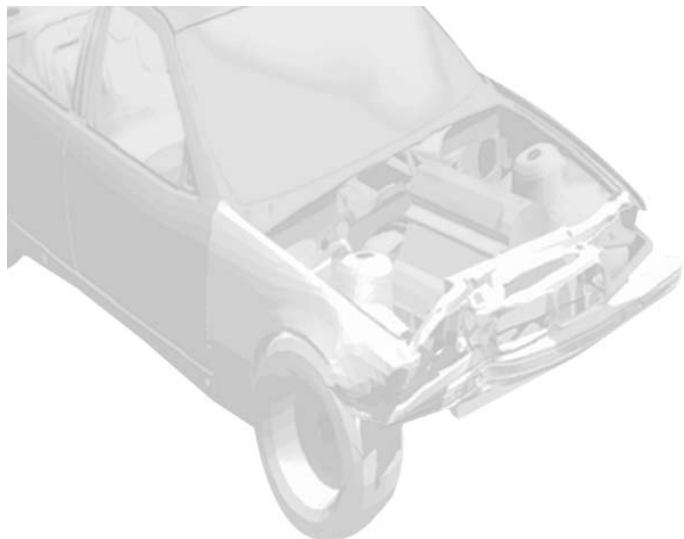
Strategisches Ziel der Arbeiten ist es, ganz wesentlich zum Zukunftsthema »Interaktive Simulation« beizutragen, das heißt, Modellvarianten werden auf Knopfdruck erstellt und in Echtzeit bewertet: Noch während der Radius der Kerbung einer Kurbelwelle verändert wird, sieht man den Einfluss der Änderung auf die Spannungsverteilung. Nach wie vor wird die Kreativität des Ingenieurs die Qualität des Produktes bestimmen, allerdings wird er seine Kreativität sehr viel zielgerichteter und schneller einbringen können.

Bereits heute arbeiten wir im Geschäftsfeld – alleine oder zusammen mit industriellen Kooperationspartnern – an einigen der grundlegenden Technologien zur Erreichung des globalen Ziels. Zusammengefasst sind dies:

- Beschleunigung numerischer Simulation durch skalierbare Lösungsverfahren, Performance-Optimierung sowie Parallelisierung,
- Spezielle Interpolationstechniken zur schnellen Berechnung grober Lösungsapproximationen und guter Startlösungen,
- Datenkompression zur effizienten Verwaltung großer Datensätze (Speicherung und Zugriff) bereits berechneter Lösungen,
- Datamining zum schnellen Auffinden vergleichbarer Datensätze und
- Variantenerzeugung durch Parametervariation oder den Aufbau parametrisierter Modelle.

Numerische Optimierung gekoppelt mit Modellreduktionsverfahren wird die Feinabstimmung eines Entwurfs übernehmen und so den Entwurfsprozess weiter beschleunigen.

DIFF-CRASH – Stabilitätsuntersuchungen von Aufprall-Simulationen



Aufgabe

Um die Sicherheit von Automobilentwürfen zu beurteilen, setzt man heute – neben realen Crash-Tests – vorwiegend auf Simulationen des Aufprall-Verhaltens. Genauigkeit und Zuverlässigkeit der Simulationsergebnisse sind daher unverzichtbare Forderungen. Ein Problem besteht allerdings darin, dass Produktionstoleranzen – zum Beispiel Variationen von Blechdicken – unvermeidbar sind, was wiederum erheblichen Einfluss auf die Simulationsergebnisse haben kann. So können etwa Beuleffekte sehr empfindlich von derartigen Einflussgrößen abhängen, und selbst geringste Änderungen am Modell – auch wenn diese nur durch Rundungsfehler bedingt sind – können substantielle Variationen («Streuungen») der funktionalen Kenngrößen bewirken.

Bild 1 zeigt beispielhaft den Einfluss einer nur durch Parallelverarbeitung verursachten Streuung. Dargestellt sind

die maximale und die durchschnittliche Abweichung der Positionen verschiedener Knoten in unterschiedlichen Simulationsläufen für ein realistisches, von BMW bereitgestelltes Crash-Modell. In diesem konkreten Fall konnte ein Unterschied von bis zu 14 Zentimetern in den Knotenpositionen beobachtet werden!

Lösung

Vor diesem Hintergrund hat SCAI das Programm DIFF-CRASH entwickelt. Die Software vergleicht Analysen mehrerer Simulationsläufe durch Auswertung geometrischer Informationen. Dabei unterstützt es verschiedene Analysen zur Bewertung stochastischer Streuungen.

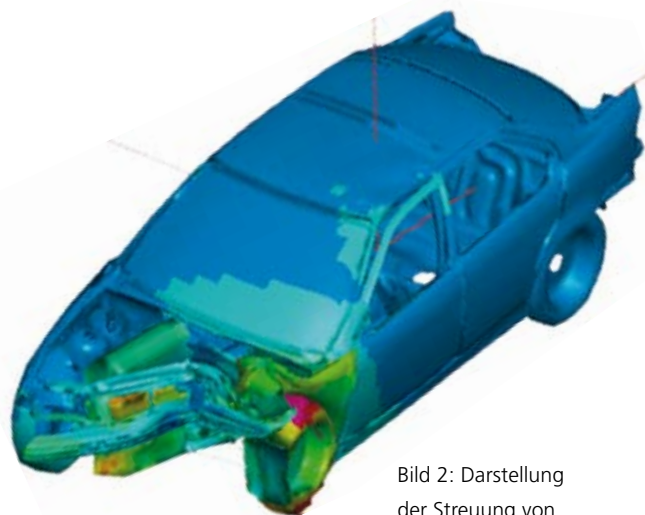
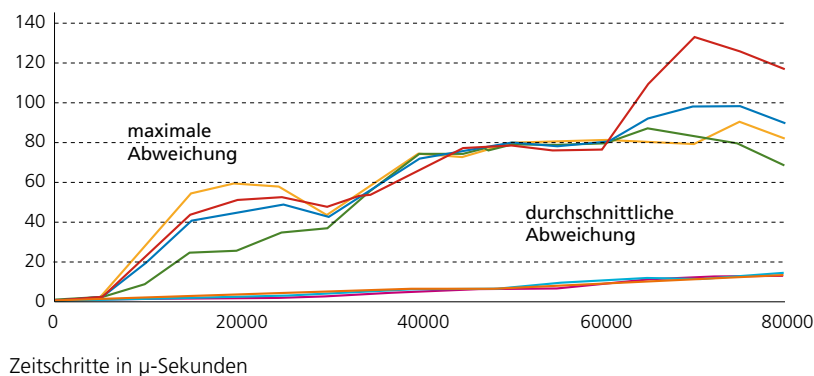


Bild 2: Darstellung der Streuung von Knotenpositionen in unterschiedlichen Simulationsläufen, berechnet für ein BMW-Modell.

Bild 1: Abweichung der Knotenpositionen bei wiederholten Aufprall-Simulationen, berechnet auf 32 Prozessoren.

DIFF-CRASH erzeugt eine Datei von Simulationsergebnissen, erweitert um die berechneten Analyse-Werte. Diese Datei kann man anschließend mit Standard-Grafikprogrammen visualisieren und interpretieren. So lässt sich zum Beispiel die Streuung von Knotenkoordinaten an verschiedenen Orten im simulierten Fahrzeugmodell vergleichen (Bild 2), die Entwicklung der Streuung analysieren und unterschiedliche Verzweigungsmuster derjenigen Bauteile finden, die für die Streuung ursächlich sind.

Hierdurch erhält der Ingenieur konkrete Hinweise auf die Stabilität eines Modells und der entsprechenden Simulation und somit wertvolle Hilfen zu Verbesserungen auf dem Weg zu einem stabileren Simulationsmodell.

Ergebnisse

Im Projekt AUTO-OPT (Seite 41) hat das Fraunhofer SCAI die Analysemöglichkeiten von DIFF-CRASH erweitert. Der Schwerpunkt lag auf der Entwicklung und Realisierung eines Funktionals, das die Wertestreuung an unterschiedlichen Stellen im Modell vergleicht und Ähnlichkeiten misst. Eine typische Situation ist in Bild 3 skizziert, wo die Positionen zweier Knoten, so wie sie sich aus sechs verschiedenen Simulationsläufen ergeben, in Form von zwei Knotenwolken dargestellt sind. Während sich die konkrete Lage oder Distanz der zu verschiedenen Simulationsläufen gehörenden Positionen stark unterscheiden, bleibt die grundsätzliche Position der beiden Knoten zueinander aber bei jedem einzelnen Simulationslauf unverändert. Bei einer derartigen Struktur geht man davon aus, dass die Streuung an den beiden Modellknoten die gleiche Ursache hat. SCAI hat ein für solche Fälle entwickeltes Ähnlichkeitsfunktional patentiert.

Die Bedeutung von DIFF-CRASH für die Industrie hat die Volkswagen AG demonstriert (Dr. Roel Kersten, Abteilung »Research and Development«, VW): Mit Hilfe von DIFF-CRASH konnte die Ursache einer beobachteten Streuung aufgedeckt

und durch eine gezielte Modelländerung deutlich reduziert werden.

Perspektive

Obwohl vorwiegend im Kontext von Crash-Simulationen entwickelt, sind die Analysemöglichkeiten von DIFF-CRASH nicht darauf beschränkt. So sind weitere Einsatzgebiete wie etwa mechanische Umformsimulationen oder numerische Strömungssimulationen grundsätzlich von Interesse und eignen sich für Stabilitätsuntersuchungen mit DIFF-CRASH.

Partner

- Volkswagen AG, Wolfsburg;
- ESI GmbH, Eschborn;
- BMW AG, München;
- JRI, Tokyo, Japan.

Kontakt

Dipl.-Informatiker
Helmut Schwamborn
Tel.: 02241 / 14 - 2312
Fax.: 02241 / 14 - 2102
helmut.schwamborn@scai.fraunhofer.de

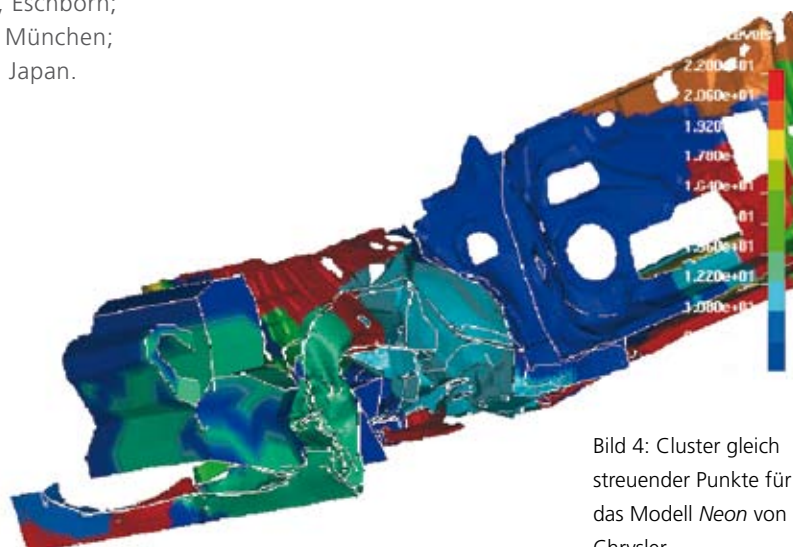


Bild 4: Cluster gleich streuender Punkte für das Modell Neon von Chrysler

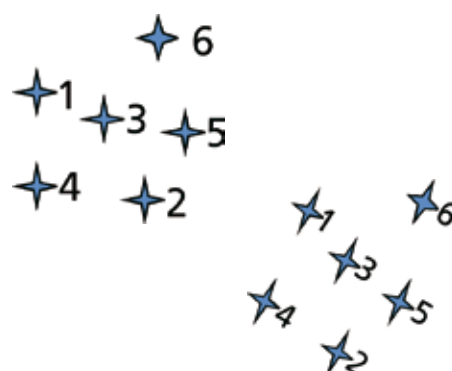
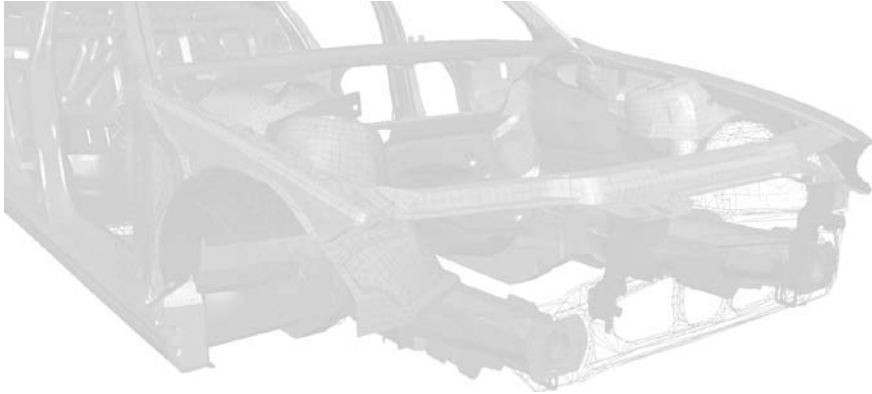


Bild 3: Streumuster: Positionen zweier Gitterpunkte in sechs unterschiedlichen Simulationsläufen

AUTO-OPT – Automobilentwurf durch Simulation und Optimierung



Aufgabe

Im Verbundprojekt AUTO-OPT haben elf Partner aus der Automobilentwicklung Softwarewerkzeuge zur interaktiven Optimierung und Simulation verbessert oder neu entwickelt. Die Projektleitung lag beim Fraunhofer-Institut SCAI. Die entstandenen Softwarewerkzeuge haben die Fahrzeugentwicklung auf den Gebieten

- Simulation in der Konzeptphase,
- Datamining auf Finite-Elemente-Daten sowie
- Optimierung für komplexe Probleme stark vorangetrieben (Bild 1).

Anwender, Automobilhersteller, Softwarehäuser und Forschungseinrichtungen haben im Projekt gemeinsam neue Technologien entwickelt und zur produktiven Anwendung gebracht.

Ergebnisse

Ausgewählte Projektergebnisse von AUTO-OPT sind:

- Das Konzept eines Fahrzeugs bestimmt wesentlich seine Kosten. Die entwickelten Software-Lösungen machen es unter anderem möglich, Aufprall- und Steifigkeitsverhalten in sehr frühen Projektphasen mit Methoden der numerischen Simulation zu untersuchen. Der Automobilhersteller erlangt so Erkenntnisse über Konstruktionsprobleme und eventuelle

Sicherheitsrisiken eines geplanten Fahrzeugs. Auf diesem Weg kann er Varianten durchspielen und Kosten abschätzen.

- Ein Beispiel aus der Konstruktion verdeutlicht den Bedarf an anspruchsvoller Optimierung in der Fahrzeugentwicklung: Fußgängerschutz ist für die neuen Fahrzeuggenerationen ein Muss. Das bedeutet beispielsweise, dass die Motorhaube weich sein sollte, um Kopfverletzungen von Fußgängern bei Unfällen zu vermeiden. Eine weiche Motorhaube verbiegt sich jedoch



Bild 1: Im Projekt AUTO-OPT haben die Partner neue Simulations- und Optimierungsmethoden für die unterschiedlichen Phasen des Fahrzeugentwurfs entwickelt und erprobt.

durch den Fahrtwind erheblich. Die Ingenieure müssen nach konstruktiven Lösungen suchen. Die entwickelten Software-Werkzeuge beziehen die zugrunde liegenden physikalischen Phänomene in die Berechnungen mit ein und ermöglichen so eine detaillierte Simulation und Optimierung.

- Eine neuartige Optimierungssoftware schlägt eine optimierte Form von Bauteilen vor. Durch automatische Formveränderung lassen sich mechanische Eigenschaften von Bauteilen oder Gesamtfahrzeugen verbessern. Gleichzeitig berücksichtigt die Software weitere Anforderungen bei der Berechnung, etwa an die gewünschte Stabilität oder den vorhandenen Einbauraum. So lässt sich Material einsparen, was die Kosten verringert, das Gewicht reduziert und den Treibstoffverbrauch senkt.

Perspektiven

Detailtreue in der Simulation erhöht die Berechnungsdauer oft erheblich. Mit verbesserten Verfahren lassen sich nun große Leistungssteigerungen erreichen. Folgende Softwarewerkzeuge zur Simulation und Optimierung wurden im Projekt neu oder weiter entwickelt:

- Optimierungstoolbox (DesParO),
- Stabilitätsanalyse für Finite-Element-Simulationen (DIFF-CRASH),
- Kompression von Daten aus Finite-Elemente-Simulationen (FEMZIP),
- Optimierter Beschnitt (InproTrim),
- Rückfederungskompensation (MASHAL),
- Kopplung von Umform- und Crashanalyse (MpCCI),
- Berechnungen nach der Methode der finiten Elemente (PERMAS),
- Dataming-Umgebung für Finite-Elemente-Simulationen (Dataming Framework des SCAI),

- Effizientes Preprocessing unabhängig voneinander vernetzter Finite-Elemente-Modelle (scFEMod),
- Parametrische Modelle für die Konzeptphase (SFE CONCEPT),
- Simulationsumgebung (TENT).

Diese Softwarewerkzeuge sind zum großen Teil bereits im produktiven Einsatz und werden mit Erfolg angewendet. Zwar gehören virtuelle Prototypen im Automobilbau längst zum Alltag der Entwicklungsingenieure, gleichzeitig steigen aber auch die Anforderungen an die Software zur Simulation und Produktoptimierung. Die kontinuierliche Weiterentwicklung der Software ist notwendig.

Aufgrund der erfolgreichen Zusammenarbeit im Projekt streben die Partner ein Anschlußprojekt zur Forschung in diesem Anwendungsgebiet an.

Partner

Automobilkonzerne:

- AUDI, Ingolstadt;
- BMW, München;
- DaimlerChrysler, Sindelfingen, Stuttgart;
- Karmann, Osnabrück;
- Porsche, Weissach.

Softwarehäuser:

- Intes, Stuttgart;
- Inpro, Berlin;
- SFE, Berlin.

Forschungseinrichtungen:

- Institut für Visualisierung und Interaktive Systeme (Universität Stuttgart);
- Simulations- und Softwaretechnik, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Köln-Porz.

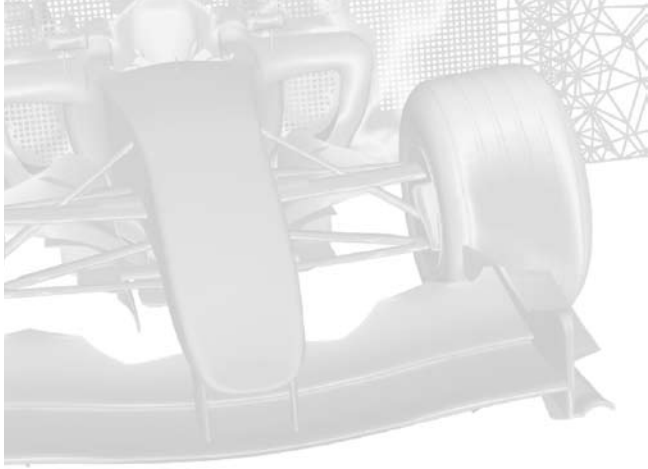
Projektförderung

Die Laufzeit von AUTO-OPT betrug drei Jahre. Der Gesamtumfang des vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Projekts belief sich auf sieben Millionen Euro.

Kontakt

Dipl.-Mathematiker
Clemens-August Thole
Tel.: 02241 / 14 - 2739
Fax.: 02241 / 14 - 2102
clemens-august.thole@scai.fraunhofer.de

SAMG – Skalierbare Lösungsverfahren



Aufgabe

In vielen Anwendungen der numerischen Simulation, etwa der Strömungs- und Strukturmechanik, werden die Strukturen und Geometrien durch komplexe Gitter diskretisiert. Je feiner die Auflösung eines solchen Gitters, desto höher ist im Allgemeinen die Genauigkeit der Simulation – desto größer sind aber auch die aus dem Diskretisierungsprozess resultierenden numerisch zu lösenden Gleichungssysteme. Bei den heute verlangten Simulationengenauigkeiten ist die Geschwindigkeit, mit der diese Gleichungssysteme gelöst werden können, eine kritische Größe. Systeme mit vielen Millionen Unbekannten sind keine Seltenheit und die Tendenz ist steigend (Bild 1 und 2). Klassische numerische Lösungsverfahren sind nicht mehr in der Lage, Gleichungssysteme dieser Größe mit ökonomisch vertretbarem Zeitaufwand zu lösen.

Lösung

Zur effizienten Lösung großer Gleichungssysteme benötigt man zwingend »skalierbare« Löser, das heißt Löser, deren Rechenaufwand mit der Problemgröße nur linear ansteigt. Standardlöser (etwa das Verfahren der konjugierten Gradienten, kombiniert mit einem klassischen Vorkonditionierer) sind nicht skalierbar: Je größer ein gegebenes Gleichungssystem, desto größer der relative Rechenzeitgewinn eines skalierbaren Löser gegenüber einem Standardlöser (Bild 3).

Bild 1: Vernetzung des Modells eines Rennwagens der Formel 1: Die Bild zeigt eine einzelne Gitterschicht. Das gesamte Gitter besteht aus etwa 100 Millionen Zellen und ist in Oberflächennähe extrem fein (siehe Bild 2).

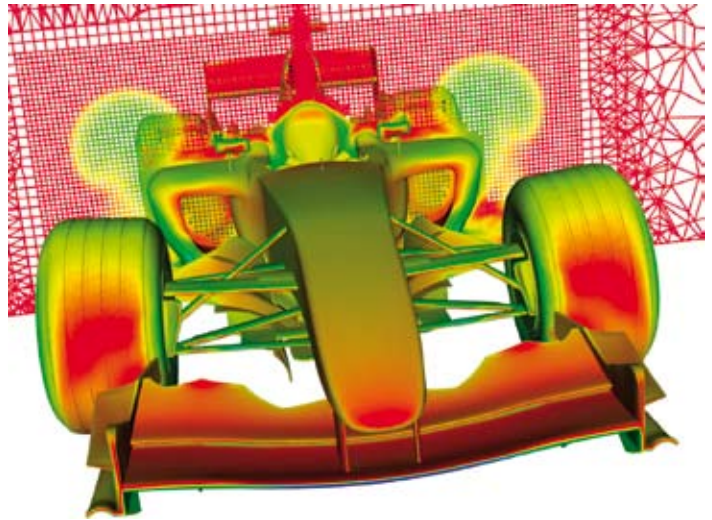
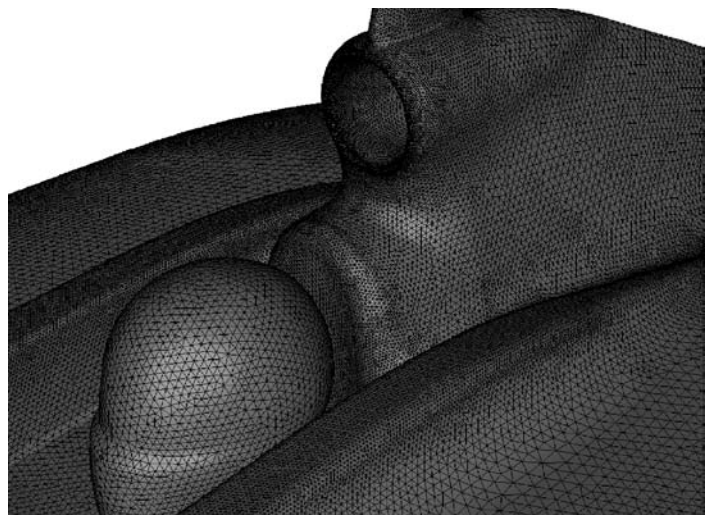


Bild 2: Oberflächen-gitter in der Umgebung des Fahrers (Bilder mit Dank an Sauber-Petronas und Fluent)



Als besonders Erfolg versprechend für die große Klasse »elliptischer« Anwendungen hat sich die am Institut SCAI mitentwickelte algebraische Mehrgittermethodik (AMG) erwiesen: Um ein gegebenes Problem in optimaler Geschwindigkeit zu lösen, kombinieren algebraische Mehrgitterverfahren die numerische Information einer Hierarchie immer größerer Gleichungssysteme. Der zugrunde liegende Vergrößerungsprozess ist automatisch und Teil des Algorithmus.

Auf AMG beruhende Verfahren sind aus der Idee heraus entstanden, klassische »geometrische« Mehrgitterverfahren so zu verallgemeinern, dass sie sich auf lineare Gleichungssysteme anwenden lassen, ohne geometrische Eigenschaften direkt zu benutzen. Algebraische Mehrgitterverfahren sind daher besonders zur Lösung elliptischer partieller Differentialgleichungen auf unstrukturierten zwei- oder dreidimensionalen Gittern geeignet, oder aber zur Lösung linearer Gleichungssysteme, die zwar nicht auf entsprechende Differentialgleichungen zurückgehen, aber durch strukturell ähnliche Eigenschaften charakterisiert sind.

Ergebnis

SCAI entwickelt eine Bibliothek AMG-basierter Unterroutinen zum hocheffizienten Lösen großer linearer Gleichungssysteme mit dünnbesetzten Matrizen, wie sie im numerischen Kern der meisten Simulationssoftwarepakete auftreten. Diese Bibliothek wird unter dem Namen SAMG (»Systems Algebraic Multigrid«) bereits seit einigen Jahren vermarktet und kontinuierlich weiter entwickelt. Verglichen mit klassischen Verfahren kann, je nach Anwendungsbereich und Problemgröße, der Rechenzeitgewinn durch den Einsatz von SAMG durchaus im Bereich von einer bis zwei Zehnerpotenzen liegen.

Dabei lässt sich SAMG genauso einfach in ein existierendes Simulationspaket integrieren wie ein klassisches Verfahren. Die Hauptzielgruppe von SAMG bilden Entwickler industrieller numerischer Simulationssoftware in den verschiedenen Anwendungsdisziplinen.

SAMG ist auch für Parallelrechner erhältlich und im Prinzip auf jede Partitionierung des Rechengitters anwendbar (Bild 4). So lange die Anzahl der Gitterzellen pro Prozess groß genug ist, bietet auch das parallele SAMG eine außergewöhnliche Leistungsfähigkeit.

Perspektiven

In vielen Anwendungsbereichen wie Strömungs- und Strukturmechanik, Reservoirsimulation (Öl und Grundwasser), sowie Gießen und Formen von Kunststoffen und Metallen sind AMG-Verfahren dabei, klassische Verfahren zu verdrängen. Obwohl hier noch nicht alle Diskretisierungsansätze einer optimalen Behandlung durch SAMG zugänglich sind, ist SAMG bereits als numerischer Kernlöser in vielen kommerziellen Simulationsprogrammen vorhanden. Vor allem voll-implizite Diskretisierungsansätze zur Lösung von Systemen elliptischer partieller Differentialgleichungen führen noch auf verschiedene Schwierigkeiten und offene wissenschaftliche Fragen. In Zusammenarbeit mit mehreren Softwareentwicklern versucht SCAI, hier weitere Durchbrüche zu erzielen.

In verschiedenen anderen Anwendungsfeldern wie der Prozess- und Devicesimulation in der Halbleiterphysik konnten zwar die Effektivität und Robustheit von SAMG praktisch verifiziert werden, kommerziell hat sich SAMG allerdings noch nicht durchgesetzt. In neuen Anwendungsfeldern wie der Schaltungssimulation und der elektromagnetischen Kompatibilität gibt es effiziente AMG-Ansätze bisher nur in Spezialfällen. Hier liegt noch ein großes Potenzial für den industriellen Einsatz von SAMG.

