

Jahresbericht 2001



Fraunhofer Institut
Algorithmen und Wissen-
schaftliches Rechnen

© Fraunhofer-Institut für Algorithmen und
Wissenschaftliches Rechnen SCAI 2002

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche 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 das Recht der öffentlichen
Wiedergabe.

Warennamen werden ohne Gewährleistung der freien Ver-
wendbarkeit benutzt.

Der Herausgeber bedankt sich bei den Kooperations-
partnern für die Zuverfügungstellung der entsprechenden
Bilder.

Adresse:
Fraunhofer Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches
Rechnen SCAI
Schloss Birlinghoven
D - 53754 Sankt Augustin


Telefon: +49 (0) 2241 14-2760
Telefax: +49 (0) 2241 14-2460
E-Mail: info@scai.fhg.de
Internet: www.scai.fhg.de

Redaktion:
Dr. Johannes Linden
Dipl.-Journ. Michael Krapp
Susanne Ehling
Barbara Maskell

Gestaltung:
Dipl.-Designer Jens Tomkowitz
Kreativbüro Tomkowitz, Bonn

Druck: Köllen Druck + Verlag GmbH, Bonn

Inhalt

	
Vorwort	4
Das Institut im Profil	6
Projekt-Highlights	8
Das Institut in Zahlen	10
Die Fraunhofer IuK-Gruppe	12
Die Fraunhofer-Gesellschaft auf einen Blick	13
Abteilung Angewandte Numerik	14
Schnelle Lösung partieller Differentialgleichungen	16
Multidisziplinäre Probleme	20
Meteorologie und Klimasimulation	22
Abteilung Schnelle Simulationsverfahren	26
Methoden und Werkzeuge für die Crash Simulation	28
Dünnbesetzte Matrixprobleme	31
Parameter Optimierung	37
Datenparallele Compiler	40
Abteilung Integrierte Softwaresysteme	42
Softwarelösungen für die integrierte und multidisziplinäre Simulation	44
Grid Computing	50
Abteilung Bioinformatik und Optimierung	52
Proteine: Sequenz, Struktur, Funktion	54
Rechnergestützter Wirkstoffentwurf	58
Bioinformatische Methoden zur Therapieoptimierung	60
Computational Chemistry	61
Diskrete Optimierung	64
Anhang	68
Publikationen	
Graduierungsarbeiten	
Firmengründungen	
Vorträge	
Lehrveranstaltungen	
Mitgliedschaften und Gremien	



Prof. Dr. Ulrich Trottenberg
Institutleiter

Das Jahr 2001 markiert einen Einschnitt im Leben des Instituts für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen (SCAI). Nach vielen Monaten einer turbulenten Diskussion um die Zusammenführung von GMD und Fraunhofer-Gesellschaft wurde der formale Akt der Fusion im Juli abgeschlossen. Das Institut ist seither ein Fraunhofer-Institut. In dem neuen Umfeld ändern sich Ziele und Werte. Während Grundlagenforschung und Anwendungsentwicklung bisher im Institut gleichgewichtig vertreten waren, verschiebt sich der Schwerpunkt auf die Anwendungen. Das Institut nimmt diese Aufgabe offensiv an.

Wir sind mit unseren Inhalten und mit unserem Selbstverständnis für diese Herausforderung gut gerüstet. Unser Kernthema war und bleibt die Simulation. Die aktuellen Schwerpunkte im Berichtsjahr bildeten die numerische Simulation und die Bioinformatik. Unsere Arbeiten sind einerseits geprägt durch umfangreiche Algorithmenentwicklungen. In diesem Feld liegen traditionell auch unsere grundlegenden Arbeiten. Andererseits führen wir Anwendungs- und Softwareentwicklungen für Kooperationspartner und Kunden durch und erarbeiten Softwarewerkzeuge und -komponenten, die eine einfachere und effizientere Nutzung von Simulationssoftware ermöglichen. Das Spektrum der Anwendungen ist breit: Strömungs- und Strukturmechanik, Meteorologie, Crashsimulation, Packungs- und Zuschnittprobleme, rechnergestützter Medikamentenentwurf, Visualisierungssoftware, Werkzeuge für die parallele Programmierung u.v.m.