Kooperationspartner (Auswahl)

- BMW AG, München (D);
- ChevronTexaco, San Ramon (USA);
- CoreTech System (Taiwan);
- Computational Dynamics, London (UK);
- ConocoPhillips, Houston (USA);
- ExxonMobil, Houston (USA);
- Fluent Inc., Lebanon (USA);
- Institute Francaise du Pétrole, Rueil-Malmaison (F);
- Imperial College, London (UK);
- ISE AG und ETH, Zürich (CH);
- Magma GmbH, Aachen (D);
- SaudiAramco (Saudi Arabien);
- Schlumberger, Abingdon (UK);
- Seismic Micro-Technology, Houston (USA)

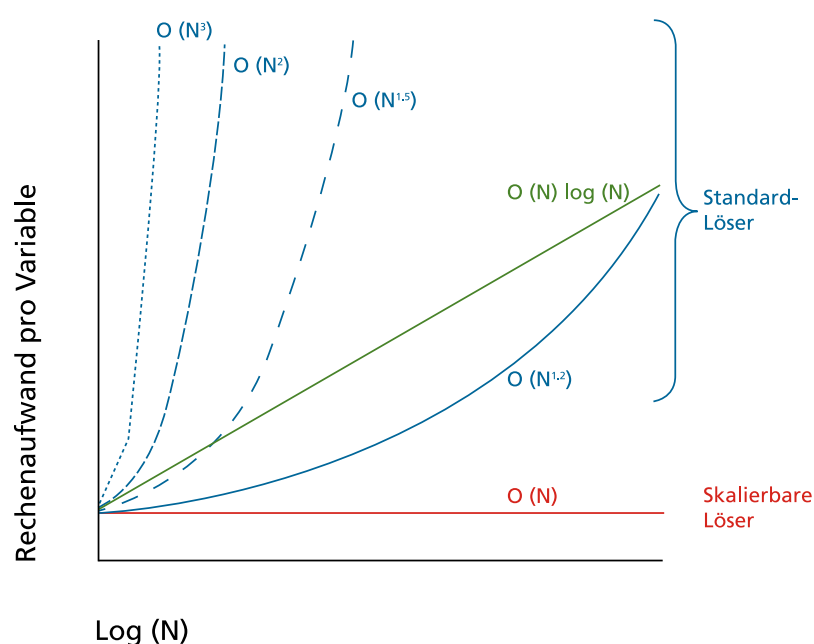


Bild 3: Rechenaufwand als Funktion der Problemgröße (N ist die Zahl der Variablen)

- Sigma GmbH, Aachen (D);
- Simlab, München (D);
- StreamSim Technologies,
San Francisco (USA);
- Synopsys Inc., Mountain View (USA);
- TU Delft, DIMES (NL);
- TU Wien, Institut für
Mikroelektronik (A);
- University of Stanford (USA);
- University of Texas, Austin (USA);
- V.I.P.S., London (UK);
- Wasy GmbH, Berlin (D);
- Waterloo Hydrogeologic Inc.,
Waterloo (Canada)

Kontakt

Dr. Klaus Stüben

Tel.: 02241/14-2749

Fax.: 02241/14-2102

klaus.stueben@scai.fraunhofer.de

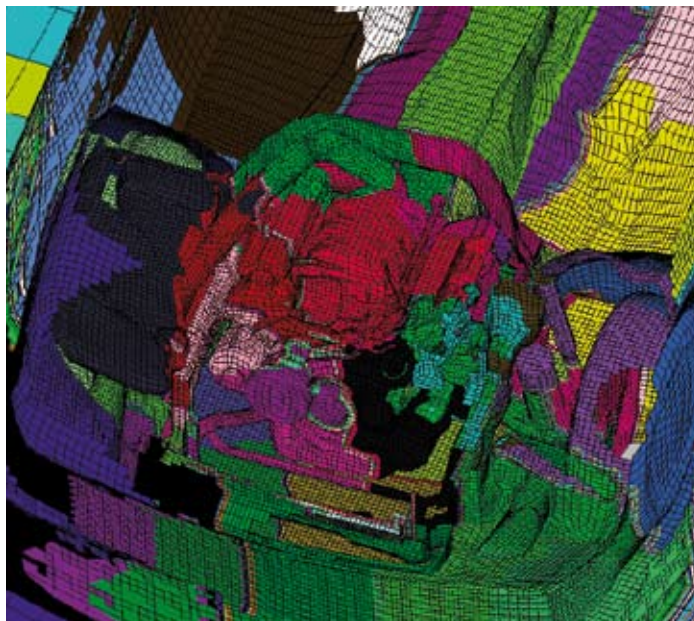
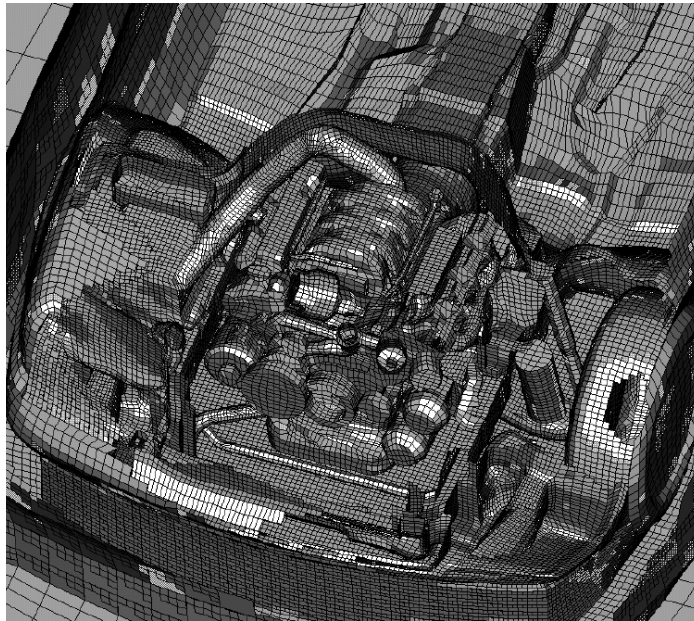
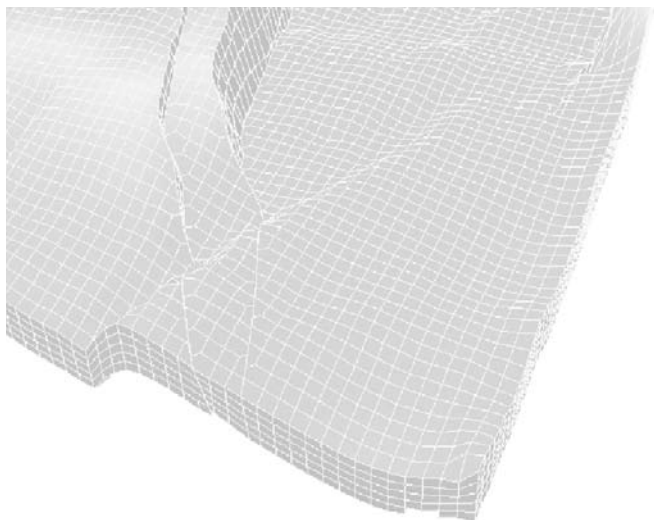


Bild 4: Verteilung eines komplexen Gitters (Motorraum) auf verschiedene Prozessoren eines Parallelrechners. Die Farben (unten) symbolisieren die Aufteilung. (Gitterdaten von Computational Dynamics und DaimlerChrysler)

SAMG-Öl – Beschleunigung von Ölreservoir-Simulationen



Aufgabe

In der Ölreservoir-Simulation geht es darum, komplexe Mehrphasenströmungen in porösen Medien numerisch zu berechnen. Für jede einzelne Phase werden die Massenerhaltung durch eine Kontinuitätsgleichung und die Abhängigkeit zwischen Geschwindigkeits- und Druckverteilung durch das Gesetz von Darcy beschrieben. Insgesamt erhält man ein zeitabhängiges System nichtlinearer Differentialgleichungen für die Druck- und Sättigungsverteilungen der einzelnen Phasen. Im klassischen »Black-Oil Model« betrachtet man die Phasen Öl, Wasser und Gas.

Im deutlich komplexeren »Compositional Model« wird Öl nicht als homogener Stoff betrachtet, sondern Bestandteile des Öls als einzelne Phasen. Beide

Modelle werden durch die Einbeziehung sogenannter DPDP (dual porosity – dual permeability)-Formulierungen zur Berücksichtigung von Gesteinsrissen und -verschiebungen und aufwändigerer Modelle für die Bohrlöcher immer anspruchsvoller.

Die effiziente Lösung der auftretenden großen linearen Gleichungssysteme ist bei allen Methoden von größter Bedeutung, weil die Gesamtsimulationszeit davon wesentlich abhängt.

Klassische Ein-Level-Verfahren können sehr ineffizient sein. Das liegt zum einen an der Größe der heute untersuchten Reservoirs, zum anderen aber auch an der Komplexität der physikalischen Modelle sowie der starken Variation und Unstetigkeit der Permeabilität typischer Reservoirs (Bild 1).

Lösung

SCAI verbessert und erweitert ständig die algebraische Mehrgitterbibliothek SAMG, um den wachsenden Anforderungen in der Ölreservoirsimulation gerecht zu werden. Wie effizient SAMG zum gegenwärtigen Zeitpunkt eingesetzt werden kann, hängt wesentlich von den Details der numerischen Behandlungsweise ab.

Zur Diskretisierung setzen sich Finite-Volumen-Verfahren auf unstrukturierten Gittern vom Voronoi-Typ (Bild 2) langsam durch. Vorhandene Lösungsansätze unterscheiden sich allerdings erheblich darin, wie die (starke) Kopplung der Differentialgleichungen untereinander numerisch modelliert wird:

- In der voll impliziten Methode (englisch FIM) wird auf allen Gitterpunkten das voll gekoppelte System partieller Differentialgleichungen betrachtet. Für heutige Rechner ist FIM insbesondere für realistische »Compositional Models« oft aber viel zu aufwändig.
- In der adaptiv impliziten Methode (AIM) wird versucht, nur in den Punkten des Gitters ein voll gekoppeltes System anzusetzen, wo dies physikalisch erforderlich ist, und ansonsten nur eine Druckgleichung zu betrachten.
- Eine starke Vereinfachung der FIM stellt die IMPES-Methode (implicit in pressure, explicit in saturation) dar. Allerdings erzwingt hier die zeitlich

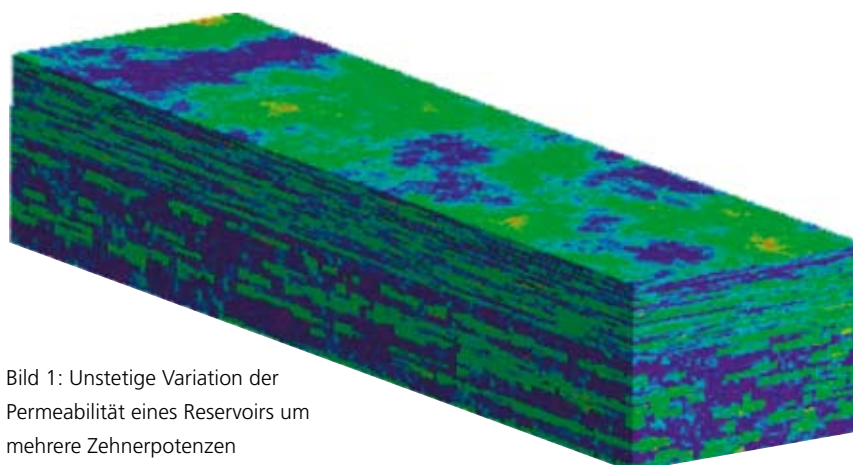


Bild 1: Unstetige Variation der Permeabilität eines Reservoirs um mehrere Zehnerpotenzen (SPE 10 Modellfall)

explizite Diskretisierung der Sättigungsentwicklung extrem kleine Zeitschrittweiten (CFL-Bedingung).

- Bei der IMPES-ähnlichen Stromlinienmethode entfällt dieser Nachteil. Anstatt die zeitlich explizite Berechnung der Sättigungen auf dem statischen Raumgitter durchzuführen, transportiert diese Methode die Fluide entlang sich dynamisch ändernder, voneinander unabhängiger Stromlinien. Die Stromlinienmethode kann aber (noch) nicht mit unstrukturierten Gittern sowie einigen komplexeren Modellen umgehen.

Sowohl für die IMPES- als auch die Stromlinienmethode ist SAMG hervorragend geeignet, um die in jedem Zeitschritt auftretenden Druckgleichungen effizient zu lösen. Für die AIM- und FIM-Matrizen gibt es aktuell zwei Herangehensweisen:

- Man verwendet zwei Vorkonditionierer – einen für die Druckvariablen und einen für die restlichen Variablen – und überlässt die Kopplung einem Standard-Beschleuniger (CPR-Methode). SAMG setzt man hier als effizienten Vorkonditionierer für den Druckteil ein.
- Die »direkte« Herangehensweise verwendet nur einen Vorkonditionierer. Dank wesentlicher Fortschritte bei der Erweiterung der klassischen (für skalare Differentialgleichungen entwickelten) AMG-Methodik der letzten Jahre bietet SAMG nun auch effiziente AMG-Vorkonditionierer für komplette AIM- und FIM-Matrizen.

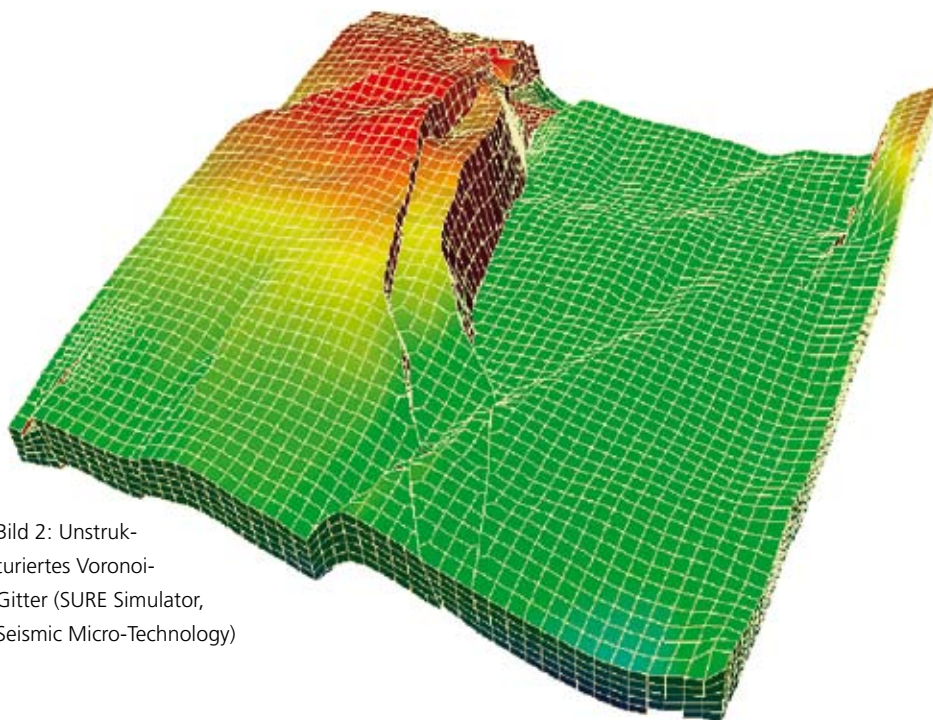


Bild 2: Unstrukturiertes Voronoi-Gitter (SURE Simulator, Seismic Micro-Technology)

Ergebnis

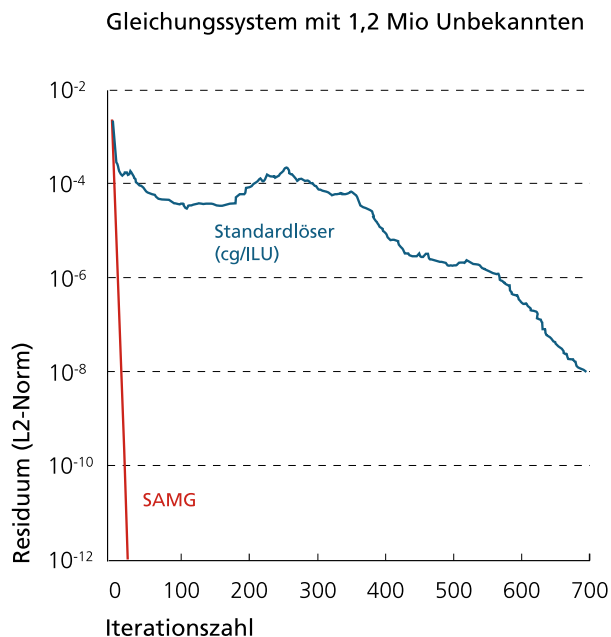
Mehrere industrielle Softwareentwickler nutzen bereits die vom Fraunhofer SCAI entwickelte Löserbibliothek SAMG.

Im Falle der Stromlinienmethode konnten zum ersten Mal Reservoirs mit mehreren Millionen Zellen simuliert werden, wobei der typische Rechenzeitgewinn durch die Benutzung von SAMG ein bis zwei Zehnerpotenzen beträgt. Bild 3 vergleicht das Konvergenzverhalten von SAMG mit dem eines Standardlösers bei Anwendung auf ein typisches Gleichungs-

system der Stromlinienmethode.

Insgesamt ist hier SAMG etwa 20 mal schneller. Auch bei Anwendung von SAMG auf AIM- oder FIM-Matrizen sind die Rechenzeitgewinne trotz der Komplexität der Systeme bereits sehr viel versprechend. Bild 4 zeigt für eine typische AIM-Anwendung, dass SAMG im Durchschnitt nur fünf Iterationen benötigt, um die im Verlauf einer kompletten Simulation auftretenden Matrixprobleme zu lösen. Obwohl dieses Beispiel sehr klein ist (nur knapp 90 000 Variablen)

Bild 3: Standardlöser versus SAMG (3DSL Simulator, StreamSim Technologies)



und damit das Potenzial von SAMG nur begrenzt sichtbar werden kann, ist SAMG bereits knapp doppelt so schnell wie ein Standardverfahren.

Perspektive

Die Ansprüche an die Modellierung in der Ölreservoirsimulation steigen ständig. Die anspruchsvollsten der heutigen Modelle umfassen auch geophysikalische Abhängigkeiten. Damit wachsen auch die Anforderungen an den numerischen Kernlöser weiter an. Während die Programmbibliothek SAMG mittlerweile so weit entwickelt ist, dass sie auch für die voll oder adaptiv impliziten Methoden einsetzbar ist (wenn auch noch nicht in jeder Hinsicht optimal), macht die Einbeziehung geophysikalischer Teilmodelle noch erhebliche Schwierigkeiten. Mit einigen Partnern (etwa dem Imperial College, V.I.P.S. Limited, London) wird derzeit an einer Erschließung auch solcher Modelle gearbeitet.

Partner

- ChevronTexaco, San Ramon (USA);
- ConocoPhillips, Houston (USA);
- ExxonMobil, Houston (USA);
- Institute Francaise du Pétrole, Rueil-Malmaison (FR);
- Imperial College, London (UK);
- SaudiAramco (Saudi Arabien);
- Schlumberger, Abingdon (UK);
- Seismic Micro-Technology, Houston (USA);
- StreamSim Technologies, San Francisco (USA);
- University of Stanford (USA);
- University of Texas, Austin (USA);
- V.I.P.S., London (UK).

Kontakt

Dr. Tanja Clees

Tel.: 02241/14-2983

Fax.: 02241/14-2102

tanja.clees@scai.fraunhofer.de

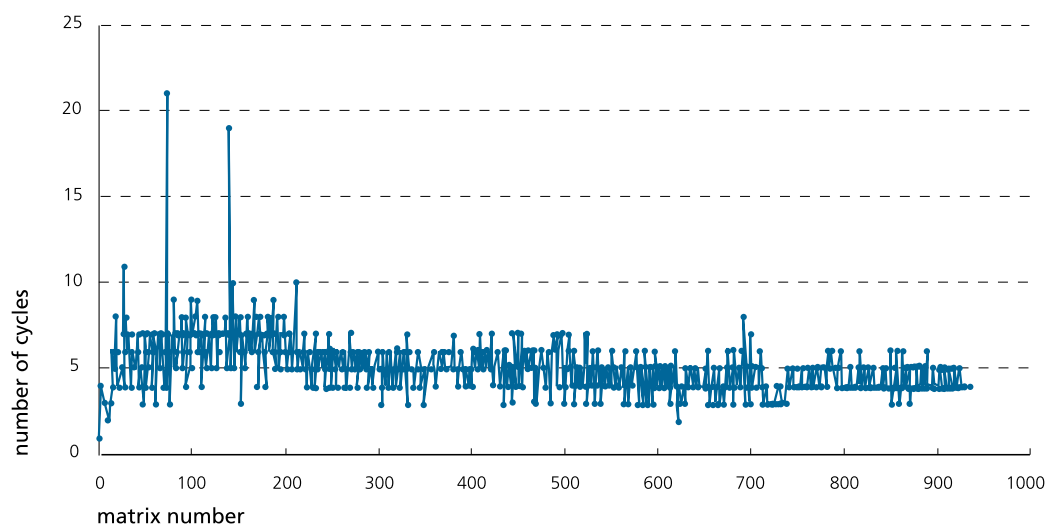


Bild 4: Iterationszahl zur Lösung einer Sequenz von über 900 Matrixproblemen einer instationären AIM-Simulation (SURE Simulator, Seismic Micro-Technology)

Beschleunigung von Halbleiter- und Schaltkreissimulationen

Aufgabe

Halbleiterbauteile, etwa Transistoren, lassen sich aus dem heutigen Leben kaum mehr wegdenken. Aus bis zu vielen Millionen von ihnen werden Mikrochips und andere elektronische Schaltkreise hergestellt. Dass Halbleiterbauteile mittlerweile Abmessungen im Nanometerbereich erreicht haben, verkompliziert den Design-, Herstellungs- und Testprozess immer mehr und lässt die Kosten in die Höhe schnellen. Daher versucht die Industrie, durch computergestützte Simulation bereits eine Vorauswahl geeigneter neuer Designs zu treffen, um so den Designprozess zu verbilligen und zu beschleunigen.

Aufgabe der so genannten Prozess- oder Device-Simulation ist es, den Prozess der Herstellung sowie die physikalischen Eigenschaften von Halbleiterbauteilen zu simulieren. Aufgrund der komplizierten Modelle und Gitter zählen beide Gebiete heute zu den Herausforderungen für die computergestützte Simulation (Bilder 1 bis 3).

Eine besondere Schwierigkeit besteht hier in der robusten und schnellen Lösung komplizierter Systeme partieller Differentialgleichungen wie Stress-, Reaktions-Diffusions- und Drift-Diffusions-Systeme. Bei deren approximativer Lösung müssen Serien großer dünnbesetzter linearer Gleichungssysteme – mit einigen Zehntausend bis zu Millionen von Variablen – numerisch gelöst werden. Selbst auf modernen Rechnern sind solche Probleme mit direkten linearen Lösern nicht mehr

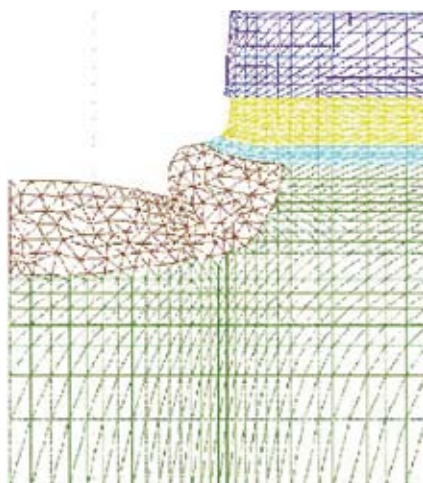


Bild 1: Gitter für die Stress-Analyse eines Systems aus fünf Materialschichten (Prozess-Simulation mit FLOOPS)

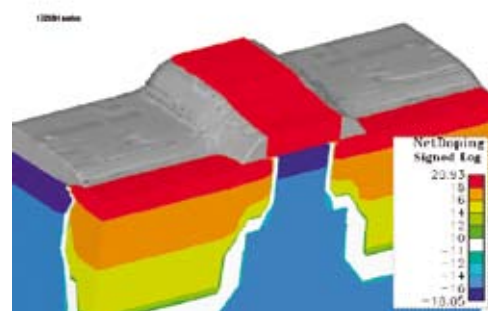


Bild 2: Ergebnis einer Prozess-Simulation: Layout und Doping-Profil eines Transistors²

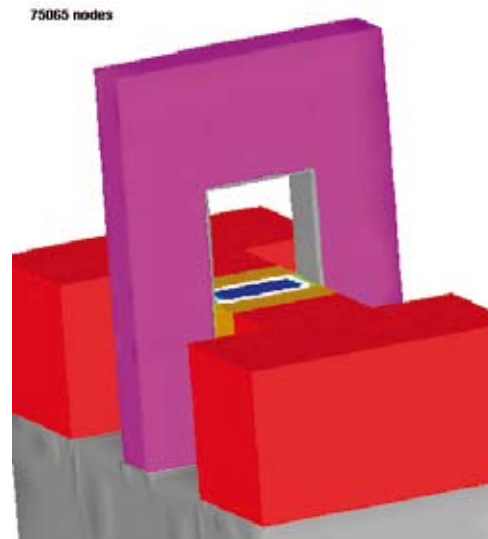
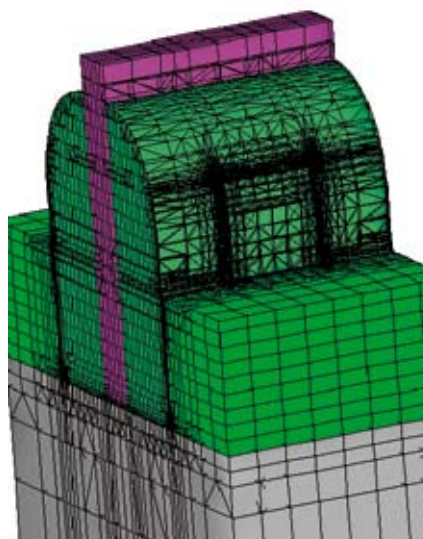


Bild 3: Gitter (links) und Dopingprofil eines FinFET-Transistors²

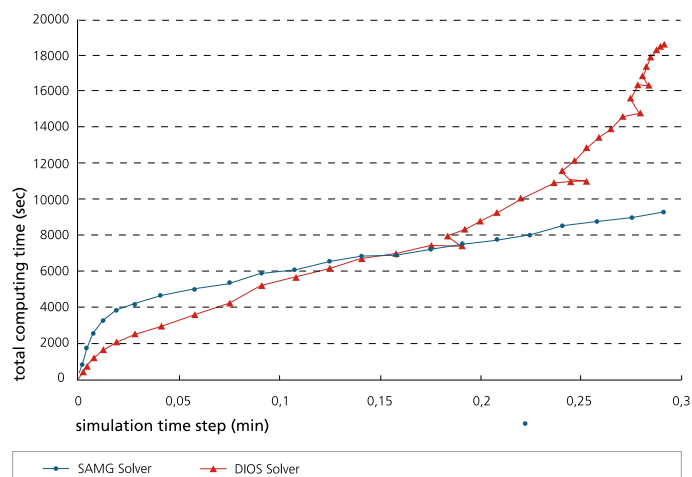


Bild 4: Entwicklung der Rechenzeit bei fortschreitender Simulationszeit in einem Prozess-Simulationsprozess (gerechnet mit dem Prozess-Simulator DIOS¹)

Perspektiven

Die bisherigen Ergebnisse demonstrieren, dass SAMG gewinnbringend in industriellen Werkzeugen für die Halbleiter-Prozess- und Device-Simulation eingesetzt werden kann. Die praktische Bedeutung hierarchischer Löser wie SAMG erhöht sich mit den absehbar steigenden Anforderungen zukünftiger Simulatoren an die numerischen Verfahren weiter. Auf der einen Seite werden die oben skizzierten Anwendungsprobleme verstärkt gekoppelt betrachtet, jedenfalls in lokal relevanten Bereichen. Auf der anderen Seite wird die Device-Simulation zunehmend um quantenmechanische Aspekte erweitert werden müssen.

Weitere Felder im Halbleiterkontext, in denen die Effizienz von SAMG derzeit untersucht wird, sind die Schaltkreissimulation, die gekoppelte Schaltkreis- und Device-Simulation, sowie Simulationen elektromagnetischer Verträglichkeit. Vielversprechende Fortschritte konnten bereits verzeichnet werden. In all diesen Feldern hat die Entwicklung einer effizienten hierarchischen Lösungsmethode weitreichende Bedeutung insbesondere für kommerzielle Werkzeuge zur Halbleiter- und Schaltkreissimulation sowie zur Simulation elektromagnetischer Verträglichkeit im Automobilbereich.

Kooperationspartner

- ¹ ISE AG, Zürich und ETH Zürich, Schweiz;
- ² Synopsys Inc., Mountain View, USA;
- TU Wien, Institut für Mikroelektronik, Österreich;
- TU Delft, DIMES, Niederlande;
- BMW, Deutschland;
- Simlab, Deutschland.

Kontakt

Dr. Tanja Clees
 Tel.: 022 41/14 - 2983
 Fax.: 022 41/14 - 2102
 tanja.clees@scai.fraunhofer.de

handhabbar, vielmehr müssen iterative Löser verwendet werden.

Lösung

Die heute eingesetzten klassischen iterativen Löser sind oft weder robust noch effizient genug. Abhilfe versprechen moderne hierarchische Lösungsansätze wie der algebraische Mehrgitteransatz (AMG), der bekanntermaßen für große Klassen diskretisierter skalarer partieller Differentialgleichungen auf optimal skalierende, sehr effiziente und robuste Löser führt. Allerdings bedarf eine Anwendung des AMG-Prinzips auf Systeme partieller Differentialgleichungen erheblicher methodischer Verallgemeinerungen:

- Probleme der Stress-Analyse lassen sich bereits mit einer relativ einfachen Erweiterung von AMG, dem sogenannten Unbekannten-Ansatz, erheblich beschleunigen. Die Idee besteht hier darin, die Vergrößerungshierarchie der einzelnen physikalischen Größen (räumliche Verschiebungen) getrennt voneinander zu konstruieren.
- Reaktions-Diffusions- und Drift-Diffusions-Probleme sind dagegen erheblich komplizierter. Eine effiziente Behandlung durch AMG verlangt hier sogenannte punktbasierter Verallgemeinerungen, die auf einer gemeinsamen Hierarchie aller physikalischen Größen beruhen. Die konkrete Konstruktion einer entsprechenden AMG-Hierarchie ist dabei stark abhängig von den physikalischen Eigenschaften

der jeweils zugrunde liegenden Problemklasse. Es ist gelungen, für Reaktions-Diffusions- und Drift-Diffusions-Anwendungen effiziente Konstruktionsmechanismen zu entwickeln.

Ergebnisse

Die erwähnten algorithmischen Erweiterungen sind mittlerweile fester Bestandteil der am Institut SCAI entwickelten SAMG-Bibliothek. Um aussagekräftige Benchmarks in jedem der obigen Anwendungsbereiche zu erhalten, wurde die Bibliothek ihrerseits in drei industriell relevante Simulationscodes eingebunden und getestet:

- für Stress-Analyse in den Prozess-Simulator FLOOPS der Universität Florida,
- für Reaktions-Diffusions-Prozesse in den kommerziellen Prozess-Simulator DIOS¹,
- für Drift-Diffusions-Prozesse in den kommerziellen Device-Simulator TAURUS².

Die neuartigen AMG-Verfahren zeigten häufig ein robusteres Verhalten als die üblicherweise verwendeten Standardverfahren (Bild 4). Damit sich der Einsatz von AMG hinsichtlich der Rechenzeit lohnt, müssen – wie zu erwarten – die zugrunde liegenden Probleme eine gewisse Mindestgröße haben. Die bisherigen Untersuchungen haben gezeigt, dass ab etwa 100 000 Variablen gilt: Je größer die Probleme, desto höher der relative Rechenzeitgewinn.

ADAPTOR – Analyse und Optimierung Numerischer Anwendungen

Aufgabe

Software, insbesondere der numerischen Simulation, muss immer wieder neuen Bedürfnissen angepasst werden. Zu den Aufgaben gehören Wartung und Erweiterung der Funktionalität sowie die Optimierung und Portierung auf andere Rechner. Zur Verkürzung der Rechenzeit sind Parallelisierung und Cache-Optimierung besonders wichtig. Dazu benötigt man Software-Werkzeuge, die den Code analysieren und automatisch transformieren.

Lösung

Fraunhofer SCAI hat das Analyse- und Transformationssystem ADAPTOR (Automatic Data Parallelism TranslaTOR) entwickelt. Damit lassen sich Fortran und C-Programme analysieren, instrumentieren und optimieren. ADAPTOR ist mit modernen Compilerwerkzeugen modular aufgebaut und bietet Scanner und Parser sowie zahlreiche Funktionen für Abhängigkeitsanalysen, Transformationen, Parallelisierungen und Optimierungen. ADAPTOR bietet zudem Laufzeitunterstützung für instrumentierte und parallelisierte Programme.

Zur Analyse der Performance erlaubt es ADAPTOR, Programme zu instrumentieren, um so zur Laufzeit ausgewählte Performance-Daten zu sammeln und entsprechende Trace-Dateien zu erzeugen. Für parallele Programme werden diese Daten für alle Prozesse und Threads separat gesammelt. Graphische Benutzeroberflächen zur Festlegung von Performance-Ereignissen und zur Visualisierung der Performance-Ergebnisse hat teilweise das Fraunhofer SCAI entwickelt, teilweise wird auf Public-Domain-Werkzeuge (beispielsweise KCachegrind) oder auch kommerzielle Werkzeuge (VAMPIR, Technische Universität Dresden) zurückgegriffen.

Weitherhin unterstützt ADAPTOR – unabhängig vom Maschinentyp – die Parallelisierung von Fortran-Anwendungen mit High Performance Fortran- oder OpenMP »Open Multi Processing-Direktiven«. Für die so transformierten Programme gibt es jeweils eine umfangreiche Laufzeitbibliothek, die auf weit verbreiteten Standards (Message Passing Interface, PThreads) basiert.

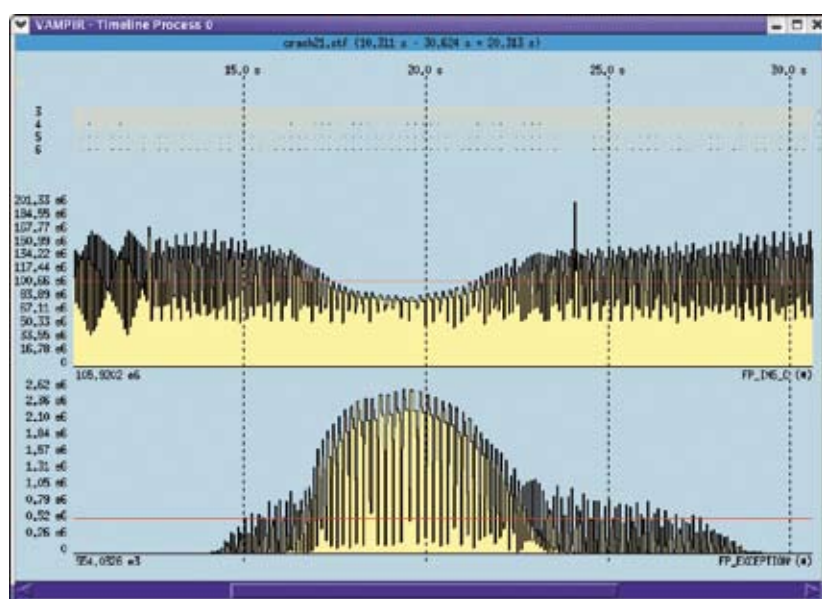


Bild 1: Zeitliche Darstellung von Performance-Ereignissen (hier Floating-Point Exceptions und Floating-Point Instruktionen) mit der Software VAMPIR (TU Dresden)

Ergebnisse

Im vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Projekt EP-CACHE wurden die Analyse- und Transformationskomponenten von ADAPTOR genutzt, um Werkzeuge für die Instrumentierung, Analyse und Optimierung von Programmen für Cache-Architekturen zu entwickeln. Insbesondere zur Cache-Optimierung wurde gemeinsam mit der TU Dresden das Transformationssystem GOOFI (Graphical Optimization Of Fortran Implementations) entwickelt.

Durch das Vorhaben konnten die Funktionalität und die Qualität der ADAPTOR-Umgebung insgesamt deutlich verbessert werden. Gegenüber vergleichbaren Umgebungen ist ADAPTOR unter anderem durch folgende Alleinstellungsmerkmale charakterisiert:

- ADAPTOR unterstützt die Zuordnung von Performance-Ereignissen zu den entsprechenden Aufruf-Hierarchien eines Programms.
- Basierend auf einer Instrumentierung für Datenstrukturen und einer Zuordnung von Performance-Ereignissen zu Speicheradressen, lassen sich diejenigen Datenstrukturen eines Anwendungsprogramms ermitteln, die für Cache-Misses oder andere durch Daten verursachte Ereignisse verantwortlich sind.

Die Werkzeuge wurden erfolgreich mit internen Softwareprodukten des SCAI (etwa zur schnellen Lösung linearer Gleichungssysteme und zur Datenkompression) und zusammen mit Software externer Partner (beispielsweise dem lokalen Modell des Deutschen Wetterdienstes) erfolgreich genutzt.

Bild 3: Verteilung von Cache-Misses auf die Datenfelder eines Unterprogramms (Visualisierung mit KCachegrind)

Perspektiven

Im Projekt SESIS (Integriertes Schiffsentwurfs- und Simulationssystem) des BMBF dient ADAPTOR dazu, existierende Methoden für den Schiffsentwurf (290 Methoden, 122 ausführbare Programme, 5 500 Fortran Quell-Dateien, über eine Millionen Zeilen Quell-Code) zu analysieren und den Prozess der Integration in eine neue und moderne Software-Architektur zu unterstützen.

Die Werkzeuge für die Performance-Analyse werden auf weitere Plattformen portiert und sollen zu einem kommerziellen Produkt weiterentwickelt werden.

Projektpartner

- Intel Corporation, Brühl;
- Flensburger Schiffsbaugesellschaft (FSG);
- Deutscher Wetterdienst (DWD), Offenbach;
- Technische Universität Dresden;
- Technische Universität München.

Kontakt

Dr. Thomas Brandes
 Tel.: 02241 / 14 - 3472
 Fax.: 02241 / 14 - 2102
 thomas.brandes@scai.fraunhofer.de

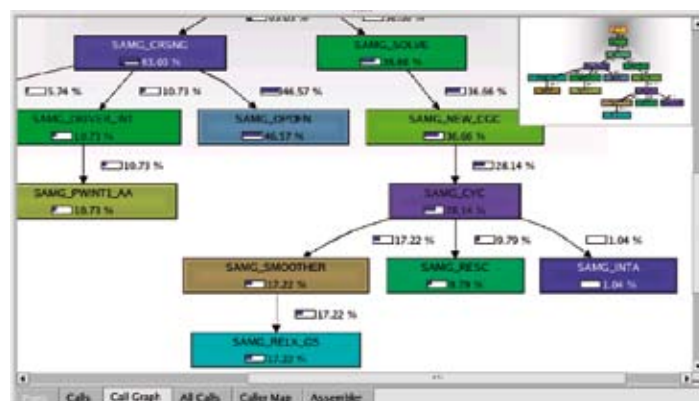
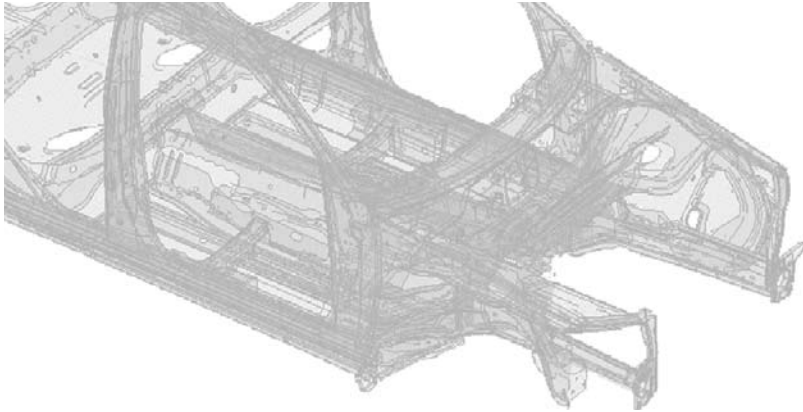


Bild 2: Prozentuale Verteilung von Performance-Ereignissen (z.B. Wallticks, Floating-Point Operationen, Cache-Misses) auf Unterprogramme



DesParO-I – Interaktive Optimierung von Design-Parametern im virtuellen Entwurf neuer Werkstücke



Aufgabe

Die Computersimulation erlaubt es, bereits im Vorfeld einer meistens sehr teuren Prototypentwicklung wichtige Parameter oder Geometrien eines zu entwickelnden Werkstücks oder Produkts zu optimieren. Im Regelfall muss dabei für jede Parameter- oder Geometrieänderung ein neuer Simulationslauf gestartet werden. Insbesondere im Fall rechenzeitintensiver Simulationsprogramme, bei denen bereits ein einzelner Simulationslauf Stunden oder gar Tage dauert, kann der eigentliche Optimierungsprozess sehr zeitaufwändig sein. Hier sind intelligente, sparsame Methoden gefragt, die den Prozess der Parameterwahl beschleunigen.

Bild 1: Interaktionsmöglichkeiten bei der Lösung eines Optimierungsproblems mit dem Software-Werkzeug DesParO-I

Lösung

Im Projekt AUTO-OPT (Seite 41) hat SCAI das Werkzeug DesParO-I zur interaktiven, multidimensionalen Optimierung entwickelt. DesParO-I umfasst folgende grundlegende Konzepte:

- Nichtlineare »Meta-Modelle« der Daten des Benutzers durch Approximationen mit Radialen Basisfunktionen (RBF).
- Datamining auf Meta-Modellen zur automatischen Erkennung besonders sensibler Optimierungskriterien und zur Auswahl von Werten eines Datensatzes mit besonders großen Auswirkungen auf die Optimierung.
- Fourier Analyse für eine bessere Beschreibung stetiger Designvariablen (etwa Kurven und Oberflächen).

- Das Lösen typischer Optimierungsaufgaben durch »interaktive Erforschung« der Meta-Modelle mittels intuitiver Visualisierung (Bild 1). Dies erlaubt es dem Anwender beispielsweise, unterschiedliche lokale Optima zu erkennen und zu selektieren sowie optimale Bereiche (Pareto-Fronten) für eine multiobjektive Optimierung zu erforschen. Darüber hinaus kann man Toleranzgrenzen auf unterschiedliche Kriterien bei Optimierungen mit Nebenbedingungen einstellen.
- Interpolation von Simulationsergebnissen, die auf der Finite-Elemente-Methode beruhen, zur genaueren Untersuchung (Bild 2).

Das Optimierungswerkzeug DesParO-I ermöglicht die interaktive Lösung komplexer Optimierungsprobleme mit einer großen Anzahl von Design Parametern, vielen Zielfunktionen und verschiedenen Bedingungen an die Optimierungskriterien.



Bild 2: Farbliche Hervorhebung der Unterschiede zwischen interpolierten und simulierten Ergebnissen. Im Beispiel (B-Säule eines Fahrzeugmodells der Audi AG) ist der Unterschied gering.



Dabei sorgt die Verwendung der RBF-Approximation für Stabilität und hohe Genauigkeit des Meta-Modells selbst bei einer begrenzten Anzahl vorliegender Simulationen.

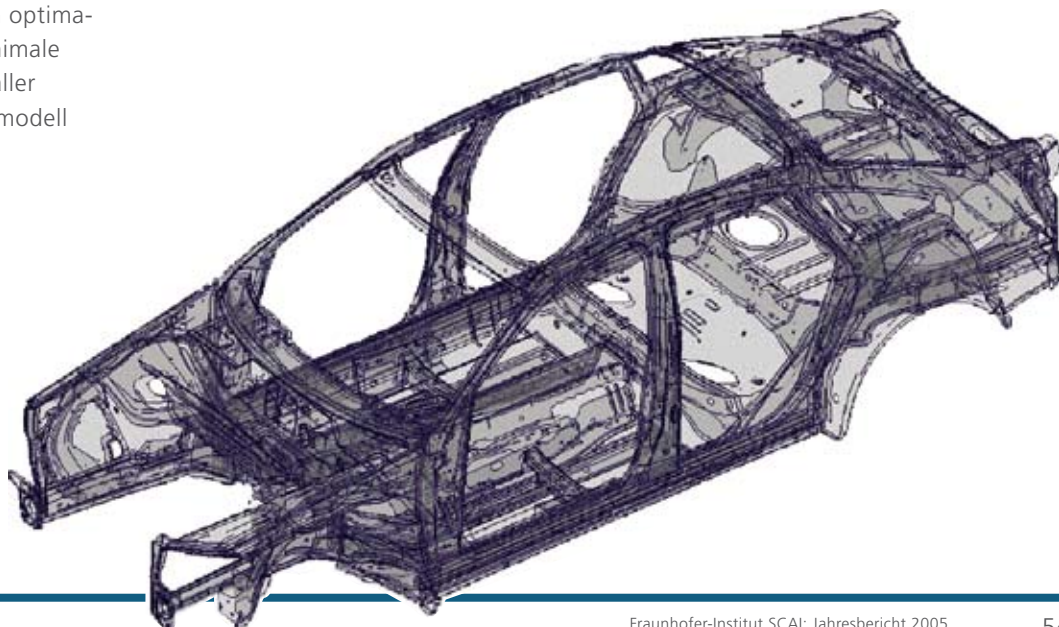
Ergebnis

DesParO-I diente im Projekt AUTO-OPT erfolgreich zur Lösung realer Optimierungsaufgaben in verschiedenen Bereichen des Automobil-Designs. Als Beispiele sind Aufprall-Simulationen, Geräusch-, Vibrations- und Steifigkeitsanalysen sowie Umformprozesse und Kontaktprobleme zu nennen.

So wurde zum Beispiel ein von Audi vorgegebenes multidisziplinäres Optimierungsproblem (MDO) für ein komplettes Karosseriemodell (Bild 3) mit DesParO-I bearbeitet. Ziel der Optimierung war es, die Gesamtmasse zu minimieren und gleichzeitige verschiedene, die Sicherheit und den Komfort betreffende Bedingungen zu erfüllen.

Typische charakteristische Größen, die in der multidisziplinären Optimierung eine wichtige Rolle spielen sind dabei unter anderem Stirnwandintrusion, Verzögerung der Fahrgastposition, Energieaufnahme, Torsions- und Biegesteifigkeiten und Eigenvibrationen. 96 Design-Parameter und 28 Optimierungskriterien beschreiben die konkrete Aufgabe. Die Design-Parameter mit den größten Auswirkungen und die empfindlichsten Optimierungskriterien wurden ausgewählt. Schließlich ermittelte man optimale Design-Parameter für eine minimale Gesamtmasse unter Einhaltung aller Toleranzen und an das Fahrzeugmodell gestellter Bedingungen.

Bild 3: Die Wandstärken von 96 Bauteilen wurden zur multidisziplinären Optimierung freigegeben (Beispiel: Audi).



Zusammen mit der BMW Group in München und dem Softwarehaus INTES in Stuttgart sind Optimierungsprobleme in der Metallumformung und Kontaktsimulation untersucht worden (Bild 4). Eine zusätzliche Komplexität solcher Aufgaben ergibt sich durch kontinuierliche Parameterräume (etwa die kontinuierliche Druckkraftverteilung und kontinuierlich variable Materialdicken). Eine geeignete Beschreibung dieser (unendlich dimensionalen) Räume erfordert Transformationen in Fourier-Räume, um realistische (glatte) von unrealistischen (hochoszillierenden) Parameterkonfigurationen zu trennen. Die Anwendung der Datamining-Komponenten und der interaktiven Möglichkeiten von DesParO-I erlaubten auch für solch komplizierte Probleme das Auffinden globaler Optima.

Perspektive

Derzeit arbeitet SCAI an der Integration von DesParO-I in das etablierte, kommerzielle Workflow- und Optimierungstool Optimus von Noesis in Leuven (Belgien), das in der Automobilindustrie weit verbreitet ist. Dies erweitert Optimus um neue Optimierungsverfahren und die interaktive Erforschung des Kriterien- und Parameterraums. Durch die industrielle Nutzung erhalten die neuen Möglichkeiten von DesParO-I eine bessere Sichtbarkeit.

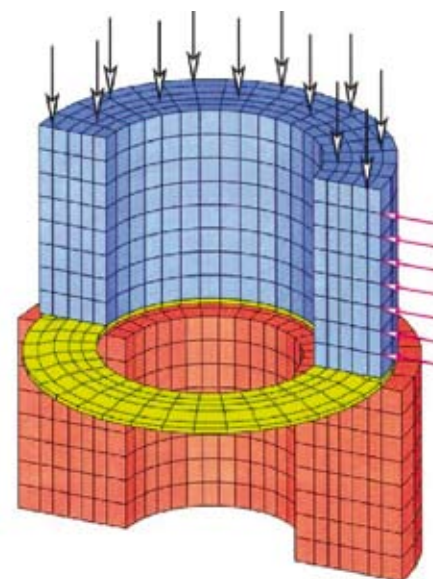


Bild 4: Form-Optimierung einer Dichtung unter vertikaler und seitlicher Last (Beispiel: Intes, Stuttgart)

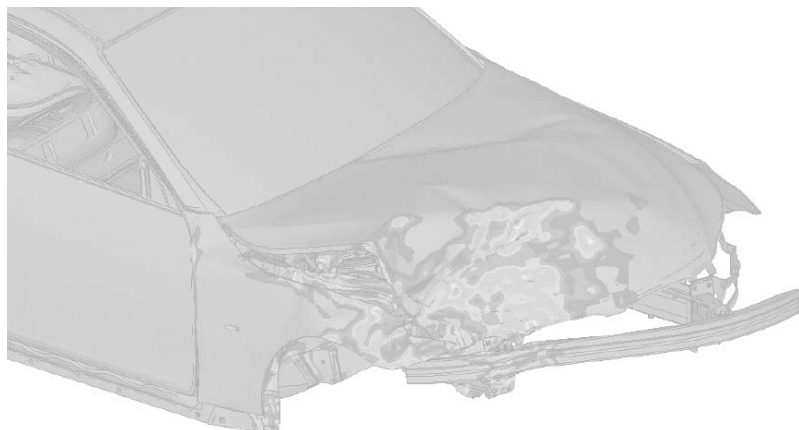
Partner

- AUDI AG, Ingolstadt;
- BMW Group, München;
- Volkswagen AG, Wolfsburg;
- INTES GmbH, Stuttgart;
- Fraunhofer IGD, Darmstadt;
- Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern;
- Noesis Solutions, Leuven, Belgium.

Kontakt

Dr. Lialia Nikitina
 Tel.: 02241 / 14 - 1596
 Fax.: 02241 / 14 - 2102
 lialia.nikitina@scai.fraunhofer.de

FEMZIP – Datenkompression in der numerischen Simulation



Aufgabe

Die numerische Simulation dynamischer Prozesse (zum Beispiel Aufprall-Simulationen, Wettervorhersage oder auch Gießvorgänge) erzeugt Ergebnisdateien, die mehrere Gigabytes groß sein können. Mit der Zeit sammeln sich schnell mehrere Tera- oder gar PetaByte an Daten an, die zu archivieren sind. So hat etwa der Deutsche Wetterdienst gegenwärtig einen Bedarf zur mittelfristigen Daten-Archivierung von 3,5 PetaByte jährlich (Bild 1).

Es gilt, diese enormen Speicheranforderungen mit Software-Werkzeugen zur Datenkompression zu reduzieren. Die Kompression bietet nicht allein den Vorteil, den Speicheraufwand zu reduzieren. Die komprimierten Daten lassen sich zudem erheblich schneller über Netze austauschen. Die in der numerischen Simulation zu komprimierenden Daten sind allerdings Fließkommazahlen, und

Standardkompressionsprogramme sind hier entweder nicht anwendbar oder sie haben eine zu geringe Kompressionswirkung.

Lösung

SCAI entwickelt Software-Werkzeuge, welche die Kompression von Simulationsdaten auf strukturierten und unstrukturierten Gittern unterstützen. Die erzielbare Kompressionsrate hängt dabei von der jeweils vorgegebenen Genauigkeitsanforderung ab. So kann ein Anwender vorschreiben, ob die Ursprungsdaten nach der Dekomprimierung exakt wiederhergestellt werden sollen (verlustfreie Kompression), oder ob nur eine festgelegte Genauigkeit garantiert werden muss (verlustige Kompression).

Zur Realisierung dieser unterschiedlichen Ansprüche kommen verschiedene Algorithmen zum Einsatz. Die konkrete

Wahl der Algorithmen hängt auch davon ab, ob die Daten auf strukturierten (wie etwa im Falle von Wetterdaten) oder unstrukturierten Gittern (wie etwa bei Daten aus Crash-Simulationen) gegeben sind.

Ergebnisse

Die Software FEMZIP hat SCAI speziell für die Kompression von Daten aus Aufprall-Simulationen entwickelt. Weil die Programme zur Crash-Simulation unterschiedliche Datenstrukturen haben, muss FEMZIP speziell auf sie angepasst werden. Bisher kann FEMZIP die Daten der führenden Crash-Simulationsprogramme Pamcrash (FEMZIP-P) und LS-Dyna (FEMZIP-L) komprimieren. Die Kompression ist nicht verlustfrei. Die Genauigkeit der komprimierten Daten legt der Benutzer fest. Bei geeigneter Genauigkeitsvorgabe können die entkomprimierten Daten ohne wesentlichen Verlust als Eingabe für Standard-Postprozessoren dienen. Bild 2 vergleicht Daten aus Aufprallsimulationen vor und nach einer Kompression bei Vorgabe einer hohen Genauigkeitsanforderung. Im vorliegenden Fall konnten die Daten dabei um den Faktor sieben komprimiert werden.

Bild 3 zeigt, dass typische Kompressionsfaktoren – in Abhängigkeit von der jeweils gewählten Genauigkeitsanforderung – zwischen fünf und zehn liegen.

Aufgrund von Anfragen aus der Automobilbranche bietet das Visualisierungs-

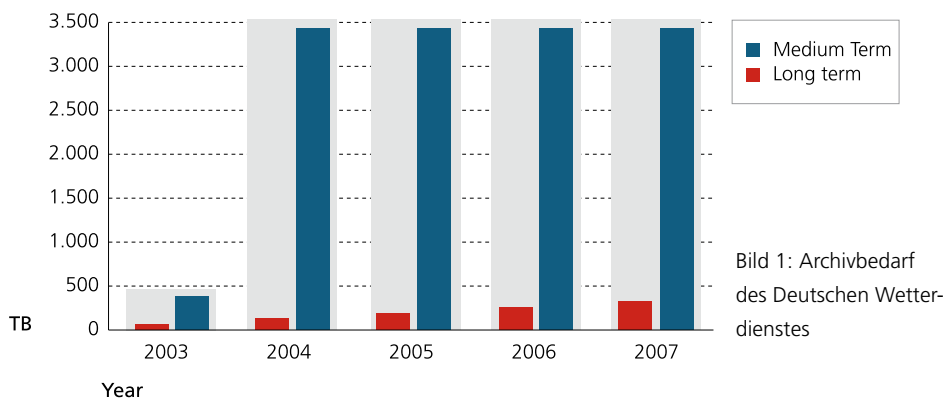


Bild 1: Archivbedarf des Deutschen Wetterdienstes

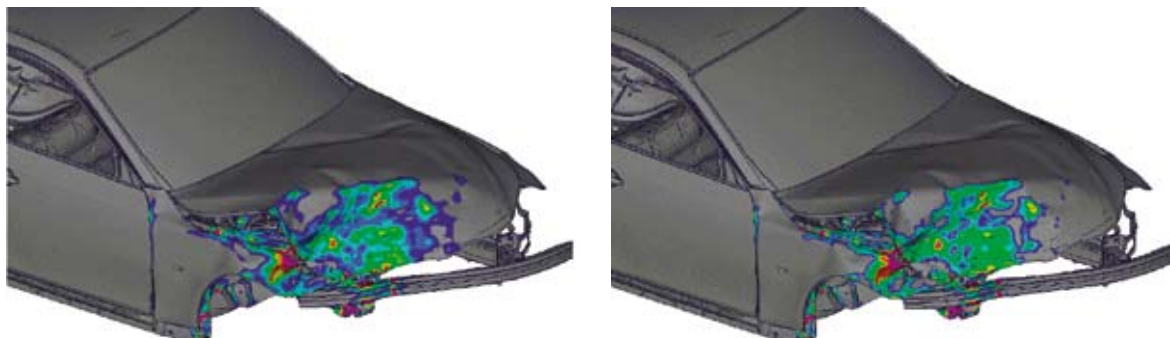


Bild 2: Plastische Dehnung vor (links) und nach (rechts) der Datenkompression bei hoher Genauigkeitsanforderung (Ergebnisse von BMW im Projekt AUTO-OPT)

tool Animator der Firma GNS neuerdings eine Möglichkeit, die es gestattet, mit FEMZIP komprimierte Dateien direkt – ohne vorherige Entkomprimierung – einzulesen. Drei andere Softwarehäuser planen ebenfalls, diese Funktionalität in ihre Produkte einzubauen.

GRIBZip ist eine zweite Komprimierungssoftware, die meteorologische Daten, die im Format GRIB1 der World Meteorological Organization vorliegen, komprimiert. GRIB ist das Standardformat zur Archivierung und zum Austausch von Daten in der Meteorologie. Im Gegensatz zu FEMZIP, komprimiert GRIBZip verlustfrei und nutzt andere Methoden. Für repräsentative Datensätze zur Wettervorhersage des Deutschen Wetterdiensts lassen sich verlustfreie Kompressionsfaktoren von circa 3,3 erzielen.

Perspektiven

Zu den beiden Kompressionstools GRIBZip und FEMZIP gibt es bisher keine Konkurrenzentwicklungen. Das Interesse an diesen Software-Werkzeugen ist groß, der potenzielle Markt noch erheblich ausbaufähig. Mittelfristig sollen mit FEMZIP alle Daten aus Simulationen, die die

Finite-Element-Methode nutzen, komprimiert werden können – zur Archivierung, zum Postprocessing, zur Visualisierung und zum Datamining. Als erste Erweiterung hat SCAI die Kompression von Strömungsdaten in Angriff genommen. Bei meteorologischen Anwendungen wird der Gittertyp auf regelmäßige Dreiecksgitter und auf verdünnte gaussianische Gitter erweitert. Damit kann GRIBZip auch die GRIB-Daten anderer europäischer und amerikanischer Wetterdienste verarbeiten.

Patente

FEMZIP ist patentiert; für GRIBZip läuft ein Antrag zur Erteilung eines Patents.

Kunden

Deutscher Wetterdienst (GRIBZip) und mehrere Kunden in der Automobilbranche (FEMZIP).

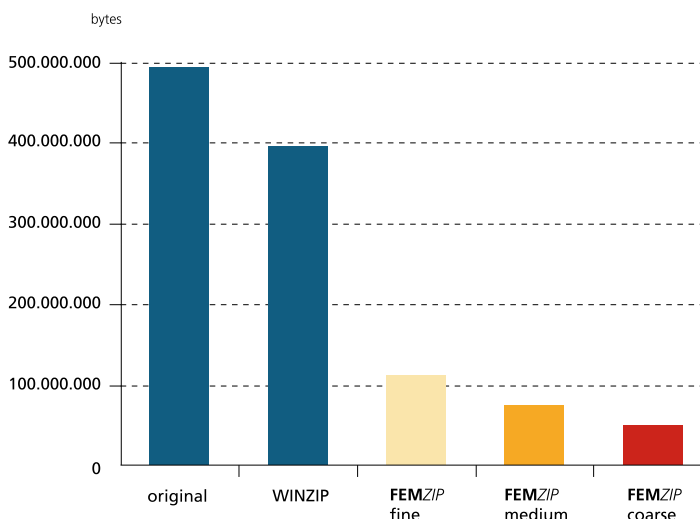
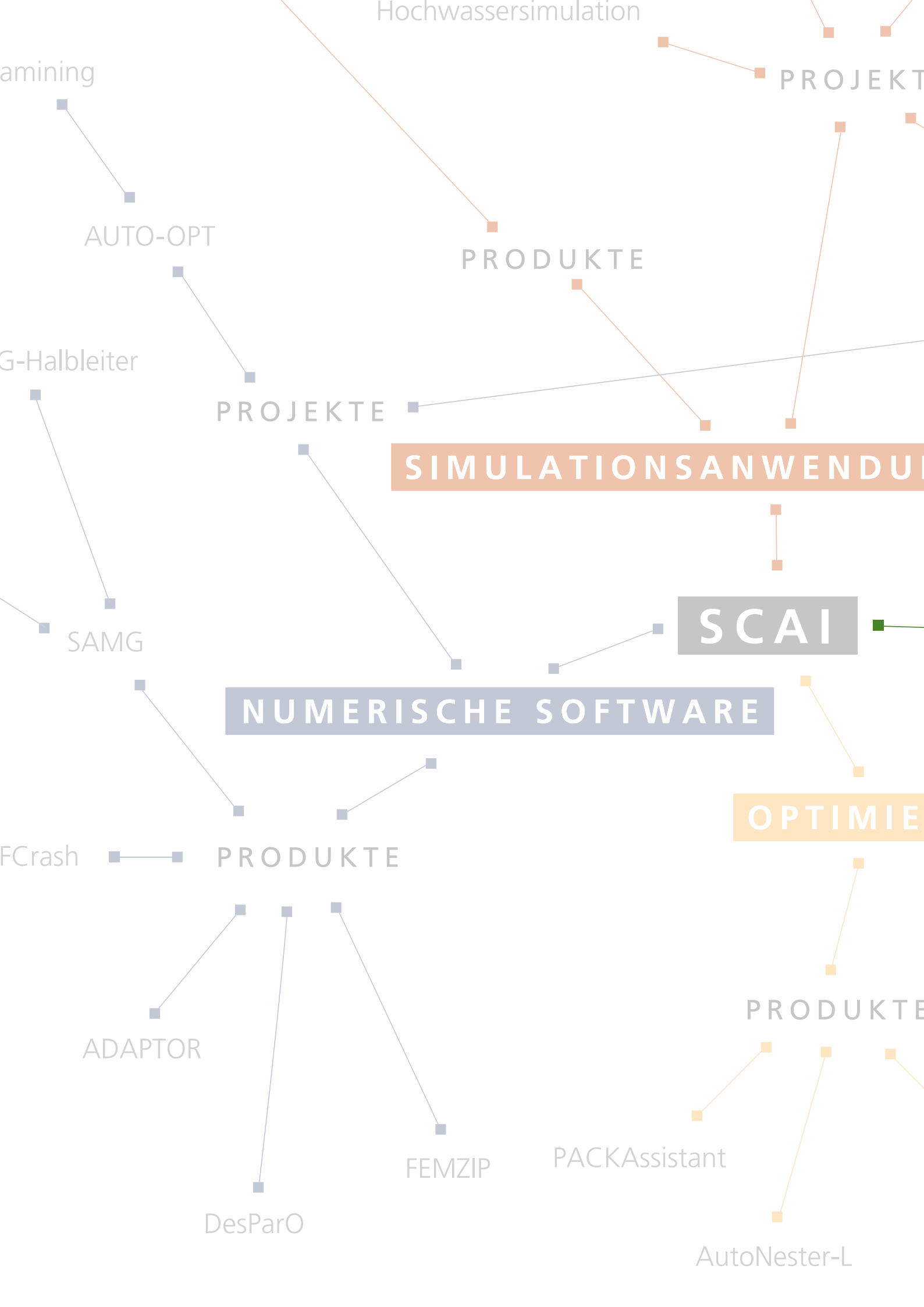
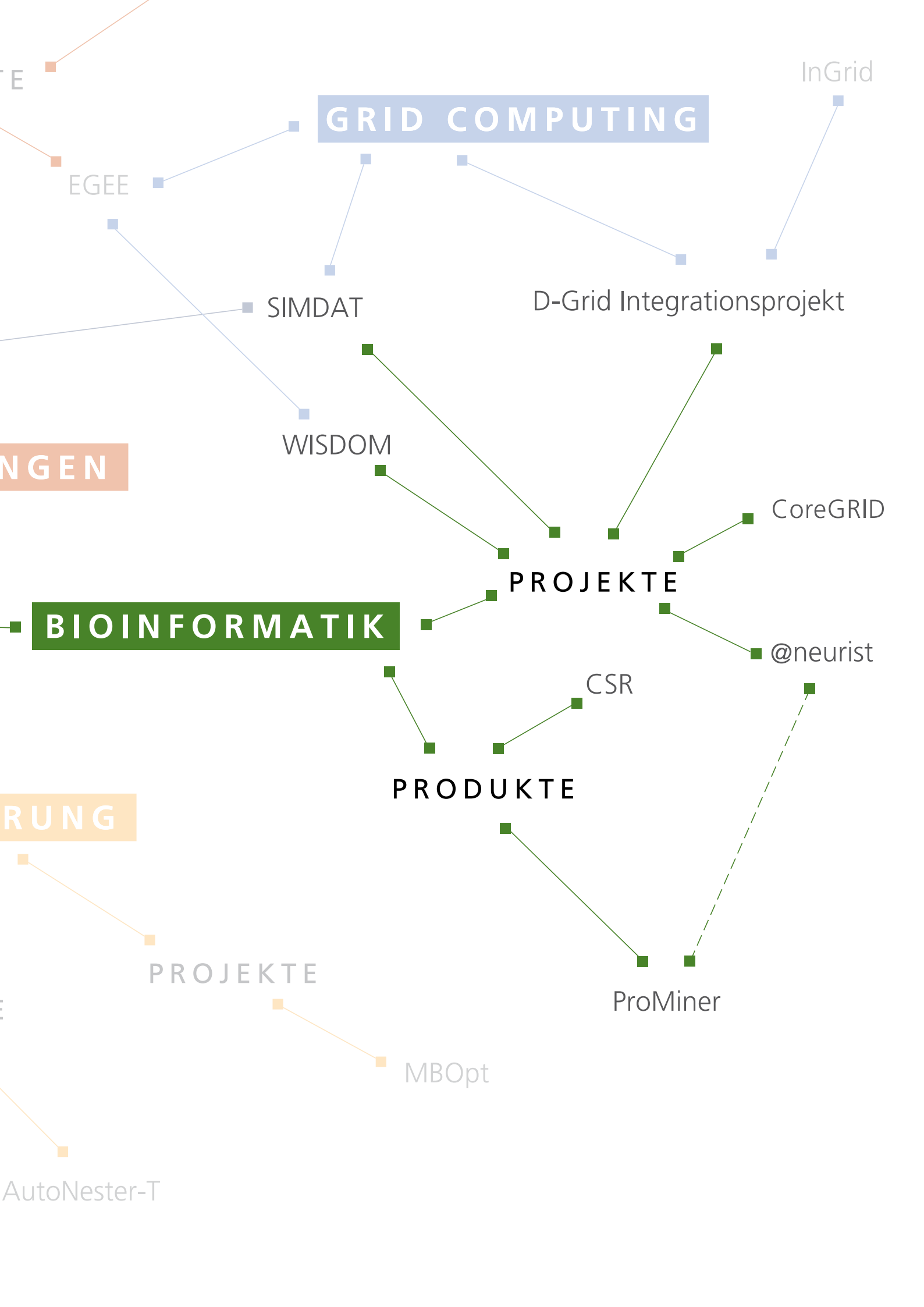


Bild 3: Datenkompression durch FEMZIP im Falle feiner, mittlerer und grober Genauigkeit, Vergleich mit dem Standard-Kompressionstool WINZIP





Situation

Moderne Biotechnologie und moderne Pharmaforschung sind heute ohne Unterstützung durch Computer kaum mehr vorstellbar. Gründe dafür sind:

- die exponentiell wachsende Datenflut in der modernen, molekularen Biologie, der Genomforschung sowie der Wirkstoffforschung,
- das immer stärkere Zusammenwachsen von Biologie, Medizin, Chemie, Pharmakologie und Toxikologie und die daraus erwachsende Notwendigkeit, über die Grenzen dieser Domänen hinweg allgemeingültige Modelle zu etablieren,
- die Notwendigkeit, zwischen experimenteller Forschung und empirischem Wissen auf der einen Seite und abstrahierten, theoretischen Ansätzen auf der anderen Seite zu vermitteln und vorhandenes Wissen für die Vorhersage neuer Wirkstoffe und ihres pharmakologischen Verhaltens zu nutzen.

Die Anwendungen mathematisch-informatischer Methoden erstrecken sich dabei über den gesamten Pharma-Forschungsprozesses; von der Identifizierung von Targetmolekülen und ihrer Einordnung in pathophysiologische Prozesse bis hin zur statistischen Analyse von Screening-Daten und der Vorhersage potenzieller Wirksubstanzen.

Aufgrund des stark empirischen Charakters von Biologie und Medizin erfordern rationale Ansätze in der Wirkstoffforschung außerdem, dass das umfangreiche, vorhandene Wissen aus der Biologie und der Medizin für analytisch-prädiktive Zwecke (etwa im überwachten, maschinellen Lernen) aufbereitet wird. In diesem Zusammenhang wächst die Bedeutung formaler Wissensrepräsentationen (Ontologien) sowie moderner Verfahren der Informationsextraktion.

Die Sequenzierung des menschlichen Genoms und die Identifizierung und Kategorisierung der überwiegenden Zahl der menschlichen Gene hat eine spürbare Veränderung in der angewandten Life-Science-Informatik mit sich gebracht. Die Vorhersage von Genen und die Aufklärung ihrer Struktur treten hinter Verfahren der Struktur- und Funktionsaufklärung von Proteinen zurück; ganzheitliche Modelle für Krankheiten, welche die Genomstruktur, Genexpression und relevante pathophysiologische Prozesse berücksichtigen, treten ins Zentrum des Interesses der forschenden Pharmaindustrie. Die Angriffspunkte pharmazeutischer Wirksubstanzen sowie die von ihnen hervorgerufenen Effekte können nunmehr vor dem Hintergrund des gesamten

Genoms analysiert werden. Damit besteht erstmals die realistische Möglichkeit, Eigenschaften kleiner Wirkstoffmoleküle im Kontext biologischer Systeme zu modellieren. Kernelemente eines zukunftsweisenden, rationalen Wirkstoffentwurfs sind daher:

- Methoden der Identifizierung relevanter Eigenschaften kleiner Wirkstoffmoleküle auf Basis ihrer chemischen Struktur sowie die Nutzung dieser identifizierten Eigenschaften für die Vorhersage neuer, potenzieller Wirkstoffmoleküle,
- Extraktion und Repräsentation komplexer, empirisch beschriebener Zusammenhänge (etwa in der Toxikologie), die Ableitung von Gesetzmäßigkeiten (Beziehungen von Struktur und Wirkung) sowie die Nutzung dieser Information für die Vorhersage pharmakologischer Eigenschaften neuer, potenzieller Wirkstoffmoleküle und
- die Kombination wissensbasierter Ansätze (inklusive statistischer Modelle für empirische Beobachtungen) mit theoretischen, auf physikalischen Eigenschaften beruhenden Modellen (»first principle«) für die verbesserte Vorhersage spezifischer Wirksubstanzen im physiologischen Kontext (also spezifisch für Krankheiten, Organe und Anwendungsgebiete).

SCAI arbeitet zusammen mit Industriepartnern an wesentlichen Bereichen der mit dieser Zielsetzung verbundenen, wissenschaftlichen Fragen.

Lösungen

SCAI bietet Expertise und Lösungen in den Gebieten:

1. Angewandte Chemieinformatik

Hier bearbeiten wir Fragen der statistischen Analyse von Daten aus dem industriellen Screening von Wirkstoffmolekülen. Außerdem zielen unsere Forschungsarbeiten darauf ab, pharmakologisches Wissen, etwa aus Abbildungen chemischer Strukturen, zu extrahieren und biologisch-pharmakologische Effekte strukturellen Eigenschaften von Wirkstoffmolekülen zuzuordnen.

2. Informationsextraktion und Textmining

In diesem Themengebiet bearbeiten wir Methoden der Erkennung biologischer Objekte (»Entitäten«) wie Gen- oder Proteinamen sowie medizinischer und chemischer Begriffe (beispielsweise Krankheitsbezeichnungen und Handelsnamen von

Medikamenten) in gering strukturierten, wissenschaftlichen Texten. Darüber hinaus entwickeln wir neue Methoden der Extraktion semantischer Beziehungen zwischen biomedizinischen Objekten (Protein A interagiert mit Protein B). Künftige Forschungs- und Entwicklungsanstrengungen zielen darauf ab, Informationen zu den Beziehungen zwischen Wirkstoffmolekülen und ihren biologisch-pharmakologischen Effekten aus unstrukturierten Textdokumenten zu extrahieren.

3. Life Science Grid Computing

Die Heterogenität verschiedener Datenbanken in den Life Sciences macht die sinnvolle Verknüpfung und Integration von Daten und Informationen zu einer großen Herausforderung. SCAI entwickelt Lösungen mit moderner Grid-Computing-Technologie. Das Institut arbeitet intensiv daran, in biomedizinischen Service-Grids biologische, chemische und medizinische Daten und die dazu gehörenden Analysetools so zu integrieren, dass die Nutzer des Grids sie transparent und flexibel einsetzen können.

Perspektiven und Potenziale

Computerunterstützte Verfahren gewinnen in der forschenden Biotechnologie- und Pharmaindustrie ständig an Bedeutung. Obgleich mit der Sequenzierung des humanen Genoms ein Meilenstein in der Entwicklung der Life Sciences erreicht wurde, ist keinerlei Reduktion der Datenflut in den Life Sciences zu beobachten. Vielmehr stellt sich zunehmend das Problem der Integration von Daten mit vorhandenem, publizierten Wissen und das Problem der Analyse großer Datenmengen (durch Methoden des Datamining), die vor allem durch Methoden der funktionellen Genomanalyse erzeugt werden.

Für die Abteilung Bioinformatik eröffnet der Markt eine Aufteilung möglicher Kooperationsbereiche in zwei Felder. Erstens Software-Tools für die Lösung konkreter, scharf umrissener Probleme. Zweitens wissenschaftliche Projekte, deren Ziel auf die Analyse komplexer Probleme durch Kombination von wissenschaftlicher und analytischer Ansätze hinausläuft. Diese Projekte lassen sich nur in gemeinsamen Forschungs- und Entwicklungsarbeiten bearbeiten.

Beispiele für derartige Projekte kommen aus dem Textmining, wo wir uns spezifischen Fragen durch die Generierung spezialisierter Grammatiken annähern. Zukünftige Herausforderungen liegen vor allem in der Integration von Wissen aus unter-

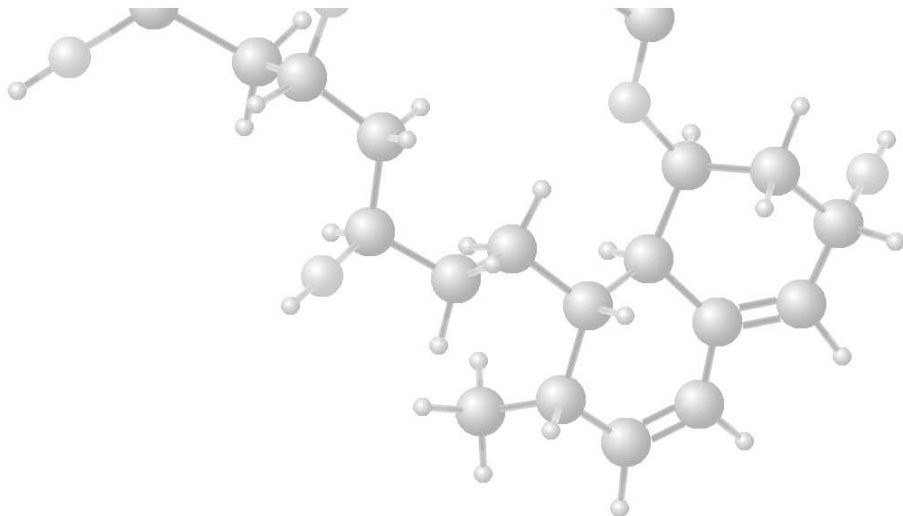
schiedlichen Wissensdomänen. Die Verknüpfung von Informationsextraktion biologischer Entitäten (wie Genen, Proteinen und Krankheiten) mit der Informationsextraktion chemischer Entitäten (Wirkstoffbezeichnungen und Strukturformeln) stellt hier eine der großen Herausforderungen für unsere zukünftige Arbeit dar. Die SCAI-Bioinformatik versucht hier, die Kompetenzen in der Chemieinformatik und der Informationsextraktion sinnvoll zusammenzuführen und die resultierende Synergie zu nutzen, um am Markt eine führende Position zu erlangen.

Kontakt

Dr. Martin Hofmann
Abteilungsleiter Bioinformatik
Tel.: 02241 / 14 - 2802
Fax.: 02241 / 14 - 2656
martin.hofmann@scai.fraunhofer.de

Dr. Marc Zimmermann
stellvertretender Abteilungsleiter
Tel.: 02241 / 14 - 2276
Fax.: 02241 / 14 - 2656
marc.zimmermann@scai.fraunhofer.de

Maschinelle Erkennung chemischer Strukturformeln



Aufgabe

Typisch für die Chemie ist die Kommunikation chemischer Information durch Trivialnamen («Aspirin» oder «Jasmin») und nomenklatur-basierte Ausdrücke (IUPAC-Bezeichnungen). Weitaus häufiger wird chemische Information jedoch mittels graphischer Strukturdarstellungen kommuniziert. Leider sind solche Strukturdarstellungen beinahe ausschließlich in Bildformaten wie JPEG oder TIFF vorhanden und jede begleitende, chemische Annotation fehlt. Das ist verwunderlich, denn die Bilddaten werden in der Regel mit Zeichenprogrammen erstellt, die im Prinzip simultan zur Zeichnung eine Repräsentation chemischer Moleküle in

den in der Chemieinformatik gebräuchlichen Formaten generieren können. Dennoch wird von dieser Möglichkeit in der Praxis der Publikation kaum Gebrauch gemacht. Insgesamt liegen wohl mehr als 90 Prozent aller chemischen Strukturinformationen in Abbildungen und nicht in Form computer-lesbarer Formate (SDF, molfile, SMILES und andere) vor.

Als Konsequenz hieraus müssen neue Einträge in chemische Datenbanken durch Nachzeichnen publizierter Strukturen per Hand und die simultane Übersetzung der Zeichnung in ein computer-lesbares Format generiert werden. Dieser Prozess ist teuer und fehlerbehaftet.

In der Vergangenheit hat es zwei

Versuche gegeben, das Problem der Rekonstruktion chemischer Strukturen aus Abbildungen mit Hilfe von Mustererkennungsprogrammen zu lösen: Kekulé und CLiDE. Nur im Falle von CLiDE resultierte aus den Forschungsarbeiten ein Software-Produkt; doch zeigt die Erfahrung, dass CLiDE nicht in der Lage ist, aus der Korrektur von Fehlern bei der Rekonstruktion zu lernen. CLiDE kann ohne Probleme auch nicht in komplexe Workflows eingebunden werden. Das Programm ist darüber hinaus seit seiner Veröffentlichung in der Mitte der 90er Jahre nicht weiter entwickelt worden.

Bild 1: Darstellung der Benutzeroberfläche von CSR (Chemical Structure Recognition). Links ist die Originalzeichnung und rechts wird die rekonstruierte Struktur zu sehen. Ausgehend von der Rekonstruktion können neue Eigenschaften berechnet werden (beispielsweise Masse, Zusammensetzung und dreidimensionale Gestalt)

Property	Value
Input image:	/home/marc/workspace/CSR
Output SDF:	/home/marc/workspace/CSR
Formula OASIS:	C2307 GNR.250
Number of Atoms/Bonds:	32 / 33
Number of Fragments:	1
InChI identifier:	InChI=1/C23H36O7/c1-4-1

Lösung

SCAI widmet sich seit mehr als zwei Jahren dem Problem der Rekonstruktion chemischer Strukturen aus Abbildungen. Aus den Forschungs- und Entwicklungsarbeiten resultierte unser System CSR, welches Methoden der Mustererkennung mit überwachten Lernverfahren kombiniert und damit einen neuen Weg bei der Lösung des Problems der Rekonstruktion chemischer Strukturen aus Abbildungen aufzeigt. Der Workflow von CSR besteht aus dem

- Pre-Processing, bei dem die Abbildungen identifiziert und äquilibriert werden,
- einem Vektorisierungsprozess, bei dem die Graphen aus dem Bild nachgezeichnet werden,
- sowie der eigentlichen Rekonstruktion des chemischen Graphen, bei der Informationen wie Chiralität von Bindungen und Buchstaben oder Buchstabenkombinationen (beispielsweise Superatome) rekonstruiert werden.

Die wichtigsten Eigenschaften des Programms sind:

- Konversion von Darstellungen chemischer Strukturen in verschiedenen BITMAP-Formaten (BMP, GIF, PNG...) in chemische Datenformate (SMILES, SDF...)

- Rekonstruktion der Bindungsart und des Bindungstyps (einfach-, doppel- und dreifach-Bindung; chirale Bindung)
- Erkennung von Superatomen und ihre Konvertierung in Strukturdarstellungen
- Graphische Benutzeroberfläche für manuelle Korrekturen
- Qualitätsbewertungsalgorithmen für eine Güteabschätzung des Rekonstruktionsprozesses
- Vollautomatischer Modus zum Batch-Processing
- Trainingsmöglichkeiten (die Software lernt durch Beispielläufe und menschliche Intervention)
- Weit gehende Anpassungs- und Parameterisierungsmöglichkeiten
- Eingebaute »chemische Intelligenz« (physikalisch-chemische Regeln zur Wertigkeit von Bindungen werden automatisch geprüft)

Perspektiven

In der pharmazeutischen Chemie werden interessante Informationen häufig als Kombination aus Strukturdarstellungen und der Beschreibung biologischer Aktivitäten im Text kommuniziert. CSR ergänzt die Textmining-Software »ProMiner« und erschließt erstmals die pharmazeutische Chemie für Ansätze der automatisierter Informationsextraktion.

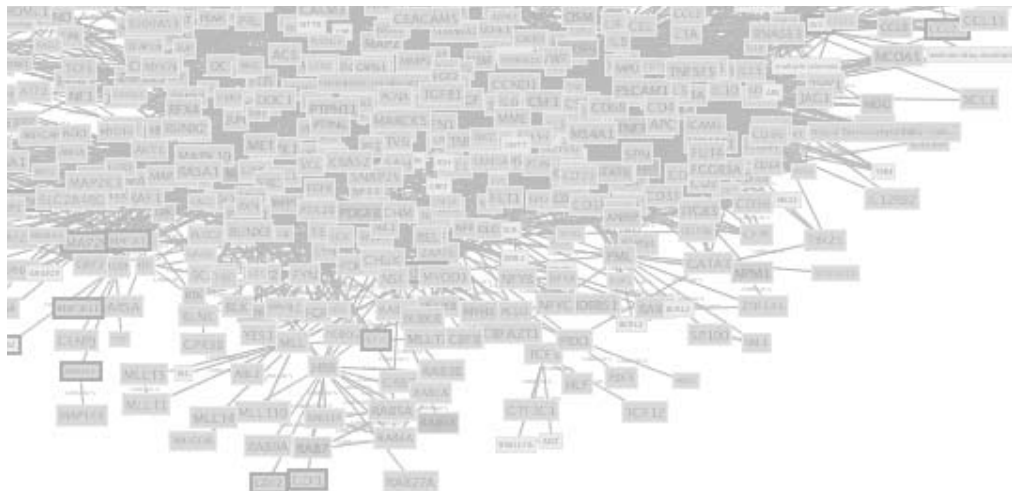
Technische Spezifikation

CSR beruht auf Plattform-unabhängigen JAVA Bibliotheken. CSR läuft daher sowohl auf UNI/Linux als auch auf Microsoft-Windows-Systemen. Die Fähigkeiten zum Batch-Processing des Programms erlauben es auch, CSR ohne großen Aufwand in Workflow-Engines und Grid-Infrastrukturen zu integrieren.

Kontakt

Dr. Marc Zimmermann
 Tel.: 02241 / 14 - 2276
 Fax.: 02241 / 14 - 2656
 marc.zimmermann@scai.fraunhofer.de

Erkennung von Gen- und Proteinamen in wissenschaftlichen Texten



Aufgabe

Die Flut an wissenschaftlichen Publikationen (Journal-Publikationen; Patente) erlaubt es dem einzelnen Wissenschaftler kaum noch, die Entwicklung eines Forschungsgebietes ohne elektronische Hilfsmittel zu verfolgen. Neue Methoden der automatischen Informationsextraktion aus Texten ermöglichen es nun, komplexe Zusammenhänge aus unstrukturierten Texten zu extrahieren und in kondensierter, strukturierter Form aufzubereiten.

Lösung

ProMiner ist eine Software zur Erkennung biologischer Bezeichnungen (Gen- und Proteinamen) in wissenschaftlichen Texten.

ProMiner adressiert mehrere fundamentale Probleme bei der Erkennung biomedizinischer Entitäten in wissenschaftlichen Texten:

- Identifizierung von Speziespezifischen Gen- und Proteinamen,
- Bild von Synonymen auf Referenzbezeichnungen,
- Kontext-abhängiger Ausschluß von Mehrdeutigkeiten (Disambiguierung) biomedizinischer Terme,
- Auflösung domänenspezifischer Ungenauigkeiten bei der Nutzung biomedizinischer Namen,
- Auflösung sogenannter »Multi-Word-terms«
- sowie Auflösung von Akronymen.

In einer internationalen Studie, dem BioCreAtlV E (critical assessment of text mining in biology) -Wettbewerb, bewies ProMiner seine Qualität bei der Erkennung biomedizinischer Entitäten in Texten. In einem hoch kompetitiven Umfeld konnte sich ProMiner im Vergleich gegen acht weitere Tools durchsetzen. Obwohl

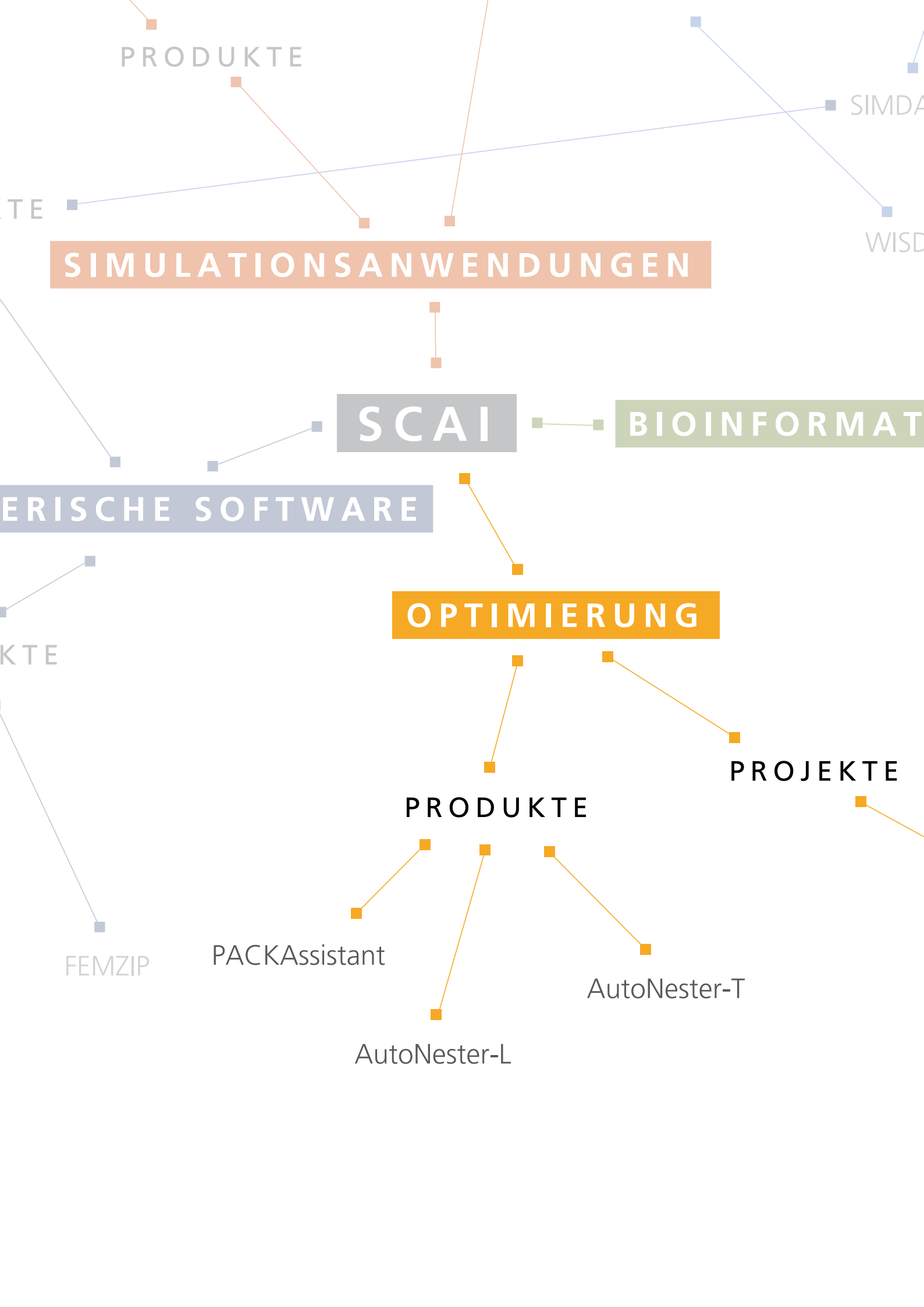
ProMiner simultan die Gen- und Proteinamen dreier verschiedener Spezies (Maus, Drosophila und Hefe) in wissenschaftlichen Texten erkennen musste, konnte die Software in zwei von drei Szenarien die besten Resultate erzielen (siehe Tabelle).

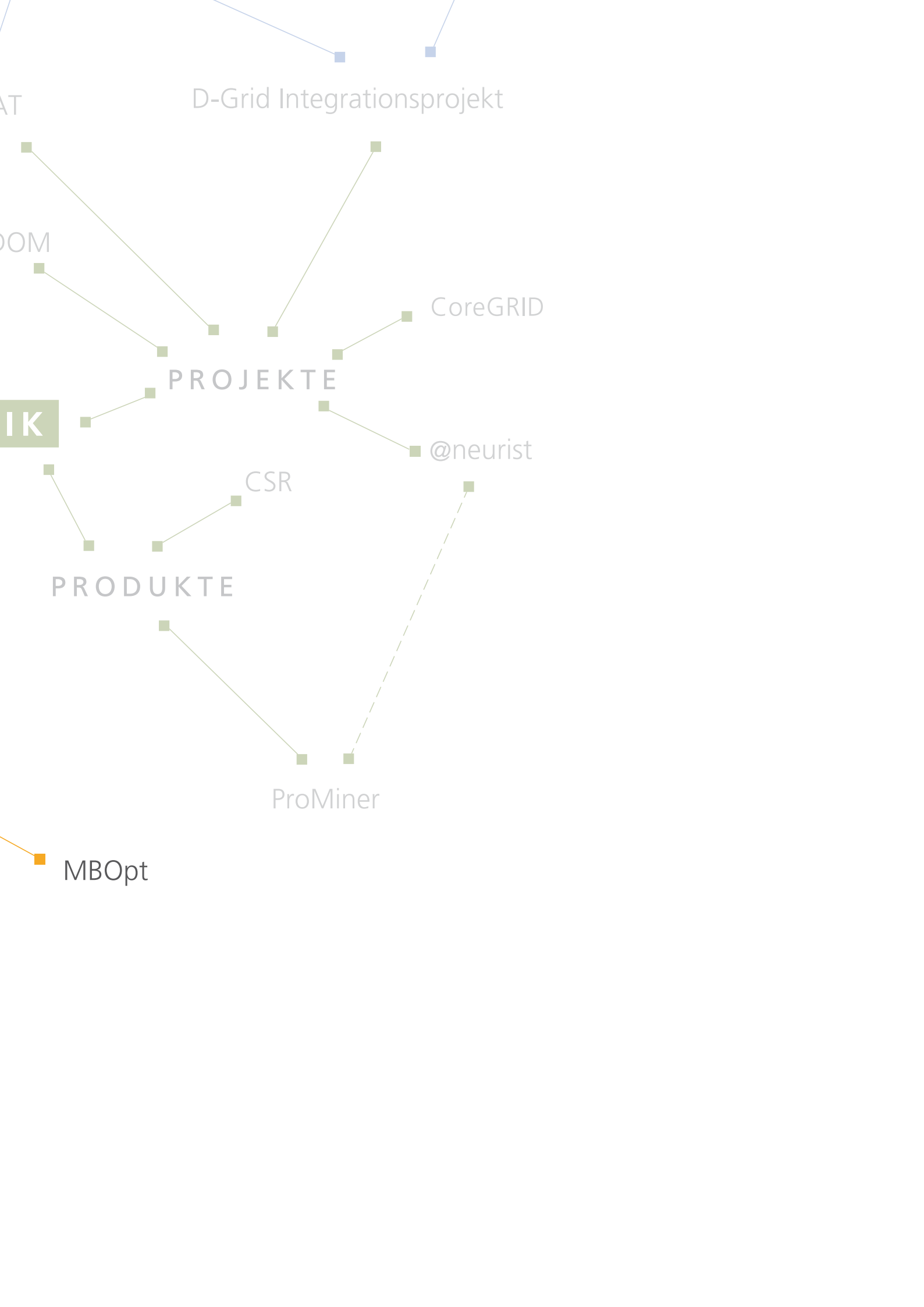
Perspektiven

Inzwischen existieren Gen- und Proteinamensverzeichnisse für den Menschen (*homo sapiens*), die Ratte (*Rattus norvegicus*), die Maus (*Mus musculus*) sowie die Fruchtfliege (*Drosophila melanogaster*) und die Hefe (*Saccharomyces cerevisiae*). Weitere Wörterbücher sind in Planung oder sie werden gerade fertig gestellt (zum Beispiel für den pflanzlichen Modellorganismus *Arabidopsis thaliana*).

BioCreAtlV E Evaluation

	Maus		Fliege		Hefe	
ProMiner liefert in zwei von drei Szenarien den Benchmark für das beste automatische System im internationalen Wettbewerb »BioCreAtlV E«.	bestes automatisches System	ProMiner System	bestes automatisches System	ProMiner System	bestes automatisches System	ProMiner System
	0,79	0,79	0,82	0,82	0,92	0,9





Situation

Im Arbeitsgebiet Optimierung untersucht SCAI schwierige Fragen der Optimierung in technischen und industriellen Anwendungen. Die betrachteten Aufgaben gehören üblicherweise zur Klasse der sogenannten NP-harten Probleme, das heißt ein Verfahren zur optimalen, zeiteffizienten Lösung der Probleme ist nicht bekannt. Derartige Problemstellungen sind äußerst weit verbreitet und nahezu in jedem Anwendungsfeld und jeder Wirtschaftsbranche anzutreffen. Bekannte Beispiele sind:

- die optimale Einsatzplanung von Ressourcen (Personal, Maschinen, Kapital),
- Minimierung von Produktionszeiten (Reihenfolgeplanung),
- Minimierung von Transportkapazitäten (Wege, Transportmittel),
- Minimierung von Baugrößen (VLSI-Layout),
- Optimierung von Packdichten (Containerbeladung, Verschnittminimierung),
- sowie Optimierung von Anordnungen (Bebauungsplanung, Bauteilanordnung).

Lösungen

Kommerzielle Lösungen werden auf Grund der Komplexität der zu lösenden Probleme häufig nicht angeboten oder sind technisch nicht ausgereift, so dass sie keine hinreichende Marktakzeptanz finden. Die Abteilung Optimierung versteht ihre Aufgabe darin, in der Forschung gewonnene Methoden der Optimierung auf industrielle Probleme anzuwenden und für die konkrete Anwendung weiterzuentwickeln. Dabei werden die vom Anwender definierten Probleme in höchster Praxistreue mit allen vorgegebenen Bedingungen untersucht und exakt angepasste Verfahren zu deren Lösung erarbeitet. Durch die langjährige Erfahrung bei der Anwendung klassischer Optimierungsmethoden auf unterschiedliche Aufgaben hat sich SCAI ein vielschichtiges Wissen über die Einsatzmöglichkeiten und Wirksamkeit der verschiedenen Verfahren erarbeitet. Die angewandten Methoden sind recht verschieden voneinander und ihre Auswahl ist abhängig vom konkreten Problem. Zum Einsatz kommen exakte und heuristische Optimierungsmethoden (Branch and Bound/Cut/Price, Simulated Annealing, Sintflut, Threshold Accepting, Record-to-Record Travel, Gene-

tische Algorithmen, Simulated Trading, Greedy, Tabu Search, Simplex und andere).

Ein besonderer Schwerpunkt der Arbeiten liegt in der Lösung von Verschnitt- und Packungsproblemen. SCAI bietet hier außer der Entwicklung individueller Lösungen auch Standard-Softwarepakete an, die sich bereits seit einigen Jahren im industriellen Einsatz befinden. Diese hat die SCAI-Optimierung weiter verbessert und neue Randbedingungen sowie die Behandlung neuer Produktionstechnologien integriert.

Zudem erschließt die Abteilung für Optimierung stetig neue Anwendungsfelder. Für die Produktionsplanung in der textilverarbeitenden Industrie hat SCAI eine Software entwickelt, die errechnet, wie die bei einem Hersteller eingehenden Bestellungen kostenoptimal in verschiedenen Teilaufträgen auf die verfügbaren Maschinen zu bringen sind. Unterschiedliche Bedingungen wie Kapazitäten und Beschränkungen von Maschinen, Kosten für Produktionsanlagen und Personal, oder Toleranzen für erlaubte Über- oder Unterproduktion können in die Optimierungsrechnung einbezogen werden. Diese Software bietet SCAI als Standardprodukt an. Sie kann an andere oder erweiterte Randbedingungen angepasst werden. In die gleiche Richtung wie diese Entwicklung zielt ein Projekt zur langfristigen Belegungsplanung und -optimierung von Maschinen in der Automobilherstellung, das auf den folgenden Seiten vorgestellt wird.

Zur Lösung dreidimensionaler Anordnungsprobleme hat SCAI das Produkt **PACKAssistant** entwickelt, das Container optimiert befüllen kann (Seite 71 f). Dreidimensionale Anordnungsprobleme treten in unterschiedlichen industriellen Anwendungsbereichen auf, bei denen der Willen zur möglichst guten Ausnutzung gegebener räumlicher Kapazitäten (zum Beispiel Laderäume, Container, Transportboxen) und damit verbundener Einsparung von Kosten (zum Beispiel Lagerkosten, Transportkosten) hohe Anforderungen an die Packdichte gegebener Teile (zum Beispiel Maschinenteile, Stückgut) stellt.

Auch auf Grund der zunehmenden Automatisierung bei der Bepackung von Laderäumen steigt die Nachfrage nach automatischer Software zur Lösung der zugehörigen Anordnungsprobleme. Da die Probleme mathematisch nachweisbar äußerst schwierig lösbar sind, liegen in ihrer industriell akzeptierten Lösung noch viele Herausforderungen.

Perspektiven und Potenziale

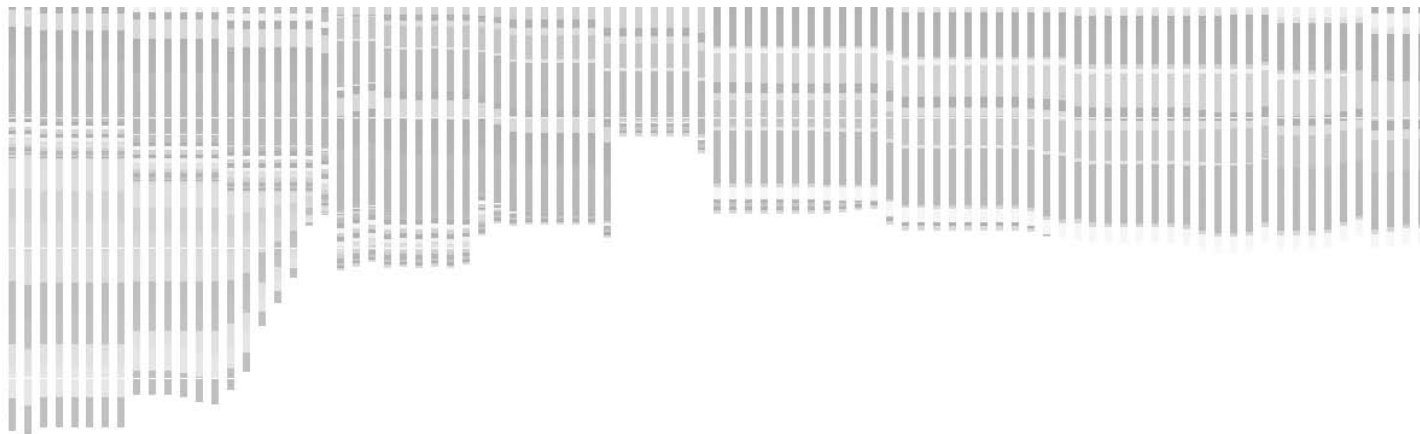
Viele, auch unterschiedlich klingende Probleme aus der Produktion und der Logistik sind eng miteinander verwandt. Oft lassen sich diese Probleme mathematisch ähnlich formulieren und lösen. Grundlegende Lösungstechniken, die für ein Problem entworfen wurden, können häufig für die Lösung eines anderen Problems weiterentwickelt werden. SCAI verfügt über einen Werkzeugkasten unterschiedlicher Optimierungsverfahren, die auf eine große Klasse unterschiedlicher Aufgaben anwendbar sind. Vorhandene Kompetenz und Erfahrung bei der Konzeption von Lösungsalgorithmen für schwierige kombinatorische Optimierungsprobleme kann von den erfahrenen Fachleuten am Institut in der Regel schnell und problemlos auf andere Anwendungsgebiete übertragen werden und so gewinnbringend zur Lösung unterschiedlicher Optimierungsprobleme genutzt werden. Das Angebot der Abteilung an Industrieunternehmen und öffentliche Einrichtungen umfasst das gesamte Gebiet der Planung, Produktion und Logistik. Unsere Dienstleistungen umfassen individuelle Beratung, Entwicklungskooperationen, Auftragsentwicklungen oder Anpassung und Integration von Optimierungssoftware.

Im folgenden stellt die Abteilung Optimierung aktuelle Optimierungsprojekte vor.

Kontakt

Dr. Ralf Heckmann
Abteilungsleiter Optimierung
Tel.: 02241 / 14 - 2810
Fax.: 02241 / 14 - 2656
ralf.heckmann@scai.fraunhofer.de

MBOpt – Optimierung der Maschinenbelegung



Aufgabe

In der Automobilindustrie zählt die Fertigung von Karosserieteilen zu den investitionsintensivsten Prozessen; dabei werden einmal gewählte Fertigungstechniken auf lange Sicht beibehalten. Aufgrund dessen kommt der Kapazitätsplanung über zehn bis 15 Jahre eine außerordentlich hohe Bedeutung zu.

Die Karosserieteile (zum Beispiel Front- und Heckklappen, Türen, Dächer) werden in Presswerken (Bild 1) aus Blech hergestellt. Die Pressenanlagen formen das Blech mithilfe von Werkzeugsätzen um und schneiden es; anschließend werden die Teile zur Rohkarosserie zusammengefügt.

Der Vielzahl benötigter Werkzeugsätze steht dabei eine Menge möglicher Pressenanlagen gegenüber. Daraus ergibt sich eine

große Zahl von Zuordnungsmöglichkeiten der Werkzeugsätze zu den Anlagen. Zusätzliche, komplizierte Bedingungen führen dazu, dass die Belegungsplanung für einen Menschen kaum noch überschaubar ist.

Im Auftrag der BMW AG hat SCAI eine Software für die Zuordnung der Werkzeugsätze zu den Pressenanlagen unter Minimierung der Gesamtkosten entwickelt. Dabei werden auch Aspekte der gleichmäßigen Kapazitätsausnutzung berücksichtigt.

Lösung

Zu den fertigungstechnischen Restriktionen (Anforderungen des Werkzeugsatzes an die Anlage versus Eigenschaften der Anlage) und der Vorgabe, die Kapazitäten einzuhalten, ist eine Vielzahl zusätzlicher Bedingungen zu erfüllen. Ziel dabei ist eine gewisse Kontinuität im Fertigungsprozess, um eine ablauforganisatorisch umsetzbare Lösung zu erhalten.

Die Bewertung eines Belegungsszenarios erfolgt unter Verwendung einer komplizierten Kostenfunktion, in die neben Fertigungs- und Logistikkosten auch die Kosten für Anlagenwechsel und Fremdbezug eingehen.

Aufgrund der Schwierigkeit des Problems (mathematisch: NP-schwer) kann davon ausgegangen werden, dass es kein Verfahren gibt, welches das Problem in praxisrelevanter

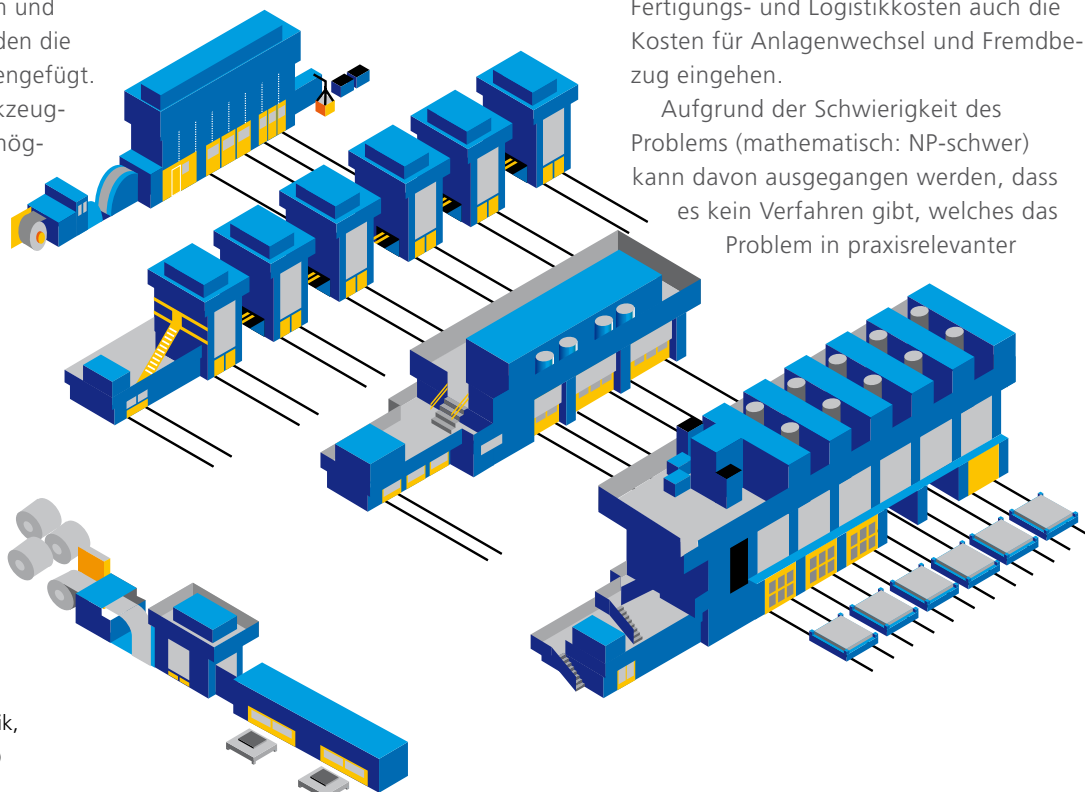


Bild 1: Schematische Darstellung eines Presswerks (Quelle: Schuler GmbH, Handbuch der Umformtechnik, Springer Verlag, Berlin, 1998, S. 390)

Laufzeit optimal löst. Die vom Fraunhofer SCAI entwickelte Software verwendet ein heuristisches Lösungsverfahren, das an die individuellen Problemeigenschaften angepasst ist und so eine hohe Optimierungsqualität sicherstellt.

Ergebnisse

Für den gesamten Planungszeitraum wird eine monatsweise Zuordnung der Werkzeugsätze zu den Pressenanlagen berechnet, die alle Bedingungen erfüllt (Bild 2).

Neu ist die vollständige Bewertung der Kosten: Bisher konnte der Planer bei BMW neben den komplexen technischen Gesichtspunkten kaum wirtschaftliche Aspekte berücksichtigen.

Durch die Einbeziehung neuer, bisher nicht betrachteter Belegungsalternativen findet die Software Lösungen, in denen die internen Anlagen hochgradig und gleichmäßig ausgelastet sind und teure externe Fertigungskapazität eingespart wird.

Die Software trägt erheblich zur Verringerung des Planungsaufwands bei und ermöglicht damit eine höhere Flexibilität im Planungsprozess.

Perspektiven

Eine im Auftrag entwickelte Erweiterung der Software bezieht auch die frühe Phase des Produktentstehungsprozesses in die Planung mit ein. Zu diesem Zeitpunkt ist die Entscheidung, welche der mög-

lichen Herstellalternativen für ein Pressteil gewählt wird, noch nicht gefallen. Deshalb stehen verschiedene Werkzeugsätze für die Fertigung zur Auswahl. Mithilfe unserer Software kann bei der Entscheidung für eine Herstellalternative bereits die langfristige Kapazitätsentwicklung mit berücksichtigt werden.

Das Problem der Zuordnung von Aufgaben zu Anlagen tritt nicht nur im Zusammenhang mit Fertigungsprozessen auf. In verallgemeinerter Form findet man es zum Beispiel auch bei der Betrachtung von Transportproblemen: gegeben sind eine Menge von Warenhäu-

sern mit einem Angebot an einer Ware sowie eine Menge von Kunden, die einen bestimmten Bedarf an der Ware haben. Zu bestimmen ist, welcher Kunde von welchen Warenhäusern zu beliefern ist, so dass die Summe der Transportkosten minimiert wird.

Kontakt

Dipl.-Wirtschaftsmathematikerin
 Lydia Franck
 Tel.: 02241 / 14 - 2563
 Fax.: 02241 / 14 - 2656
 lydia.franck@scai.fraunhofer.de

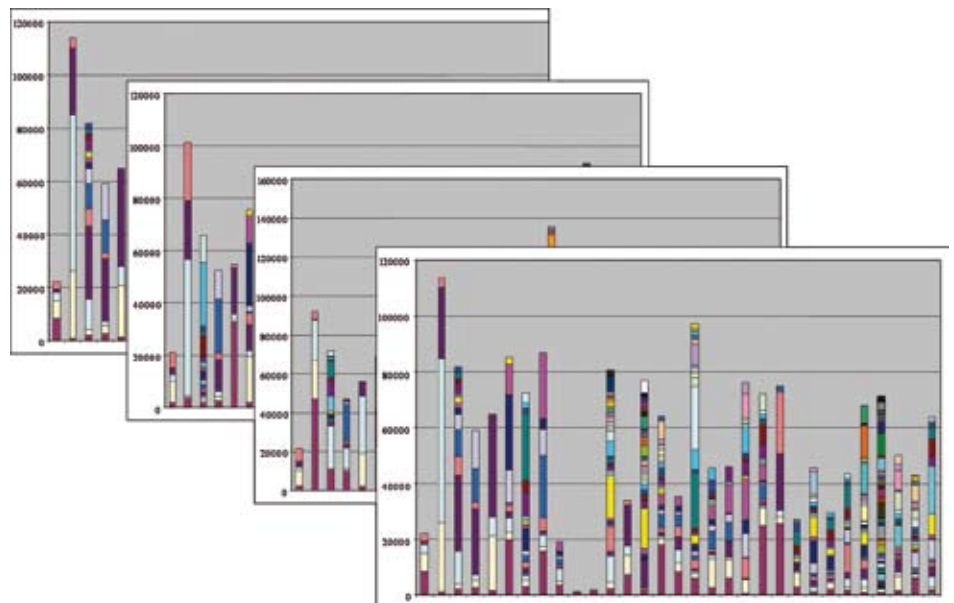
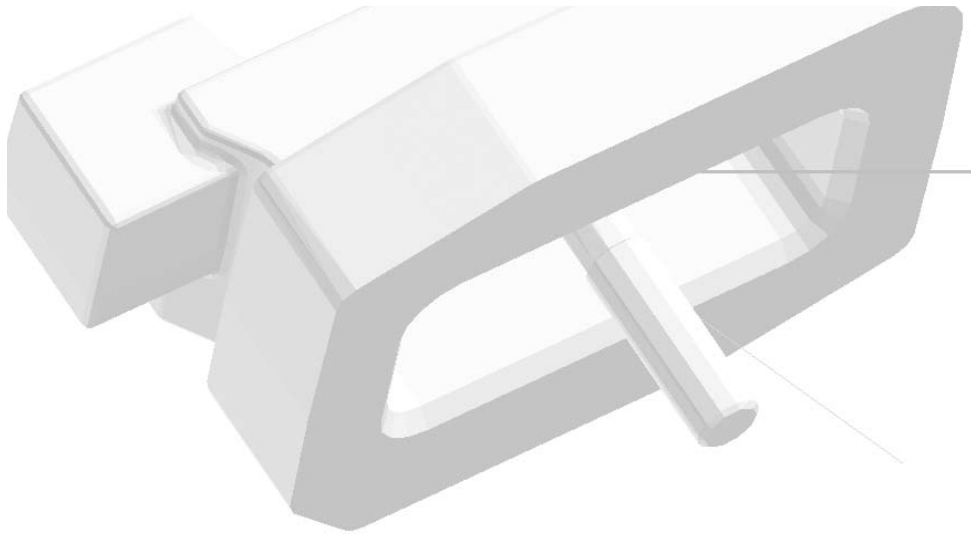


Bild 2: Ausschnitt aus einer optimierten Belegung

PackAssistant – Optimierte Befüllung von Behältern



Aufgabe

Dem effizienten Transport von Gütern kommt weltweit eine immer größere und bedeutendere Rolle zu. Die Menge transportierter Güter nimmt ständig zu, in Deutschland um circa 50 Prozent in den letzten zehn Jahren. Gleichzeitig werden Transporte durch knapp werdende Infrastruktur (beispielsweise Wartezeiten durch Staus und Baustellen), steigende Energiepreise, wachsende umweltpolitische Auflagen und Besteuerungen zunehmend teurer.

Ein wichtiges Ziel von Unternehmen ist die Senkung von Transport- und Logistikkosten. Der Einsatz von Software zur Planung und Steuerung von Transportvorgängen ist bei großen Unternehmen mittlerweile zum Alltag geworden. Eine weitere Möglichkeit, die Effizienz von Transportvorgängen zu verbessern, ist eine Erhöhung der Ausnutzung des vorhandenen Transportvolumens. SCAI entwickelt zu diesem Thema eine Software namens PackAssistant, die sich mit der Packung von hochgradig komplexen, dreidimensionalen Teilen in Transportbehältern beschäftigt. Ziel ist es, eine möglichst hohe Auslastung des Behälters bei gleichzeitiger Beachtung verschiedener Randbedingungen, etwa manuelle Be- und Entladbarkeit oder Gewichtsrestriktionen zu erreichen. Für die Planung von Transporten ist die Behälterauslastung eine wichtige Kenngröße.

Das Transportproblem tritt besonders deutlich in der intensiv arbeitsteiligen, weit verstreuten Produktion in der Automobilindustrie auf. Für die Montage einer Fahrzeugreihe müssen viele, unterschiedlich geformte Teile in Behältern unterschiedlicher Größe und Typs vom Zulieferer zur Montagehalle transportiert werden.

Lösung

Aufgaben der 3D-Packungsoptimierung treten in vielen Bereichen der Industrie auf, in denen der Wunsch besteht, Transport-, Lager- und Handlingkapazitäten zu reduzieren, um damit Kosten zu sparen. Gängige Praxis in vielen Unternehmen ist es, diese Packungsprobleme trotz fortschreitender Auto-

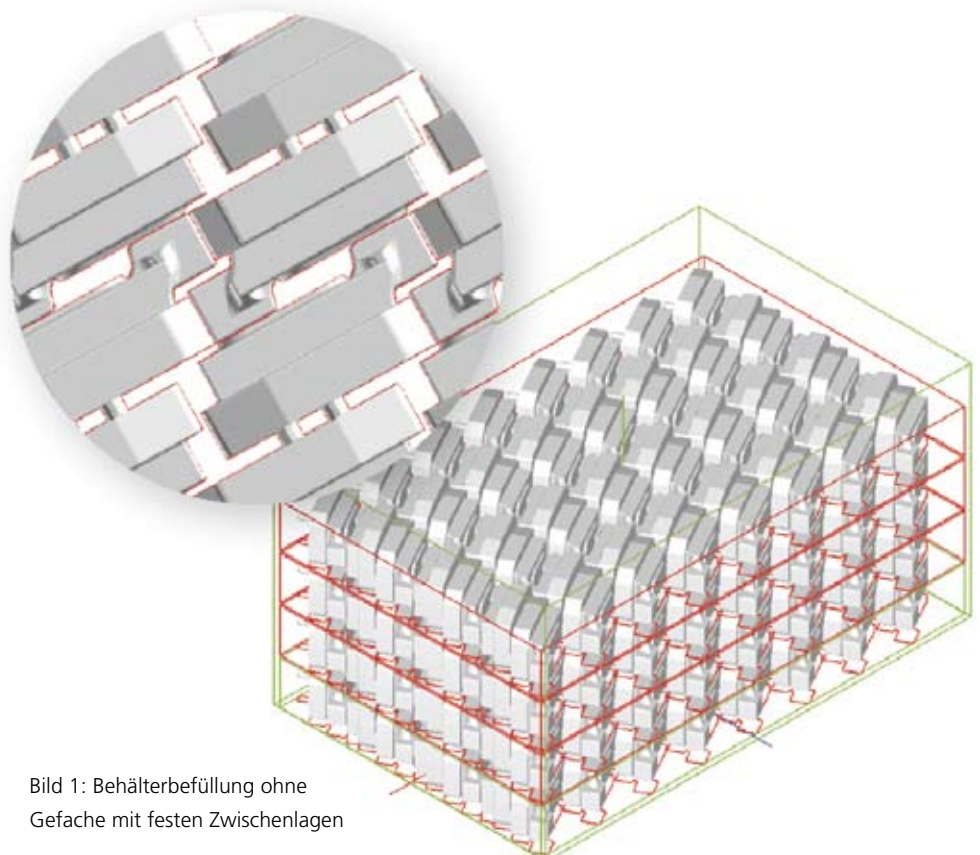


Bild 1: Behälterbefüllung ohne Gefache mit festen Zwischenlagen

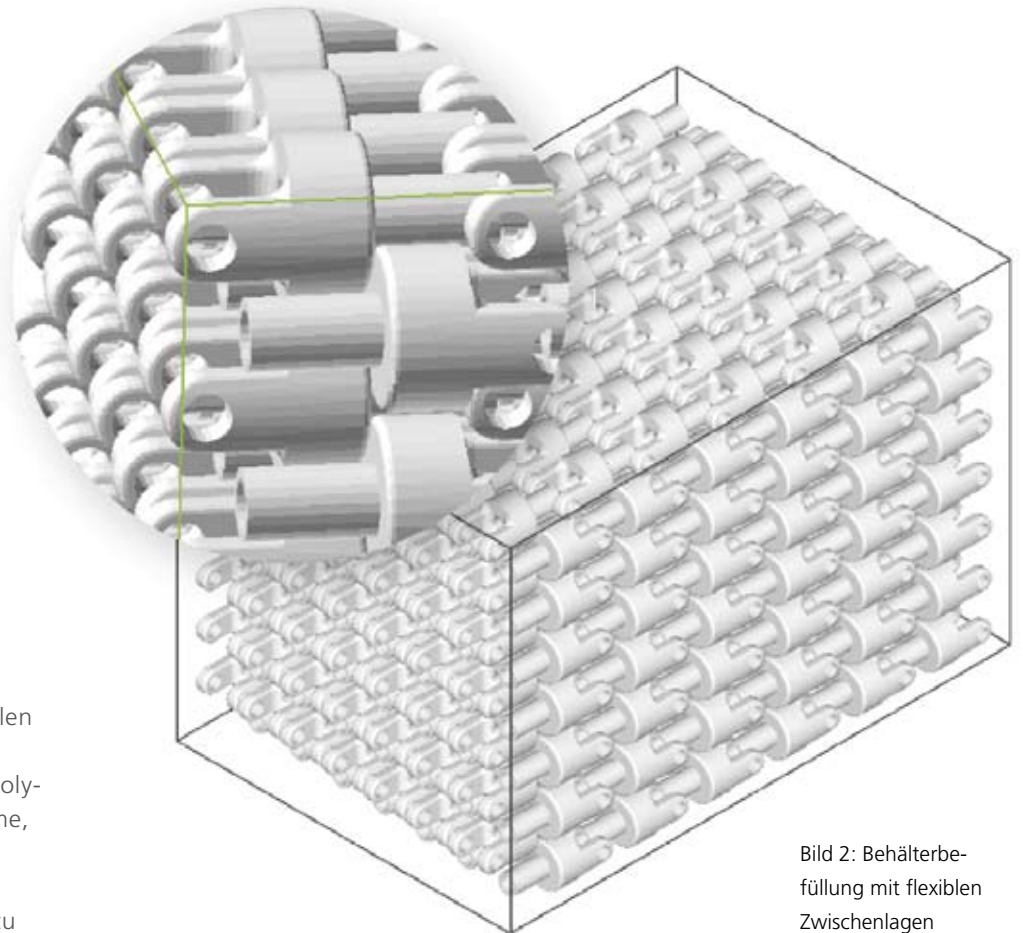


Bild 2: Behälterbe-
füllung mit flexiblen
Zwischenlagen

mathematisierung immer noch manuell zu lösen. Aus mathematischer Sicht zählen Packungsprobleme zur Klasse der sogenannten NP (Non-deterministic Polynomial-time hard) -schweren Probleme, das heißt, es existiert kein Verfahren, um eine nachweisbar optimale Lösung in vertretbarer Zeit berechnen zu können. Man ist daher auf die Entwicklung neuer Verfahren angewiesen, die in vertretbarer Zeit möglichst gute Lösungen berechnen. Abhängig von den Bedingungen des Packungsproblems sind unterschiedliche Lösungsverfahren notwendig. Aufgrund ihrer Komplexität kann man sie oft nur mit Hilfe von Heuristiken lösen. Heuristiken nutzen Eigenschaften eines speziellen Problems, um eine Lösung zu erzeugen.

Für den häufig auftretenden Fall quader- oder zylinderförmiger Teile (etwa Kartons und Rohre) gibt es bereits kommerzielle Lösungen mit unterschiedlichen Eigenschaften und unterschiedlicher Qualität.

Die Software PackAssistant kann automatisch Anweisungen für das Packen beliebig geformter polyedrischer Teilegeometrien in quaderförmigen Behältern erzeugen. Die Anweisungen zeigen, wie die einzelnen Teile im Behälter platziert werden müssen, um sein Volumen möglichst gut auszunutzen. Insbesondere die effiziente Packung komplexer Teile ist eine aktuelle Frage in der Forschung und eine besondere

Herausforderung in der industriellen Anwendung.

Ergebnisse

Die BMW Group und Audi, setzen die Software für die Planung des Transports neuer Teile und für die Überprüfung der Behälterauslastung bestehender Teile ein. Durch die Kenntnis einer optimalen Behälterauslastung konnte man in einigen Fällen feststellen, dass es sich lohnt, für ein bestehendes Teil einen neuen Behälter und neues Verpackungsmaterial anzuschaffen.

Die MVI-Solve-IT in München, Entwicklungs- und Vertriebspartner des SCAI, hat eine leicht zu erlernende, grafisch gestaltete Benutzerschnittstelle entwickelt und sorgt mit verschiedenen Datenschnittstellen für eine leichte Integration in Systeme für das Product Data Management (PDM).

Mit Hilfe einer Softwarelösung für dieses Packungsproblem lassen sich bereits während der Entwicklung neuer

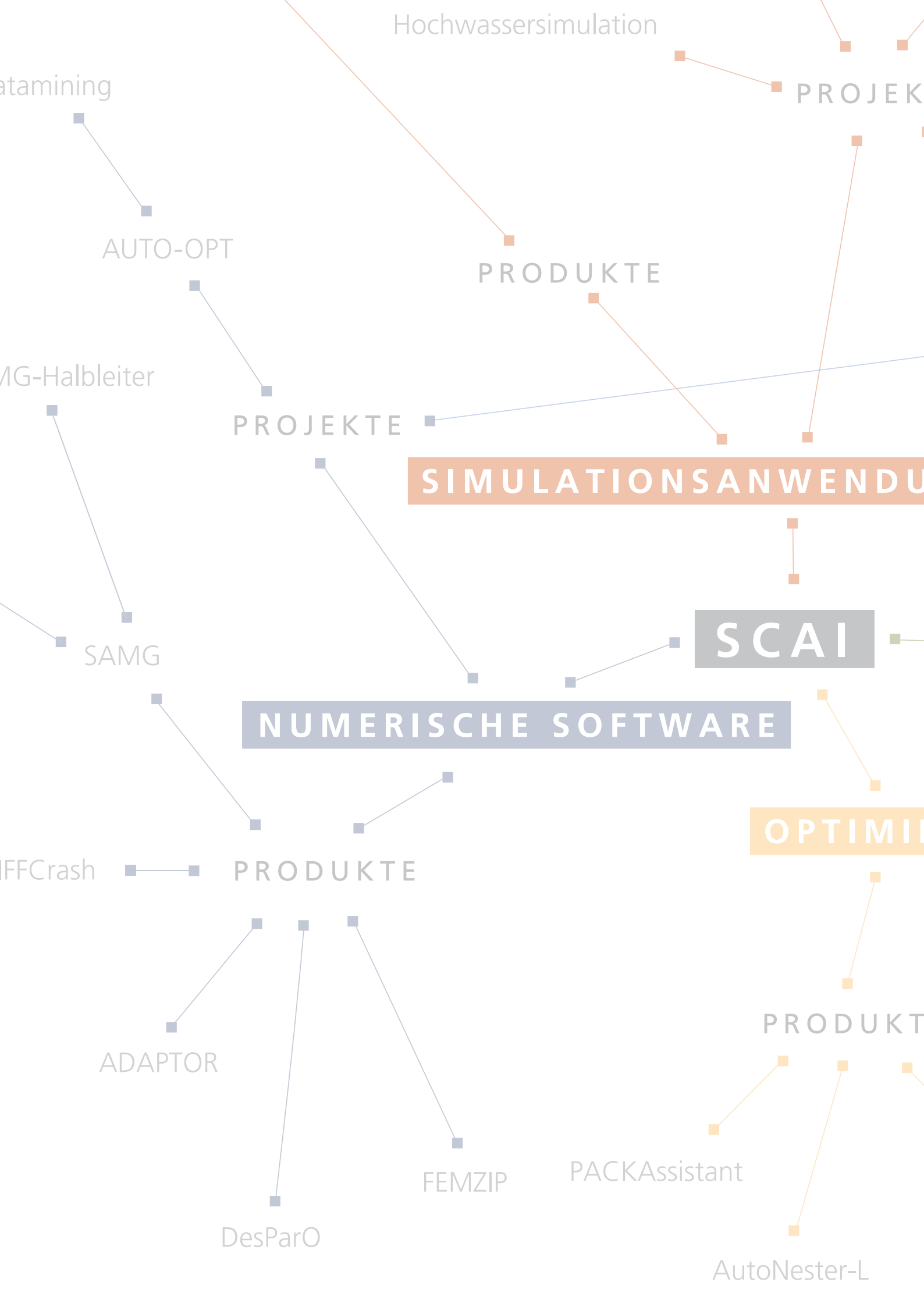
Produkte schnelle, übersichtliche Planungen für deren Transport und Lagerung und die dadurch entstehenden Kosten erstellen, ohne Prototypen in ausreichender Anzahl zu besitzen. Diese Ergebnisse können dann in den Entwurf neuer Produkte einfließen.

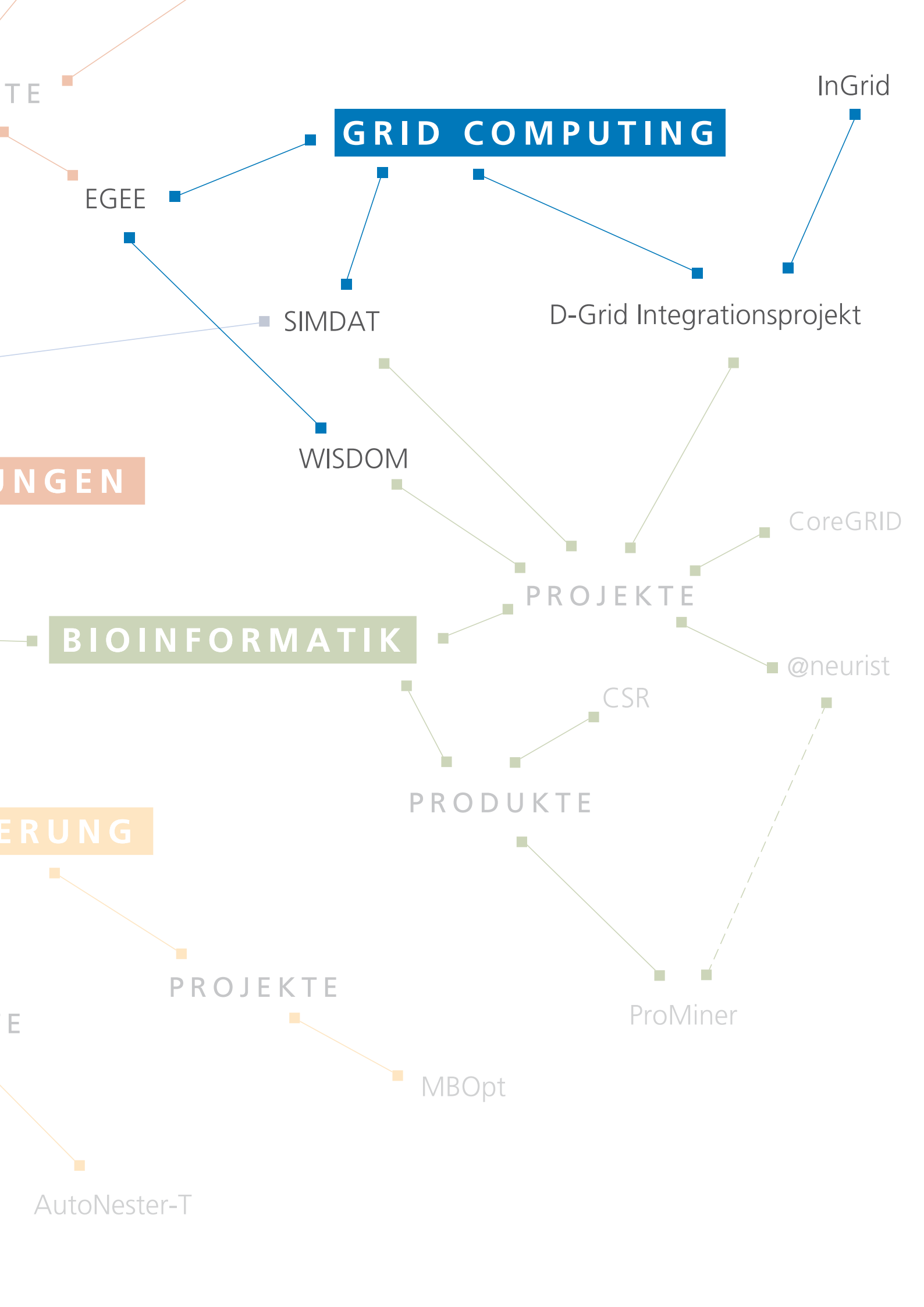
Perspektiven

Entwicklungsziele für die Software sind eine Anbindung an verschiedene CAD-Systeme, die Unterstützung zusätzlicher Packungsmuster, eine Abschätzung der Behälterauslastung, falls die Teile in den Behälter geschüttet werden und die Überprüfung der Stabilität einer berechneten Anordnung.

Kontakt

Dipl.-Informatiker
Stefan Rank
Tel.: 02241 / 14 - 1503
Fax.: 02241 / 14 - 2656
stefan.rank@scai.fraunhofer.de





Grid Computing – eine Begriffsdefinition

Ständig wachsende Rechnerleistung, Speicherkapazität und Kommunikationsbandbreite vernetzter Ressourcen bieten Wissenschaft, Wirtschaft und Individuen qualitativ neue Möglichkeiten. Die Idee des Grid Computing ist, diese enormen vernetzten Ressourcen in transparenter, einheitlicher und dem World Wide Web ähnlicher Weise zu nutzen, ohne sich um die Details der Einzelsysteme zu kümmern. So wie man heute Geräte mit dem Stromnetz verbindet, wird man in Zukunft einen Laptop mit dem Grid verbinden und die Leistungsfähigkeit großer Rechner und leistungsfähiger Software nutzen können.

Zielgruppen für das Grid Computing sind auf der einen Seite Forschungsgemeinschaften und auf der anderen Seite verteilte Entwicklungsgruppen in Industrieunternehmen. Beide Welten nutzen ähnliche Middleware, das heißt Software, die das Grid steuert. Dennoch lassen sich die Ziele und Entwicklungslinien sowie die Zeitskalen in den wissenschaftlichen und in den industriellen Bereichen deutlich unterscheiden. National und international werden daher zurzeit verschiedene Initiativen vorangetrieben: breit angelegte Forschungs- und Entwicklungsprojekte (D-Grid oder europäische Projekte) und eine Reihe kleinerer Initiativen, die auf Pilotanwendungen in der Industrie zielen.

SCAI überträgt die Forschungsergebnisse in die Industrie

Fraunhofer SCAI engagiert sich in den Forschungsinitiativen und in industriellen Projekten. Ausgehend von Grid-Entwicklungen in der Wissenschaft versucht SCAI eine Brücke zu industriellen Anwendungen zu schlagen. In der Industrie geht es vor allem um die universelle Verfügbarkeit von Daten, Applikationen («Services») und ein den Anforderungen des Problems angepasstes Angebot von Rechenleistung. Kernkompetenzen des Instituts in der numerischen Simulation und dem virtuellen Engineering fließen in Problemlösungsumgebungen ein, welche die einzelnen Phasen der Produktentwicklung integrieren und die Entwicklungsschritte und Simulationsergebnisse in Datenbanken speichern. Die globale Vernetzung von Projektteams bei Entwicklungsprozessen verlangt auch eine globale Vernetzung dieser Problemlösungsumgebungen und damit einen transparenten Zugriff auf Software und Daten aller am Projekt beteiligten Arbeitsgruppen. In diesen virtuellen Teams müssen die Partner jedoch durch geeignete Schutzmechanismen eigenständig bleiben. Darüber hinaus besteht für die Anwendungsdomänen die Notwendigkeit, eine vereinheitlichte Semantik für ihre Begriffe, ihre Datenquellen und ihre Analysesoftware zu entwickeln. Ohne Standardisierung kann Grid Computing nicht funktionieren.

Nationale und internationale Grid-Aktivitäten

SCAI beteiligt sich auf verschiedenen Ebenen am Aufbau einer Grid-Infrastruktur. Zunächst haben sich die Institute der Fraunhofer-Gesellschaft zur Grid-Allianz zusammengeschlossen, um die Angebote an Rechenleistung zu bündeln und für die Institute der Gesellschaft nutzbar zu machen.

In mehreren nationalen Forschungsprojekten vernetzen sich Wissenschaftseinrichtungen zu einem nationalen D-Grid. SCAI beteiligt sich am Aufbau und Betrieb des Grids und in der Betreuung mehrerer Anwendergemeinschaften. Insbesondere sieht sich SCAI der Aufgabe verpflichtet, sein Know-how in die Industrie zu transferieren und Grid-Technologien kommerziell nutzbar zu machen. Der Aufbau von Grids spielt sich jedoch auch auf internationalem Parkett ab, beispielsweise in Förderprojekten der Europäischen Kommission, an denen SCAI ebenfalls beteiligt ist.

Eine Darstellung der einzelnen Grid-Projekte findet sich in den folgenden Kapiteln.

Grid-Projektberichte

- SIMDAT – Data Grids for Process and Product Development using Numerical Simulation and Knowledge Discovery
- WISDOM – Wide In Silico Docking On Malaria
- @neurIST – Integrated Biomedical Informatics for the Management of Cerebral Aneurysms
- D-Grid (Integrationsprojekt, InGrid)
- EGEE/EGEE2 – Enabling Grids for E-Science
- CoreGRID – European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for large scale distributed, Grid and Peer-to-Peer Technologies

Weitere Grid-Projekte sind angelaufen oder in Vorbereitung:

- SESIS – Schiffsentwurfs- und Simulationssystem
- BEinGRID – Business Experiments in Grid
- PHOSPHORUS – Lambda User Controlled Infrastructure For European Research
- DEGREE – Dissemination and Exploitation of Grids in Earth Science

Kontakt

Dipl.-Informatiker

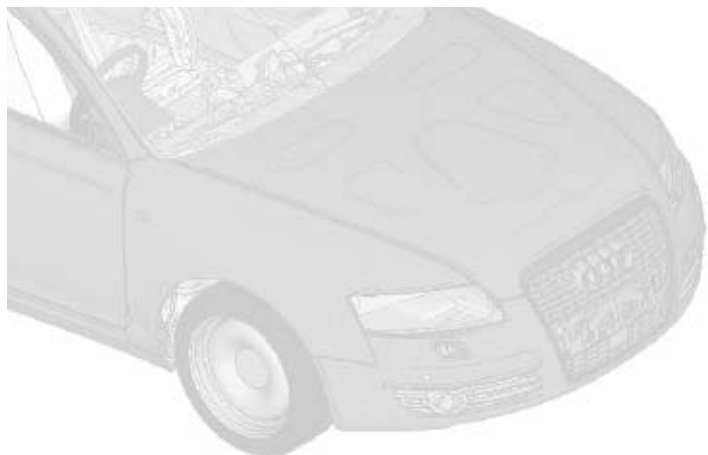
Ottmar Krämer-Fuhrmann

Tel.: 02241 / 14 - 2202

Fax.: 02241 / 14 - 2181

ottmar.kraemer-fuhrmann@scai.fraunhofer.de

Projekt SIMDAT – Data Mining und Grid Computing für industrielle Anwendungen



Aufgaben

Industrielle Entwicklungsprozesse verlaufen heute hochgradig parallel und räumlich verteilt: An mehreren Orten ansässige Expertenteams wirken zusammen an der Entwicklung eines Produkts, wobei jedes Team für eine andere Produktkomponente zuständig ist und in seiner spezifischen Problemlösungsumgebung an deren Optimierung arbeitet – so zum Beispiel Abteilungen für das Computer Aided Design (CAD), das Computer Aided Engineering (CAE) und das Computer Aided Testing (CAT) in der Automobilindustrie.

Diese Teilprozesse verlaufen heute noch über weite Strecken unabhängig voneinander, was die Gesamtoptimierung des Produkts erschwert. Sie involvieren meist mehrere, geografisch verteilte Organisationen, die durch Partnerschaften und logistische Ketten miteinander verknüpft sind.

Im Mittelpunkt des Zusammenwirkens der verschiedenen Arbeitsgruppen stehen die Daten, welche die Produktkomponenten beschreiben. Sie entstehen typischerweise während des Entwicklungsprozesses. Durch Zugriff auf diesen Datenbestand kann sich eine Arbeitsgruppe rasch über den Stand der Modelentwicklung in einer anderen Arbeitsgruppe informieren. Auf diese Weise kann das Gesamtprodukt bereits früh im Entwicklungsprozess optimiert werden.

Mit Grid-Technologien lassen sich die Komplexität solcher Entwicklungsprozesse

und die Kooperation über organisatorische Grenzen hinweg deutlich vereinfachen. Sie ermöglichen einen Zugriff auf gemeinsame oder verteilte Daten und damit virtuelle Organisationen. Geheime Datenbereiche gilt es dabei zu schützen.

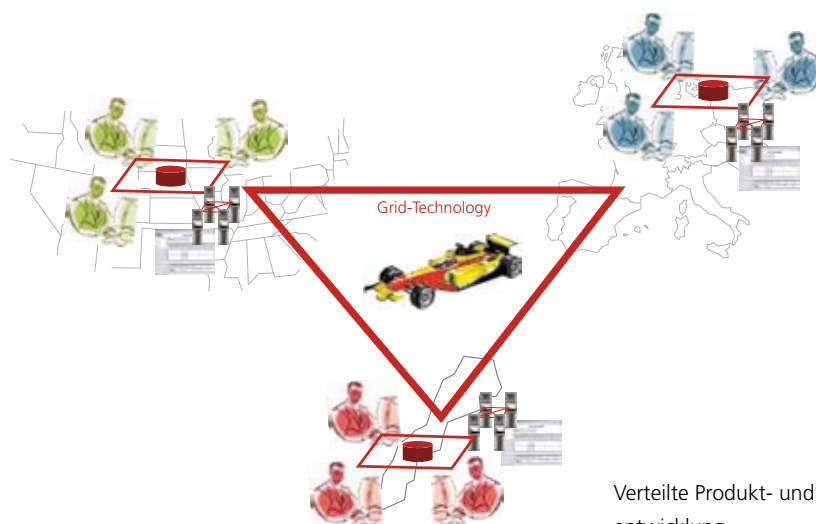
Ziele

Im Projekt SIMDAT (Data Grids for Process and Product Development using Numerical Simulation and Knowledge Discovery) werden grundlegende Techniken für das Grid Computing entwickelt. Ziel dabei ist es, komplexe Anwendungsprobleme in unterschiedlichen Industriebereichen zu lösen: im Entwurf von Automobilen und Flugzeugen, in der Pharmaindustrie und in der Meteorologie. Dabei helfen Technologien aus den folgenden sieben

Forschungsgebieten: Integrierte Grid-Infrastrukturen, Verteilter Datenzugriff, Management virtueller Organisationen, Workflow, Ontologien, Dienste-Integration und Knowledge Discovery. Es sollen standardisierte Lösungen entstehen und der Nachweis geführt werden, dass Grid-Technologien Lösungsprozesse für datenzentrierte Probleme vereinfachen.

Die Arbeiten im Projekt zielen einerseits auf verbesserte Grid-Module. Weiteres zentrales Ziel ist die Verknüpfung verschiedener Problemlösungsumgebungen. Dabei handelt es sich um kommerzielle Produkte oder um Entwicklungen, die führende Unternehmen in der Anwenderszene entwickelt haben.

SIMDAT wird vom Fraunhofer-Institut SCAI koordiniert. Außerdem entwickelt



Verteilte Produkt- und Prozessentwicklung

SCAI Methoden des Knowledge Mining für Daten aus der Simulation von Automobilen sowie Ontologien zur Nutzung von Datenbanken mit Simulationsdaten aus der Automobilindustrie und zur Nutzung von Daten aus der Pharmaforschung.

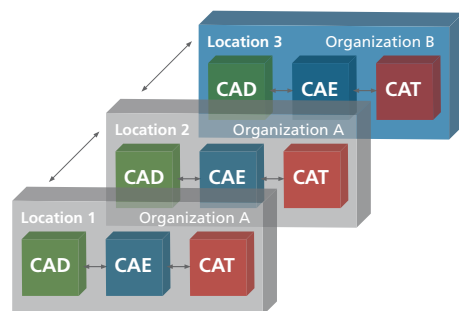
Die Projektpartner setzen die Ergebnisse in den genannten Anwendungsfeldern ein und bewerten sie. In jedem Bereich wurde ein Problem als typischer Anwendungsfall identifiziert. So beispielsweise in der Luftfahrtindustrie der multidisziplinäre kollaborative Entwurf eines geräuscharmen Flügel-Landeklappensystems mit hohem Auftrieb.

Ergebnisse

In der ersten Projektphase »Konnektivität« ging es darum, an den verschiedenen Orten Grid-Infrastrukturen aufzubauen und mittels Grid-Technologien Zugang zu den verteilten Datenquellen zu schaffen.

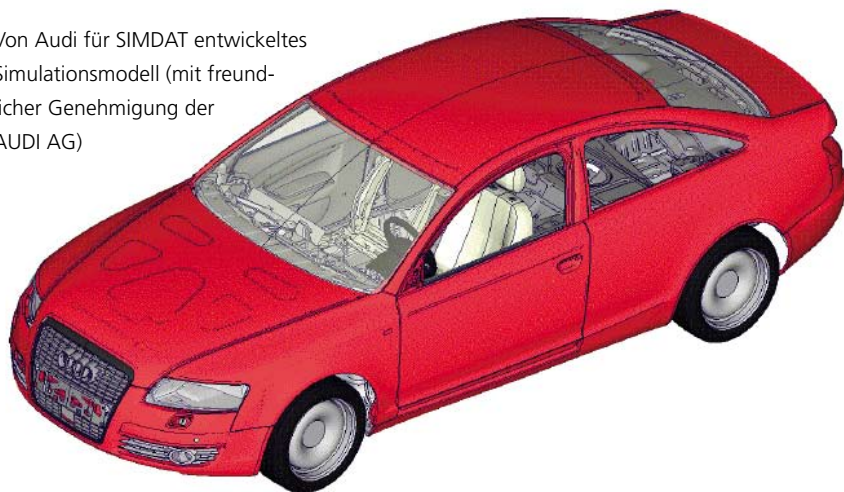
In den beiden weiteren zentralen Phasen des Projekts, Interoperabilität und Knowledge Mining, wurde der Stand der Technik analysiert, Konzepte entwickelt und ein Projektarbeitsplan entworfen.

Ferner wurden in den Anwendungs- und Technologiebereichen sieben Prototypen definiert und erfolgreich implementiert. Hierfür wurden verbesserte Grid-Technologie-Module entwickelt und eingesetzt.



Integration verteilter Organisationen und Entwicklungsdisziplinen (mit freundlicher Genehmigung von MSC.Software GmbH)

Von Audi für SIMDAT entwickeltes Simulationsmodell (mit freundlicher Genehmigung der AUDI AG)



Perspektiven

SIMDAT leistet einen wichtigen Beitrag zur Transformation des Paradigmas der lokalen Nutzung von Daten und Rechenleistung hin zu einer Virtualisierung und Verteilung von Ressourcen.

Die Kopplung von Problemlösungsumgebungen für das Design von Produkten und Prozessen ermöglicht einen nahtlosen Übergang zur Nutzung von Grid-Technologien für Schlüsselindustrien. Die Arbeiten im Projekt SIMDAT vereinfachen den Einsatz von Grid-Technologien in den Bereichen Entwurf von Produkten und Produktionsverfahren, Lebenswissenschaften und Geo-Modellierung. Zugleich fördert SIMDAT die Nutzung des Grid in anderen Gebieten mit ähnlichen Anforderungen an das Management großer Datenmengen und an das Knowledge Discovery.

Partner

- AUDI
- BAE Systems Limited
- Deutscher Wetterdienst
- European Aeronautic Defence&Space Company
- ESI Group
- EUMETSAT
- European Centre for Medium-Range Weather Forecasts
- Fraunhofer AIS
- GlaxoSmithKline Research and Development Ltd.

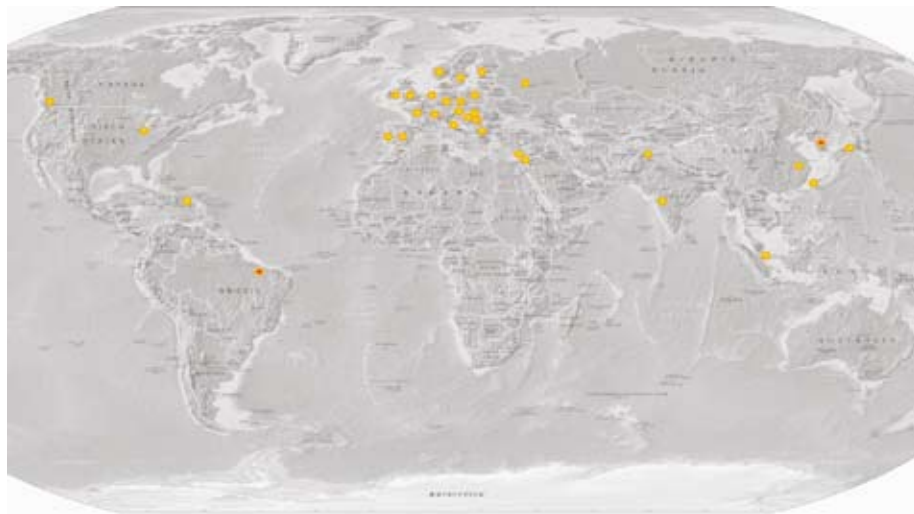
- IBM United Kingdom Limited
- IDESTYLE Technologies
- InforSense Limited
- Intel GmbH
- IT Innovation
- Lion bioscience Limited
- LMS International N.V.
- Noesis Solutions (Third Party)
- Météo France
- MSC.Software GmbH
- NEC Europe Ltd.
- Ontoprise GmbH
- Oracle Deutschland GmbH
- Renault
- UK Met Office
- Universität Karlsruhe
- Université Libre de Bruxelles
- University of Southampton

SIMDAT wird von der Europäischen Kommission im IST-Programm mit elf Millionen Euro gefördert. Die Projektlaufzeit ist September 2004 bis August 2008.

Kontakt

Dipl.-Mathematiker
Clemens-August Thole
Tel.: 02241/14-2739
Fax.: 02241/14-2102
clemens-august.thole@scai.fraunhofer.de
www.simdat.org

Projekt EGEE – Europäische Grid-Infrastruktur für das Wissenschaftliche Rechnen



Aufgaben

Im Projekt Enabling Grids for E-science (EGEE) fördert die Europäische Kommission den Aufbau einer europaweiten Grid-Infrastruktur für die Forschung. Forschern an wissenschaftlichen Einrichtungen und in der Industrie sollen jederzeit und unabhängig vom Standort auf Rechner und Ressourcen im Grid zugreifen können.

Das Fraunhofer-Institut SCAI ist Projektpartner in der Deutsch-Schweizerischen Förderung (DE-CH). Die Partner arbeiten Hand in Hand, um eine konsistente, robuste und sichere Grid-Infrastruktur in der Förderung anbieten zu können. Wichtig dabei ist auch, dass zur Erweiterung laufend neue Ressource-Provider gewonnen werden. Es entsteht eine weltweite Infrastruktur. Die Nutzer kommen aus den Bereichen der Hochenergie- und Teilchenphysik, der Biomedizin und -Informatik, der Erdsystem und Klimaforschung sowie der Synchrotronstrahlung. Immer weitere Gemeinschaften mit neuen Anwendungen sollen an die Infrastruktur herangeführt werden und diese dann aktiv unterstützen. Die Deutsch-Schweizerische Förderung beteiligt sich an folgenden Arbeitspaketen: Applikations-Identifikation und Support, Global Grid Operation Support und Management.

SCAI leistet Hotline-, Installations- und Betriebssupport für regionale Operating-Center, die vom Forschungszentrum Karlsruhe (FZK) geleitet werden.

Lösungen

SCAI bietet den Forschungsgemeinschaften Geo-Wissenschaften und Klimaforschung sowie Biomedizin und Bioinformatik technische Unterstützung.

Eines der Hauptprobleme der Gemeinschaft Geo-Wissenschaft ist es, gemeinsame Beobachtungen von Satelliten- und Bodenmessungen durch LIDAR (Light Detection and Ranging) -Instrumente zu finden und zu analysieren. Zu diesem Zweck werden Metadaten wie Start- und Stopdatum aus den Messergebnissen gefiltert und in einer zusätzlichen Datenbank im Grid abgespeichert. Die Messdaten selber liegen verteilt an beliebigen geographischen Orten auf so genannten Storage-Elementen. SCAI hat dazu eine Metadatenbank in der EGEE-Umgebung eingerichtet, betreibt sie und hat gemeinsam mit Partnern – etwa dem niederländischen Wetterdienst (KNMI) – die Zugriffsmechanismen entwickelt.

Perspektiven

Gemeinsam mit den französischen Kollegen am Laboratoire de Physique Corpusculaire (IN2P3) in Clermont-Ferrand entwickelte SCAI eine Anwendung für das virtuelle Screening neuer Wirkstoffe, die auf der Infrastruktur des EGEE-Grids lauffähig ist. Im Teilprojekt Wide In Silico Docking On Malaria (WISDOM) startete der erste große Auswertungslauf unter Einbeziehung fast aller Ressourcen im Grid. Zum Einsatz

kam dabei eine vom SCAI entwickelte Software. Das Programm FlexX, vermarktet der Firmenausgründung BioSolveIT des Instituts, untersucht die Bindungseigenschaften von Molekülen, auch Liganden genannt, an Zielproteine und ermittelt so aussichtsreiche Kombinationen für die Wirkstoffforschung in der Pharma-Industrie. Im konkreten Fall hatten die EGEE-Computer die Bindungseigenschaften von etwa einer Million virtueller Liganden an fünf potenzielle Zielproteine in wiederum fünf verschiedenen Varianten zu berechnen.

Ein einzelner PC hätte dazu rund 80 Jahre gerechnet, das Grid brauchte nur 40 Tage. Damit das Experiment starten konnte, standen auf einem Lizenz-Server bei SCAI und damit im Grid 30 000 Lizenzen bereit, die gleichzeitig abgerufen werden konnten. Ziel dieses Projekts ist es, zur effektiven Bekämpfung der weltweit verbreiteten Krankheit Malaria beizutragen (siehe Seite 80 ff).

Der erfolgreiche Belastungstest für die Infrastruktur hat gezeigt, dass EGEE zu Recht den Status eines Produktions-Grids hat.

Kontakt

Dipl.-Mathematiker
 Horst Schwichtenberg
 Tel.: 02241 / 14 - 2577
 Fax.: 02241 / 14 - 2181
 horst.schwichtenberg@scai.fraunhofer.de

Projekt WISDOM – Einsatz des größten Grids der Welt im Kampf gegen Malaria

Situation

Eine Million Menschen sterben weltweit jedes Jahr an der Tropenkrankheit Malaria. Die Tendenz ist steigend, da die Erreger gegen den bislang meist eingesetzten Wirkstoff Chloroquine resistent geworden sind. Die Entwicklung eines neuen Medikaments kostet die Pharma-Unternehmen mehrere Hundert Millionen Euro.

Aufgabe

Im vergangenen Jahr wurde das weltweit größte Grid für die Wissenschaft, das EGEE Grid [1], für ein umfangreiches, virtuelles Screening nach neuen Wirkstoffen gegen Malaria eingesetzt. Im Zuge des Projekts WISDOM («Wide In Silico Docking on Malaria») [2] wurden mehr als eine halbe Million virtuelle Strukturen auf ihre Bindung an ausgewählte Zielproteine des Malaria-Erregers Plasmodium falciparum getestet. Bei den Zielproteinen handelte es sich um fünf Vertreter der Familie der Plasmeptine, einer Protease (also eines auf andere Proteine einwirkenden Enzyms), welche für die Vermehrung und Reifung des Parasiten essentiell ist.

Lösung

Da ein auf molekularem Docking beruhendes, virtuelles Screening sehr stark von den eingesetzten Software-Werkzeugen zur Simulation der Interaktion kleiner Wirkstoffe mit den Zielproteinen abhängt, wurden in WISDOM zwei auf algorithmischer Ebene sehr unterschied-

The screenshot shows the VS-Explorer application window. The main window displays a table with columns: Number, WISDOM-ID, ZINC-Name, SMILES, ZINC_ID, rCN, and SPAC. The table contains 20 rows of data, with the first row highlighted in red. Below the main table, there is a 'Focus:' section with a smaller table showing details for rows 276799, 276800, and 276801. To the right, a 'MoleculeSketch' window displays a chemical structure of a molecule with a benzene ring, a hydroxyl group, and a side chain.

Number	WISDOM-ID	ZINC-Name	SMILES	ZINC_ID	rCN	SPAC
1	WISDOM-276799	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	6-PAC
2	WISDOM-276800	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	4-(1,4,5-
3	WISDOM-276801	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	2-dimethyl
4	WISDOM-276802	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	N-(1-methyl
5	WISDOM-276803	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	N-(1-dimethyl
6	WISDOM-276804	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	2-methyl
7	WISDOM-276805	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	N,N-dimethyl
8	WISDOM-276806	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	2-methyl
9	WISDOM-276807	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	2-methyl
10	WISDOM-276808	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	2-methyl
11	WISDOM-276809	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	2-methyl
12	WISDOM-276810	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	2-methyl
13	WISDOM-276811	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	2-methyl
14	WISDOM-276812	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	2-methyl
15	WISDOM-276813	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	2-methyl
16	WISDOM-276814	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	2-methyl
17	WISDOM-276815	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	5,7-dimethyl
18	WISDOM-276816	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	5,7-dimethyl
19	WISDOM-276817	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	5,7-dimethyl
20	WISDOM-276818	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0000	rCN=1/C	5,7-dimethyl

Number	WISDOM-ID	ZINC-Name	SMILES	ZINC_ID	rCN	SPAC
276799	WISDOM-276799	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0105	rCN=1/C	N-benzyl
276800	WISDOM-276800	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0105	rCN=1/C	5-(2-methyl
276801	WISDOM-276801	zinc-768	CC1=CC=C(C=C1)C(=O)N	ZINC0105	rCN=1/C	3-cyano

Bild 1: Bildschirmfoto des Analyseprogramms VS-Explorer für die Auswertung virtueller Screeningexperimente im Grid. VS-Explorer verarbeitet umfangreiche und komplexe Ergebnislisten; in unserem Beispiel werden die ersten 20 sowie die Zeilen von Position 276799 bis 2776801 einer insgesamt circa 400000 Zeilen umfassenden Liste mit Screeningergebnissen visualisiert. Die Strukturen der virtuellen Substanzen werden ebenfalls angezeigt und können zur genaueren Analyse in einem separaten Fenster vergrößert dargestellt werden; zur chemieinformatischen Detailanalyse können Subsets von Resultaten selektiert und einfach exportiert werden.

liche Docking-Werkzeuge auf dem Grid implementiert: Die am SCAI entwickelte, kommerzielle Docking-Software FlexX [3] und die frei verfügbare Software AutoDock [4].

Insgesamt wurden in einem Zeitraum von etwas mehr als fünf Wochen auf durchschnittlich mehr als 3 000 Rechnern über 46 Millionen individuelle Docking-Experimente ausgeführt. Die auf dem EGEE-Grid in weniger als sechs Wochen erbrachte Rechenleistung entspricht mehr als 80 Jahren reiner Rechenzeit auf einem einzelnen Rechner.

Für die Analyse der bei diesem virtuellen Screening generierten, umfangreichen Datenmengen von über 20 Terabyte musste eine eigene Daten-Analysesoftware entwickelt werden. Mit Hilfe des »VS-Explorers« (siehe Bild 1) konnten Listen von über 400 000 Zeilen sowie assoziierte Information (beispielsweise Molekülstrukturen) effizient geladen und analysiert werden (zum Vergleich: das Tabellen-Kalkulationsprogramm EXCEL, welches häufig für die Auswertung von Screening-Daten genutzt wird, kann Listen von mehr als 15 000 Zeilen kaum noch in akzeptablen Zeiten laden und manipulieren.

Perspektiven

Mit VS-Explorer hat die Abteilung Bioinformatik die Voraussetzungen dafür geschaffen, die Ergebnisse eines virtuellen Screening-Projekts der Größenordnung von WISDOM analysieren zu

können. Durch Einsatz von VS-Explorer als Analysetool konnten die Resultate der unterschiedlichen Grid-Services überhaupt erst miteinander verglichen werden (siehe Bild 2). Es konnten bislang zwei neue Klassen von Strukturen identifizieren, die von FlexX und von AutoDock als Ausgangspunkt für die Entwicklung neuer Wirkstoffe gegen den Malaria-Erreger Plasmodium falciparum vorgeschlagen werden.

Referenzen

- [1] <http://public.eu-eggee.org/>
- [2] <http://wisdom.eu-eggee.fr/>
- [3] <http://www.biosolveit.de/FlexX/>
- [4] <http://www.scripps.edu/mb/olson/doc/autodock/>

Kontakt

Dr. Martin Hofmann
Tel.: 02241 / 14 - 2802
Fax.: 02241 / 14 - 2656
martin.hofmann@scai.fraunhofer.de

Bild 2: Eine einfache Farbkodierung erlaubt die schnelle Auswahl potenzieller Wirksubstanzen. Die Erfüllung vordefinierter Kriterien wird durch eine Einfärbung der relevanten Datenfelder in der Liste angezeigt. Damit lassen sich sehr schnell komplexe Muster von Eigenschaften selektionieren und ausgewählte Substanzen je nach Kriterium einer raschen Inspektion unterziehen.

Projekt @neurIST – Integrierte biomedizinische Informatik auf dem Grid

Situation

Cerebrale Aneurysmen sind Ausstülpungen von Blutgefäßen im Gehirn (Bild 1). Sie entstehen mit relativ hoher Prävalenz in circa drei bis fünf Prozent aller Menschen in Mitteleuropa. In der weitaus überwiegenden Zahl der Fälle bleiben die Menschen mit Aneurysmen bis zu ihrem Lebensende ohne jedes Symptom. Nur in wenigen Fällen kommt es zur Ruptur der Ausstülpung und zu einer damit einhergehenden »subarachnoidalen Hemorrhagie« (Hirnblutung). Die Inzidenz einer Ruptur liegt bei 0,0001 Prozent einer Gesamtbevölkerung. Dies bedeutet, dass nur jeder 10 000ste Mitteleuropäer von der Ruptur eines cerebralen Aneurysmas betroffen ist. Bei den Betroffenen jedoch ist der Ausgang häufig fatal: Ein Drittel der von einer Ruptur betroffenen Patienten überlebt die Ruptur nicht, ein weiteres Drittel erleidet schwere Hirnschäden, die häufig weitgehende Folgen zeitigen (Lähmungen; Verlust ganzer Hirnfunktionen). Nur in einem Drittel der Ruptur-Inzidenzen überlebt der Patient ohne erkennbare Beeinträchtigung (Bild 2).

Ziele

Ziel von @neurIST ist es, eine IT-Infrastruktur aufzubauen, die heterogene Daten aus der Medizin und der molekularen Genomanalyse so miteinander verknüpft, dass eine Vorhersage des Ruptur-Risikos für cerebrale Aneurysmen

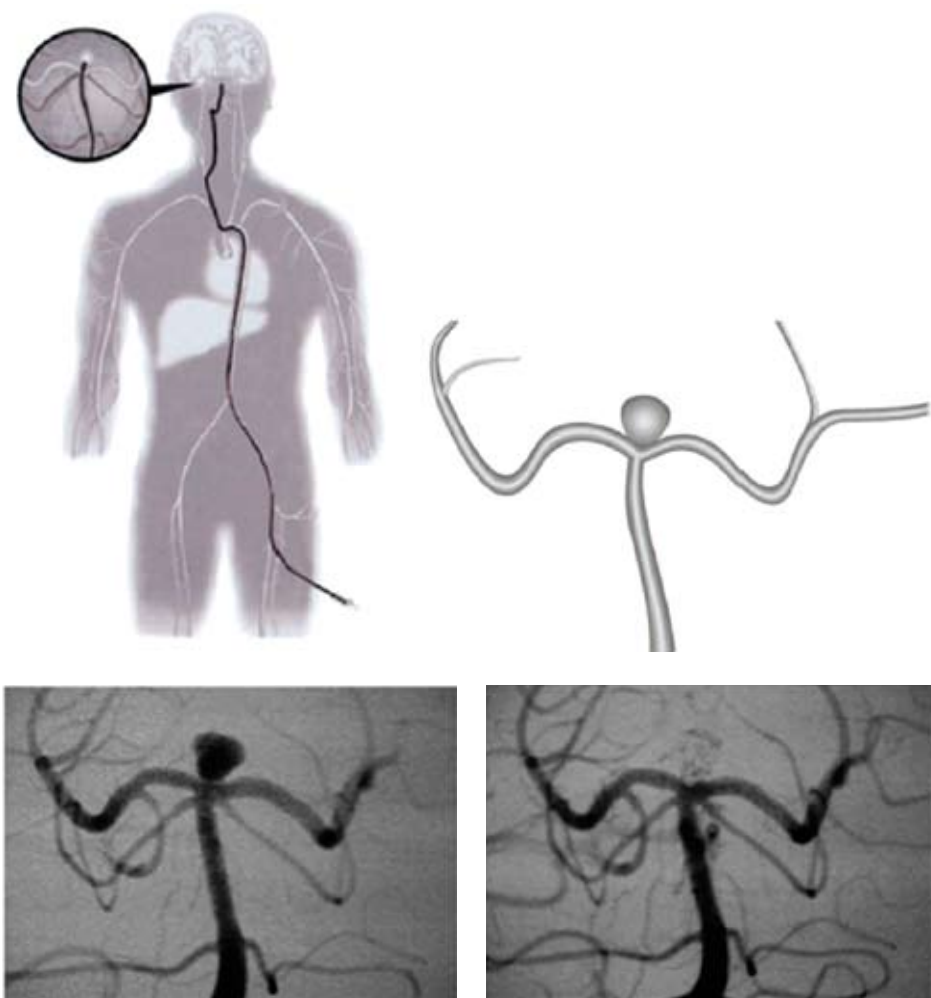


Bild 1: Cerebrales Aneurysma vor und nach der Behandlung mit so genannten »coils«. Bei der als »Coiling« bezeichneten Therapie wird dem Patienten durch die Blutgefäße ein kleines Stück Metall (ein »Stent«) eingesetzt, der lokal den Verschluss des Aneurysmas durch induzierte Koagulation (eine künstlich ausgelöste Blutgerinnung) herbeiführt. Dieser Eingriff ist – wie auch das chirurgische »clipping«, also das Ligieren und Abtrennen eines Aneurysmas – sehr riskant, da kleinste Verletzungen im Gehirn zu Hirnblutungen und Folgeschäden führen können.

ermöglicht wird. Dabei sollen Methoden des Grid Computings genutzt werden, um eine komplette Informationsinfrastruktur für molekulare und klinische Daten aufzubauen und rechenintensive Aufgaben aus der prädiktiven Bio-Simulation zu realisieren (Bild 3).

Die aufzubauende Grids soll verschiedene Skalen biomedizinischer Phänomene integrieren:

- von Molekülen über Zellen zu Geweben und Patienten-Populationen,
- die Kombination so unterschiedlicher methodischer Ansätze wie Textmining für biomedizinische Wissensrepräsentationen, genetischen Studien, biome-

dizinische Bildgebung und Auswertung elektronischer Patientenakten.

Am Ende des Projekts wird ein Wahrscheinlichkeitsmodell für die Ruptur von Aneurysmen stehen, dessen Aussagekraft Langzeitstudien unterstützen sollen. Schließlich können niedergelassene Ärzte die Services von @neurIST zur Abschätzung des individuellen Rupturrisikos auf Basis genetischer Daten und medizinischer Bildgebung nutzen.

Projektdaten

@neurIST ist ein Grid-Projekt, gefördert aus Mitteln des eHealth-Referats der Europäischen Kommission, siehe <http://www.aneurist.org/>

Kontakt

Dr. Martin Hofmann

Tel.: 02241 / 14 - 2802

Fax.: 02241 / 14 - 2656

martin.hofmann@scai.fraunhofer.de

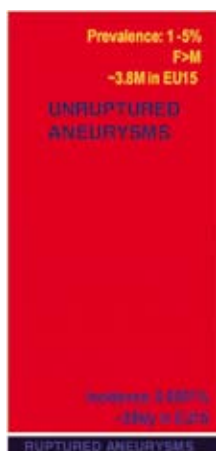


Bild 2: Verhältnis von rupturierten Aneurysmen zu nicht-rupturierten Aneurysmen. Ziel von @neurIST ist die Identifizierung von Risikofaktoren und die mathematische Modellierung eines Systems für die Vorhersage des individuellen Rupturrisikos.

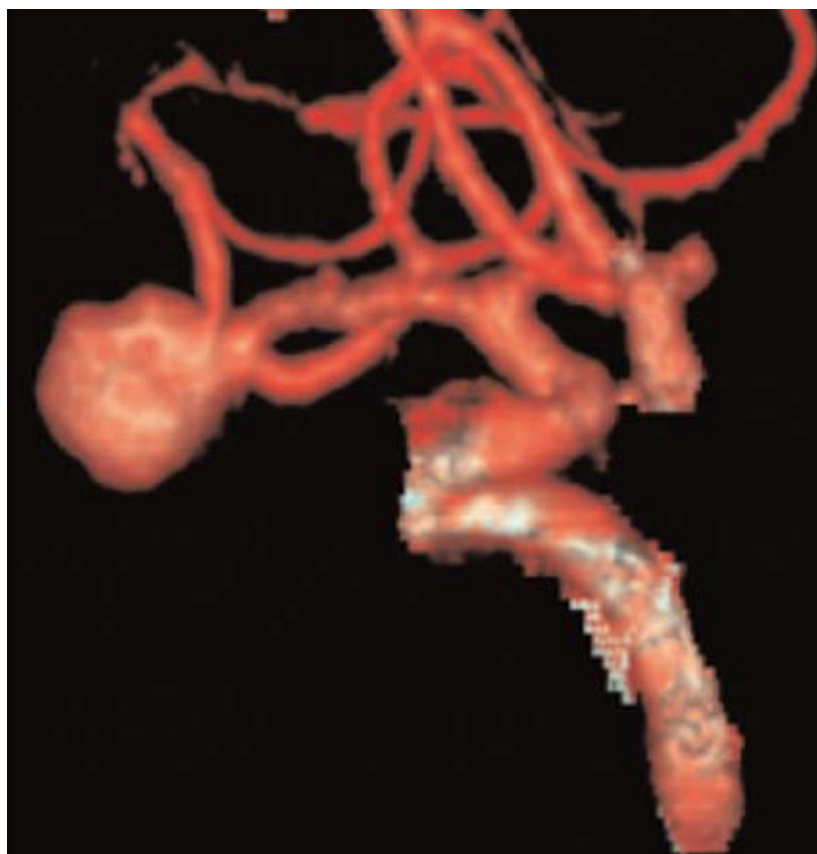
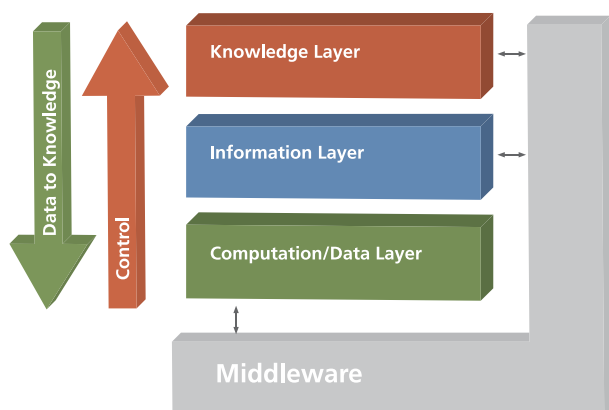


Bild 3: Simulation eines unrupturierten Hirn-Aneurysmas. Die Geometrie des virtuellen Aneurysmas geht auf die Rekonstruktion computertomographischer Darstellungen realer Aneurysmen zurück.

Projekt CoreGRID – Network of Excellence



CoreGRID – European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for large scale distributed, Grid and Peer-to-Peer Technologies – ist ein von der Europäischen Kommission teilfinanziertes Projekt für Grid- und Peer-to-Peer-Technologien mit 42 Partnern aus 18 Ländern. Ziel des Projekts ist es, die wissenschaftliche und technologische Exzellenz im Bereich Grid- und Peer-to-Peer-Technologien in Europa auszubauen und zu erhalten. CoreGRID ist als Network of Excellence (NoE) organisiert, das heißt, es arbeitet wie ein virtuelles Europäisches Forschungslabor, das in sechs virtuelle Institute aufgeteilt ist. Diese Institute arbeiten auf den Gebieten:

- Wissens- und Datenmanagement,
- Programmiermodelle,
- System-Architektur,
- Grid-Informations- und Monitoringdienste,
- Ressource Management und Scheduling sowie
- Problemlösungsumgebungen, Werkzeuge und Grid-Systeme.

Der Schwerpunkt der virtuellen Institute ist die Integration der über Europa verteilten Grid- und Peer-to-Peer-Forschung, während die Forschung zu den Themen der Institute von den Netzwerkpartnern durchgeführt wird. Die Integration wird unter anderem durch

- gemeinsame Forschungsarbeiten in den sechs Instituten,
- die gemeinsame Nutzung von Grid-Testbeds,
- den Zugang zu einer gemeinsamen Kommunikationsinfrastruktur zur Zusammenarbeit,
- die Verbreitung von Ergebnissen und einem ausgezeichneten Programm zur Förderung der Mobilität von Forschern und Doktoranden.

Darüber hinaus gibt es spezielle Arbeitsgruppen für Querschnittsaufgaben, etwa für das Thema »Vertrauen und Sicherheit«.

Die sechs virtuellen Institute unterstützen drei weitere Arbeitsbereiche, die Integration, Dauerhaftigkeit und Sichtbarkeit des Netzwerks sowie die Zusammenarbeit mit anderen Europäischen Projekten zum Ziel haben:

1. Arbeitsbereich für die Unterstützung und Sicherung der Integration
2. Arbeitsbereich für die Verbreitung von Exzellenz
3. Arbeitsbereich für Zusammenarbeit mit anderen Projekten.

Eine besondere Herausforderung des Projektes ist es, Strukturen zu schaffen, die es erlauben, die virtuellen Institute auch nach dem Ende der Förderung durch die Kommission fortzuführen und in Verbindung mit den nationalen Einrichtungen zur Forschungsförderung und der Industrie

langfristig eine neue europäische Forschungseinrichtung zu schaffen.

SCAI ist wesentlich an CoreGRID beteiligt. Zu den Aufgaben des Instituts gehören:

- Leitung der CoreGRID-Testbed-Aktivitäten im Arbeitsbereich für Integration,
- Mitglied des virtuellen Instituts für Ressource Management und Scheduling,
- Gesamtleitung des Arbeitsbereichs für Zusammenarbeit mit anderen Projekten, außerdem
- Leitung der Aktivität für die Erstellung der Europäischen Grid Roadmap,
- Mitglied in der Europäischen Grid-Standard Koordinierungsgruppe,
- Mitarbeit am Europäischen Grid-Software-Archiv,
- Mitglied im CoreGRID-Leitungsausschuss.

Partner

Fraunhofer-Institute FIRST (Berlin), ITWM (Kaiserslautern) und EU-Partner.

Projektdateien

CoreGRID startete im September 2004 mit 119 Wissenschaftlern und 165 Doktoranden und hat eine Laufzeit von 48 Monaten.

Kontakt

Wolfgang Ziegler
 Tel.: 02241 / 14 - 2258
 Fax.: 02241 / 14 - 42258
 wolfgang.ziegler@scai.fraunhofer.de

Projekt D-Grid – Management Virtueller Organisationen

Situation

Das Fraunhofer-Institut SCAI beteiligt sich am D-Grid Integrationsprojekts (DGI). Das DGI ist ein Projekt der vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Initiative D-Grid, in der es um den Aufbau einer Grid-Infrastruktur für die deutsche Wissenschaft geht. Die Arbeiten im FG1 hat die SCAI-Abteilung Bioinformatik in Zusammenarbeit mit dem Forschungszentrum Karlsruhe und der Ludwig-Maximilians-Universität München übernommen. Der Fokus der Arbeiten ist das Management Virtueller Organisationen im D-Grid.

Aufgabe

Im Fachgebiet 1.10 (Virtuelle Organisationen, Management und Werkzeuge) geht es um die Entwicklung von Systemen, Werkzeugen, Schemata und Prozessen für das Management Virtueller Organisationen. Mit dieser im D-Grid allgemein nutzbaren Umgebung wird die Nutzung und Förderierung von Ressourcen in virtuellen Organisationen und der transparente Zugriff der Anwender im D-Grid auf diese Ressourcen geregelt, das heißt die Ressourcen, der Service und die Anwendungen samt Zeitrahmen für die Nutzung durch Forschungs-Gemeinschaften. Eine virtuelle Organisation ist dabei als eine zwischenbetriebliche Kooperation mehrerer rechtlich unabhängiger Unternehmen in einem (informationstechnisch unterstützten) Wertschöpfungsnetz-

werk zu verstehen. Gegenüber Dritten wirkt dieses Netz wie ein einheitliches Unternehmen, das wirtschaftliche Ziele verfolgt. Das Management der virtuellen Organisation bildet somit die wesentliche Schnittstelle zwischen den Dienst-Anbietern im D-Grid und den Forschungsgemeinschaften. In der ersten Phase des Projektes werden vorhandene Software-Lösungen wie VOMS, Shibboleth Liberty untersucht, die Bedürfnisse und Anforderungen aus den Gemeinschaften und der Dienste-Anbieter bestimmt und ein Konzept zum Management der virtuellen Organisationen im D-Grid entwickelt.

Partner

Leibniz-Rechenzentrum München (LZR),
Forschungszentrum Karlsruhe (FZK).

Projektlaufzeit

Die Arbeiten am Projekt begannen im September 2005 und enden im August 2007.

Kontakt

Wolfgang Ziegler

Tel.: 02241 / 14 - 2258

Fax.: 02241 / 14 - 42258

wolfgang.ziegler@scai.fraunhofer.de

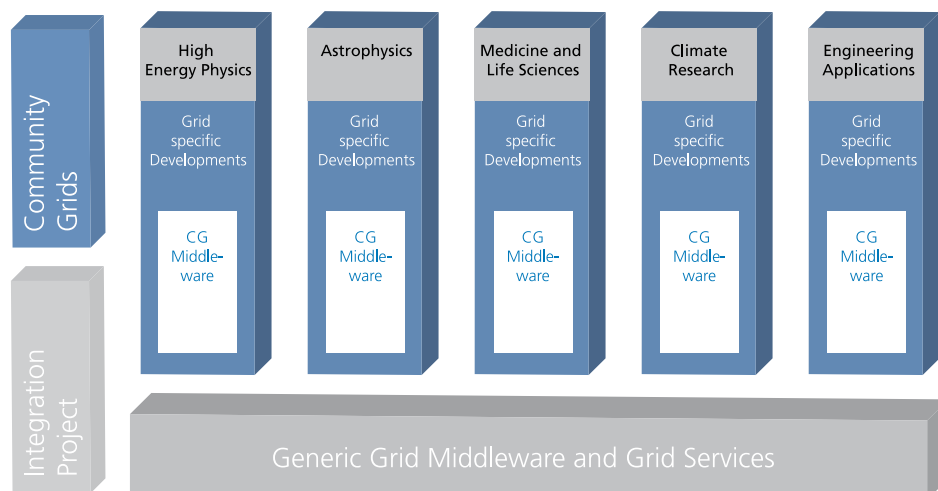


Bild 1: Projekte im Verbund der Initiative D-Grid

Projekt InGrid – Multi-Disziplinäre Simulation im Grid

Aufgabe

Im Community-Projekt »InGrid« der Initiative D-Grid (siehe vorherigen Beitrag) geht es um die Entwicklung einer Grid-Umgebung für Anwender aus den Ingenieurwissenschaften. Um die Leistungsfähigkeit der Grid-Infrastruktur zu untersuchen, hat man drei zentrale Beispiele rechenintensiver ingenieurwissenschaftlicher Anwendungen ausgewählt:

1. Gekoppelte Multiskalenprobleme,
2. gekoppelte multidisziplinäre Probleme und
3. verteilte simulationsbasierte Optimierung.

Diese Anwendungsgebiete kommen aus den Bereichen Gießereitechnik, Umformung, Grundwasserströmung- und -transport, Turbinensimulation sowie Interaktion von Strömungs- und Strukturmechanik.

Lösungsansatz

Das Fraunhofer SCAI arbeitet im Projekt daran, multidisziplinäre Simulationen in einer Grid-Infrastruktur nutzbar zu machen. Zum Einsatz kommt dabei die vom SCAI entwickelte Kopplungssoftware MpCCI (siehe Kapitel Simulationsanwendungen). In Zusammenarbeit mit dem Institut für Strömungsmechanik und Hydraulische Strömungsmaschinen der Universität Stuttgart sollen am Beispiel einer Turbine Strömungs- und Struktursimulation miteinander gekoppelt werden. Dazu wird die Software MpCCI so angepasst, dass sie sich in ein Web Service Resource Framework (WSRF) integrieren lässt. Das WSRF ist ein in der Grid-Welt etablierter Standard für Service orientierte Architekturen, den beispielsweise die weit verbreitete Grid-Middleware »GLOBUS Toolkit 4« verwendet. Die Umstellung der Kommunikationsschnittstellen ermöglicht MpCCI die Kopplung von Service orientierten Simulationscodes in einer Grid-Umgebung. Die Integration in eine Grid-Umgebung bietet weitere Vorteile. Zu nennen sind eine Sicherheitsinfrastruktur sowie ein Ressource- und Lizenzmanagement.

Kontakt

Dipl.-Mathematiker
 Marc Lob
 Tel.: 02241 / 14 - 2369
 Fax.: 02241 / 14 - 2181
 marc.lob@scai.fraunhofer.de

Publikationen aus den Jahren 2004 und 2005 (Auswahl)

2004

Bäuerle, Christof; Thole, Clemens-August; Trottenberg, Ulrich:

DesParO – A Design Parameter Optimisation Toolbox using an Iterative Kriging Algorithm.

In: ERCIM News (2004), Nr. 56, S. 32-33

Crass, Torsten; Antes, Iris; Basekow, Rico; Bork, Peer; Buning, Christian; Christensen, Maik; Claussen, Holger; Ebeling, Christian; Ernst, Peter; Gailus-Durner, Valerie:

The Helmholtz Network for Bioinformatics: an integrative web portal for bioinformatics resources.

In: Bioinformatics 20 (2004), Nr. 2, S. 268-270

Der, Uwe; Ernst, Thilo; Eckert, Klaus-Peter; Falkner, Jürgen; Hoheisel, Andreas; Pfreundt, Franz-Joseph; Weisbecker, Anette; Ziegler, Wolfgang:

Fraunhofer grid alliance – From grid-based e-science to industrial applications

In: ERCIM News (2004), Nr. 59, S. 20-21

Garms, Onno; Heckmann, Ralf; Rank, Stefan:

Contpack – Maximising the Volume Utilisation of Containers.

In: ERCIM News (2004), Nr. 56, S. 18-20

Gaspar, Francisco J.; Oosterlee, Cornelis W.; Wienands, Roman:

A systematic comparison of coupled and distributive smoothing in multi-grid for the poroelasticity system.

In: Numerical Linear Algebra with Applications 11 (2004), Nr. 2-3, S. 93-113

Gieger, Christian; Hanisch, Daniel; Fluck, Juliane; Mevissen, Heinz-Theodor; Tresch, Achim; Deneke, Hartwig:

Using text mining networks for the context specific interpretation of gene expression data.

In: Biometrical journal 46 (2004), Nr. S1, S. 56

Grigoriev, Dimitri; Schwarz, Fritz:

Factoring and Solving Linear Partial Differential Equations.

In: Computing 73 (2004), S. 179-197

Grund, Helmut; Ziegler, Wolfgang:

Resource management in an optical grid testbed.

In: ERCIM News (2004), Nr. 59, S. 37-38

Häfner, Frieder; Stüben, Klaus:

Simulation and Parameter Identification of Oswald's Salt-pool Experiments with the SAMG Multigrid-Solver in the Transport code MODCALIF.

In: Proceedings of the Conference »Finite-Element Models, MODFLOW, and More 2004: Solving Groundwater Problems«, September 13-16, 2004, Karlovy Vary (Carlsbad), Czech Republic

Hanisch, Daniel; Fundel, Katrin; Mevissen, Heinz-Theodor; Zimmer, Ralf; Fluck, Juliane:

ProMiner: Organism specific protein name detection using approximate string matching.

In: A critical assessment of text mining methods in molecular biology (EMBO Workshop, Granada, Spain, March 28-31, 2004).

Heidelberg: EMBO, 2004

Hanisch, Daniel; Sohler, Florian; Zimmer, Ralf:

TOPNET: an application for interactive analysis of expression data and biological networks.

In: Bioinformatics 20 (2004), S. 1470-1471

Kumpf, Kai; Hofmann, Martin:

Bioinformatics in the semantic grid.

In: ERCIM News (2004), Nr. 59, S. 54-55

Lengauer, Thomas; Lemmen, Christian;

Rarey, Matthias; Zimmermann, Marc:

Novel technologies for virtual screening.

In: Drug Discovery Today 9 (2004), Nr. 1, S. 27-34

Maaß, Astrid:

Modellierung von Protein-Ligand-Komplexen: Validierung und Vorhersage von ausgewählten Fällen.

Aachen, Shaker Verlag, 2004

(Fraunhofer series in information and communication technology, 2004, 1).

Zugl.: Bonn, Univ., Diss., 2003

Sohler, Florian; Hanisch, Daniel; Zimmer, Ralf:

New methods for joint analysis of biological networks and expression data.

In: Bioinformatics 20 (2004), S. 1517-1521

Springstubbe, Stephan; Klein, Jürgen; Krämer-Fuhrmann, Ottmar:

Numerical Simulation through Web Services.

In: ERCIM News (2004), Nr. 56, S. 51-53

von Oehsen, Niklas; Sommer, Ingolf; Lengauer, Thomas:

ARBY – automatic protein-structure prediction using profile-profile alignment and confidence measures.

In: Bioinformatics 20 (2004), S. 2228-2235

Zien, Alexander:

Computational analysis of gene expression data.

Aachen, Shaker-Verlag, 2004

(Fraunhofer series in information and communication technology 2004). Zugl.:

Bonn, Univ., Diss., 2003

Zimmermann, Marc:

Rechnerunterstützte Analyse von HTS-Daten.

Aachen, Shaker-Verlag, 2004,

(Fraunhofer series in information and communication technology, 2004, 5).

Bonn, Univ., Diss., 2004

2005

Clees, Tanja:

AMG Strategies for PDE Systems with Applications in Industrial Semiconductor Simulation.

Aachen, Shaker-Verlag, 2005
(Fraunhofer series in information and communication technology, 2005, 6).
Köln, Univ., Diss., 2004

Cristiano, Kevin; Gruber, Ralf; Keller, Vincent; Kuonnen, Pierre; Maffioletti, Sergio; Nellari, Nello; Sawley, Marie-Christine; Spada, Michela; Tran, Trach-Minh; Wieder, Philip; Wäldrich, Oliver; Ziegler, Wolfgang:

Integration of ISS into the VIOLA Meta-scheduling Environment.

In: CoreGRID Integration Workshop 2005, Pisa, Proceedings
New York, Springer, 2006

Fluck, Juliane; Hofmann, Martin; Hahn, Udo; Wermter, Joachim; Schulz, S. :

Text mining in den Life Sciences.

In: Deutsche Zeitschrift für klinische Forschung (2005), Nr. 5/6, S. 20-26

Hanisch, Daniel; Fundel, Katrin; Mevissen, Heinz-Theodor; Zimmer, Ralf; Fluck, Juliane:

ProMiner: Rule based protein and gene entity recognition.

In: BMC bioinformatics 6 (2005), Nr. 1, S. 14

Janoske, Uwe; Dehning, Carsten; Lanfrit, M. ; Habig, Ralf:

Boundary data exchange between CFD and radiation.

In: Mesh-based parallel code coupling interface (6th MpCCI User Forum; February 22nd and 23rd, 2005 at Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin). Proceedings; Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2005, S. 86-93

Kuhlmann, Annette; Vetter, Ralf-Michael; Lübbling, Christoph; Thole, Clemens-August:

Data mining on crash simulation data.

In: Perner, P.:
Machine learning and data mining in pattern recognition (4th international conference Proceedings, MLDM 2005, Leipzig, Germany, July 9 – 11, 2005). Berlin, Springer, 2005, S. 558-569

Missier, Paolo; Wieder, Philipp; Wolfgang Ziegler:

Semantic support for meta-scheduling in Grids.

In: PPAM Conference 2005, Poznan, Workshop on Knowledge and Data Management, Proceedings
New York, Springer, 2006

Rümpler, Christian; Reichert, F.; Stammberger, H.; Terhoeven, P.; Berger, F.:

Experimentelle und numerische Untersuchung des Lichtbogenlaufverhaltens.

In: 18. Albert-Keil-Kontaktseminar »Kontaktverhalten und Schalten«, Karlsruhe, 2005

Scholl, Uwe:

New mapping schemes and tools.

In: Mesh-based parallel code coupling interface (6th MpCCI User Forum; February 22nd and 23rd, 2005 at Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin). Proceedings; Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2005, S. 106-111

Streit, Achim; Wieder, Philipp; Wäldrich, Oliver; Ziegler, Wolfgang:

In: On Scheduling in UNICORE – Extending the Web Services Agreement based Resource Management Framework.

ParCo 2005, Proceedings, 2006

Thole, Clemens-August:

Datenkompression von Simulationsergebnissen.

In: Europäisches Patentblatt (2005), 20050316

Wieder, Philipp; Ziegler, Wolfgang:

Bringing Knowledge to Middleware – Grid Scheduling Ontology.

In: CoreGRID Series, Future Generation Grids, CoreGRID Integration Workshop 2004, Dagstuhl, November 2004, New York, Springer, 2006, S. 47 - 59

Wieder, Philipp; Wäldrich, Oliver; Ziegler, Wolfgang:

A Meta-Scheduling Service for Co-allocating Arbitrary Types of Resources.

PPAM Conference 2005, Poznan, Grid Resource Management Workshop, Proceedings
Springer, LNCS

Wolf, Klaus:

Multi-physics simulation through code coupling.

In: Mesh-based parallel code coupling interface (6th MpCCI User Forum; February 22nd and 23rd, 2005 at Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin). Proceedings; Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2005, S. 12-19

Zacharias, Albert; Rümpler, Christian:

Electric arc simulations.

In: Mesh-based parallel code coupling interface (6th MpCCI User Forum; February 22nd and 23rd, 2005 at Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin). Proceedings; Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2005, S. 122-125

Zimmermann, Marc; Thi, L. T. B.; Hofmann, Martin:

Combating illiteracy in chemistry.

In: ERCIM News (2005), Nr. 60, S. 40-41

Graduierungsarbeiten aus den Jahren 2004 und 2005

Dissertationen

Clees, Tanja:

AMG Strategies for PDE Systems with Applications in Industrial Semiconductor Simulation,
Universität zu Köln, 2004.

Hanisch, Daniel:

New analysis methods for gene expression data via construction and incorporation of biological networks,
Universität München, 2004

von Öhsen, Niklas:

A novel profile-profile alignment method and its application in fully automated protein structure prediction,
Universität München, 2005.

Zimmermann, Marc:

Rechnerunterstützte Analyse von HTS-Daten,
Universität Bonn, 2004.

Diplomarbeiten

Bock, Martin:

Wirtschaftsnahe Forschung. Die Entwicklung eines Konzeptes zur Vermarktung von Forschungsergebnissen anhand des Geschäftsfeldes Simulationsanwendungen am Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen (SCAI),
Technische Universität Ilmenau, 2004.

Dach, Holger:

Ein Informationssystem zur Verwaltung und Analyse von biochemischen Interaktionen,
Universität Bonn, 2005.

Fey, Tanja:

Validation of chemical structure recognition software for 2D drawings and a following graphical error curing,
Fachhochschule Bonn Rhein-Sieg, 2005.

Gauß, Karen Frederike:

Numerische Simulation gekoppelter Wärmeleitungsprobleme mit Anwendung in der Thermographie,
Universität zu Köln, Diplom, 2004.

Gladbach, Katharina:

Partitionierte Verfahren für Probleme der Fluid-Struktur-Wechselwirkung,
Universität zu Köln, 2005.

Le Thuy, Buy Thi:

Machine Learning für die intelligente Analyse großer Datenmengen,
Universität Würzburg, 2005.

Möritz, Markus:

Die Marke Fraunhofer-Institut SCAI,
Fachhochschule Köln: Köln International School of Design, 2005.

Master-Arbeiten

Faisal, Ahmed:

Analysis of Data Transfer Methods Between Non-Matching Meshes in Multiphysics Simulations,
Universität Nürnberg, 2005.

Galunic, Goran:

Parallelisierung des Galerkin Produkts im AMG Verfahren mit OpenMP.
FH Bonn-Rhein-Sieg, Master of Computer Sciences, 2005.

Horn, Eva:

Generierung einer Ontologie für die Klassifikation von Docking-Tools,
Fachhochschule Bingen, 2005.

Vemula, Rajendra:

Fluid structure interaction and thermal coupling in automobile engine exhaust manifold using Mesh Based Parallel Code Coupling Interface (MpCCI),
Universität Bochum, 2005.

Wäldrich, Oliver:

Meta-Scheduling-Architekturen in komplexen Grid-Umgebungen,
Fachhochschule Bonn Rhein-Sieg, 2005.

Bachelor-Arbeiten

Gündel, Michaela:

Entwicklung von Strategien zur Erkennung von Schreibvarianten bei der automatischen Namenserkennung von Proteinnamen,
Fachhochschule Bonn Rhein-Sieg, 2005.

Oster, Marius:

PlantMiner: Automatisierte Annotation von Pflanzengenomen und eine Pflanzenontologie mit Hilfe von Text Mining,
Fachhochschule Bonn Rhein-Sieg, 2005.

Mitarbeit in Gremien Lehrtätigkeiten

Krapp, Michael

- ERCIM-Newsletter, Editorial Board
- Stellvertretender Vorsitzender der Bonner Journalisten-Vereinigung im Deutschen Journalisten-Verband (DJV)
- Presseclub Bonn (Mitglied im Vorstand)
- Bonner Medienclub

Stüben, Klaus

- Copper Mountain Conference on Multigrid Methods, Organization Committee
- Scientific Advisory Committee, International FEFLOW Conference

Trottenberg, Ulrich

- Fraunhofer-IuK-Gruppe, stellvertretender Vorsitzender
- Beirat des C.F. Gauss Minerva Center for Scientific Computation, Vorsitzender
- Techn.-wissenschaftlicher Beirat der PALLAS GmbH, Vorsitzender
- ERCIM Board of Directors
- Wissenschaftlicher Beirat des Potsdam-Instituts für Klimafolgenforschung (PIK)
- Nationaler Koordinierungsausschuss des Wissenschaftsrats zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern
- Vorstand des Kuratoriums der Wissenschaftspressekonferenz

Ziegler, Wolfgang

- Global Grid Forum, Leiter der Arbeitsgruppe GRAAP
- Gutachter für IEEE SCC 2004 Grid and Utility Computing Track, Shanghai, September 2004
- Program Committee European Grid Conference, Amsterdam, Februar 2005
- Program Committee PPAM Konferenz, Poznan, September 2005

Lob, Marc

Mathematik II (Differentialgleichungen) für Elektrotechnik,
Fachhochschule Bonn Rhein-Sieg,
Wintersemester 2004/2005.

Lorentz, Rudolph

Algorithmische Mathematik für Wirtschaftsinformatiker,
Universität zu Köln,
Wintersemester 2005/2006.

Hofmann, Martin

Biodatenbanken,
Bonn-Aachen International Center for Information Technology, Bonn,
Wintersemester 2004/2005.

Karabek, Ute

Vertretungsprofessur für Programmieren und Software Engineering:
Programmieren I und II, Numerik I und II,
RheinAhrCampus Remagen der
Fachhochschule Koblenz,
Wintersemester 2004/2005.

Kumpf, Kai

Life Science Informatics (Praktikum),
Bonn-Aachen International Center for Information Technology, Bonn,
Wintersemester 2004/2005.

Trottenberg, Ulrich

Numerische Mathematik II,
Seminar über Interpolationsverfahren,
Universität zu Köln,
Wintersemester 2004/2005.

Trottenberg, Ulrich

Numerik partieller Differenzialgleichungen,
Seminar über Datenkompressionsverfahren,
Universität zu Köln,
Sommersemester 2005.

Trottenberg, Ulrich

Mehrgittermethoden,
Seminar über Maschinelles Lernen,
Universität zu Köln,
Wintersemester 2004/2005.

von Öhsen, Niklas

Introduction to applied biostatistics,
Bonn-Aachen International Center for Information Technology, Bonn,
Sommersemester 2005.

Zimmermann, Marc

Cheminformatics
Bonn-Aachen International Center for Information Technology, Bonn,
Sommersemester 2005.

Informationen zur Anfahrt

Mit dem Auto

Auf der A59 bis Abfahrt Bonn-Beuel, Hangelar; dann rechts abbiegen auf die B56 Richtung Sankt Augustin und Siegburg (ostwärts); in Höhe von Sankt Augustin-Hangelar (Rechtsabbieger-Spur, Ampel, Wegweiser nach Schloss Birlinghoven und Bonn-Hoholz) rechts abbiegen in die Konrad-Adenauer-Straße; nach ca. drei Kilometern ist links die Einfahrt zum Schloss.

Über die A3 kommend bis Autobahnkreuz Sankt Augustin/Hennef. Weiter auf die A 560 Richtung Bonn bis Ausfahrt Siegburg-Mülldorf. Auf der B56 weiter Richtung Bonn. An der Ampel in Sankt Augustin-Hangelar dem Wegweiser nach Schloß Birlinghoven und Bonn-Hoholz folgend links abbiegen in die Konrad-Adenauer-Straße. Nach 3 km liegt auf der linken Seite die Einfahrt zum Institutszentrum Schloss Birlinghoven.

Mit der Bahn

Vom Hauptbahnhof Bonn ab Bushaltestplatz B3 mit Bus 634 nach Hoholz bis zur Endstation (Schloss Birlinghoven, Hoholz); Bus fährt zu typischen Zeiten alle 20 Minuten, planmäßige Fahrzeit 35 Minuten.

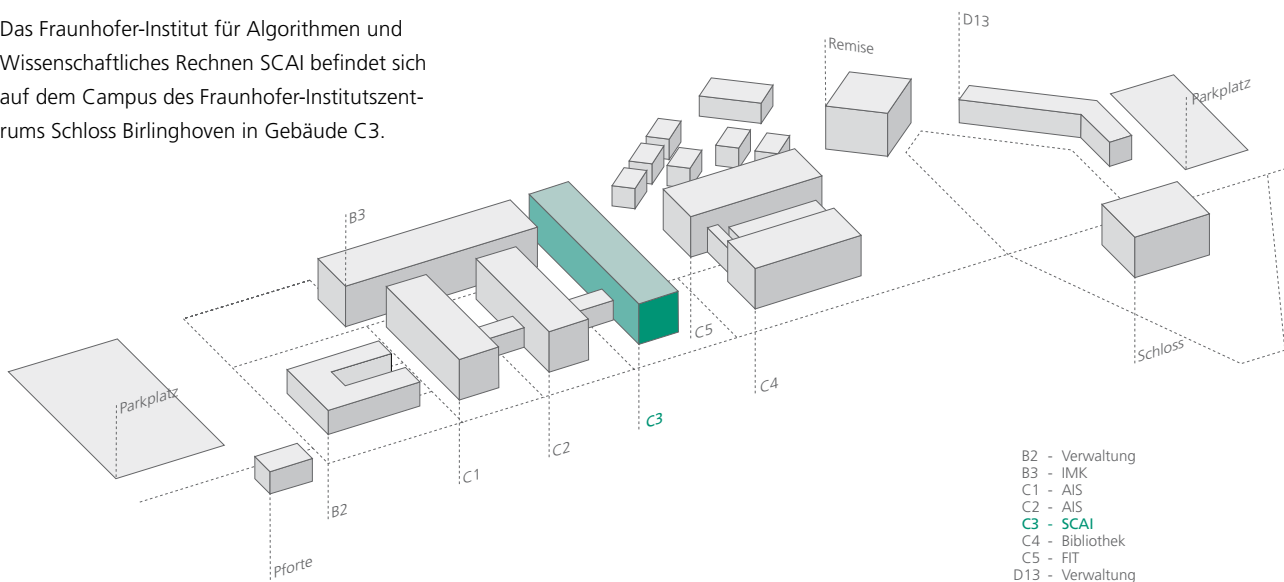
Vom Bahnhof Siegburg/Bonn (ICE Haltepunkt der neuen rechtsrheinischen Strecke Köln – Frankfurt) dauert die Fahrt mit dem Taxi zum Schloss Birlinghoven 10 bis 15 Minuten und kostet circa 15 Euro.

Mit dem Flugzeug

- Vom Flughafen Köln/Bonn mit der Bahn zum Bahnhof Bonn-Beuel, planmäßige Fahrzeit 36 Minuten. Von dort mit Bus 538 (circa 20 Minuten), Bus 634 (circa 35 Minuten) oder Taxi (circa 7 Kilometer) bis Schloss Birlinghoven.
- Vom Flughafen Köln/Bonn mit dem Bus 670 nach Bonn Hauptbahnhof, meist alle 20 Minuten, planmäßige Fahrzeit 30 Minuten; weiter wie oben. (Alternative Taxi: circa 25 Kilometer, 20 Minuten, 30 Euro).



Das Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI befindet sich auf dem Campus des Fraunhofer-Institutszentrums Schloss Birlinghoven in Gebäude C3.



Adressen

Fraunhofer-Institut für Algorithmen und
Wissenschaftliches Rechnen SCAI

Schloss Birlinghoven
53754 Sankt Augustin

Tel.: 02241 / 14 - 2760
Fax.: 02241 / 14 - 2460
info@scai.fraunhofer.de
www.scai.fraunhofer.de

Institutsleitung

Univ.-Prof. Dr. Ulrich Trottenberg
(Institutsleiter)

Tel.: 02241 / 14 - 2760
Fax.: 02241 / 14 - 2460
trottenberg@scai.fraunhofer.de

Dr. Johannes Linden
(stellvertretender Institutsleiter)
Tel.: 02241 / 14 - 2910
Fax.: 02241 / 14 - 2102
johannes.linden@scai.fraunhofer.de

Planung und Controlling

Dipl.-Math. Carl Vogt
Tel.: 02241 / 14 - 2692
Fax.: 02241 / 14 - 2095
carl.vogt@scai.fraunhofer.de

Marketing und Kommunikation

Dipl.-Journ. Michael Krapp
Tel.: 02241 / 14 - 2935
Fax.: 02241 / 14 - 2167
michael.krapp@scai.fraunhofer.de

Impressum

© 2006

Fraunhofer-Institut für Algorithmen
und Wissenschaftliches Rechnen SCAI,
Sankt Augustin

Alle Rechte vorbehalten.

Ohne schriftliche Genehmigung des
Herausgebers ist es nicht gestattet, den
Bericht oder Teile daraus in irgendeiner
Form durch Fotokopie, Mikrofilm oder
andere Verfahren zu reproduzieren oder
in eine für Maschinen, insbesondere
Datenverarbeitungsanlagen, verwendbare
Form zu übertragen. Dasselbe gilt für die
öffentliche Wiedergabe.

Warennamen werden ohne Gewährleistung
der freien Verwendbarkeit benutzt.

Der Herausgeber bedankt sich bei den
Kooperationspartnern für die überlas-
senen Bilder.

Redaktion

Dipl.-Journ. Michael Krapp

Gestaltung

Jennifer Sauerland
Till Martensmeier
Markus Möritz

Druck

Köllen Druck und Verlag GmbH, Bonn

Fraunhofer-Institut für Algorithmen und
Wissenschaftliches Rechnen SCAI

Schloss Birlinghoven
53754 Sankt Augustin

Tel.: 0 22 41 / 14 - 27 60
Fax.: 0 22 41 / 14 - 24 60

info@scai.fraunhofer.de
www.scai.fraunhofer.de