Zum Profil des Instituts gehören seit vielen Jahren auch unsere Arbeiten über Mehrgitterverfahren zur numerischen Lösung von partiellen Differentialgleichungen. Das Gebiet hat über

die neunziger Jahre hinweg einen unerhörten Aufschwung gefunden. Die Verfahren fanden auf breiter Front Eingang in die unterschiedlichsten Anwendungen und gehören vielerorts heute zum Standard. Auf der Basis unserer langjährigen Forschungs- und Entwicklungsarbeit haben wir im letzten Jahr dazu eine umfassende Darstellung der Mehrgittermethodik veröffentlicht (U. Trottenberg, C. Oosterlee, A. Schüller: Multigrid, Academic Press) die sich ebenso an Verfahrensentwickler und Anwender richtet und auf große Resonanz gestoßen ist. Viele Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des Instituts haben zu diesem Buch beigetragen und ihre Ergebnisse zur Verfügung gestellt. Ihnen allen möchte ich herzlich danken.

Der Bedarf der Wirtschaft nach Methoden, Anwendungen und Dienstleistungen rund um die Themen Simulation und virtuelles Engineering ist groß und weiter wachsend. Die Mathematik ist es, die die methodische Basis liefert. Mit ihren Modellen schafft sie in ihrer Sprache ein Abbild des Realen, das im Computer für Vorhersagen, Analysen und Optimierungen genutzt werden kann. Es gibt heute kaum mehr einen technischen, wirtschaftlichen oder wissenschaftlichen Bereich, der von der Mathematik und ihren Methoden, Algorithmen und Modellen nicht profitiert. Diese angewandte Mathematik ist bei weitem keine Wissenschaft im Elfenbeinturm. Sie ist überall, sie durchdringt unsere Welt - und sie schafft einen Markt. Diesen Markt sprechen wir als Fraunhofer-Institut an, an ihm orientieren wir unsere Themen. Eine besondere Stärke des Instituts liegt in der Verbindung mathematischer und informatischer Kompetenz. Während sich Mathematik und Informatik im universitären Umfeld an vielen Stellen auseinander entwickeln, sind beide Felder im Institut SCAI eng verzahnt. Wir ver-

stärken unser Angebot an die Wirtschaft, unser breit gefächertes mathematisch-informatisches Know How in der Simulation zu nutzen, und bauen unser Entwicklungs-, Dienstleistungs- und Beratungspotential aus.

Mit der Integration in die Fraunhofer-Gesellschaft wird auch die Verbindung des Instituts zur Universität auf eine neue Grundlage gestellt. Das Land Nordrhein-Westfalen und die Universität zu Köln haben - mit Unterstützung der Fraunhofer-Gesellschaft - angeboten, meinen Lehrstuhl für Angewandte Mathematik auszubauen und dafür eine Ausstattung mit Personal- und Sachmitteln bereitgestellt. Die bisher in der GMD praktizierte Universitätsanbindung der Institutsleiter nach dem "Jülicher Modell" wird für unser Institut damit auf die in der Fraunhofer-Gesellschaft übliche und für die Arbeit eines Fraunhofer-Instituts sehr bewährte volle Einbindung des Institutsleiters in die universitäre Forschung und Lehre umgestellt. Für dieses Angebot, das ich ab dem Sommersemester 2002 wahrnehmen werde, danke ich der Universität, dem Land NRW und der Fraunhofer-Gesellschaft.

Das Jahr 2001 war ein Jahr der Weichenstellungen. Es wäre unrealistisch, wenn man in der Rückschau nur die positiven Wirkungen nennen würde. Besonders schmerzlich ist der Weggang meines Kollegen und Freundes Prof. Thomas Lengauer. Er war seit 1992 mit mir gemeinsam Institutsleiter in SCAI und hat die Arbeitsgebiete Bioinformatik und diskrete Optimierung aufgebaut. Thomas Lengauer ist zum 1. Oktober 2001 dem Ruf der Max-Planck-Gesellschaft als Direktor des Instituts für Informatik in Saarbrücken gefolgt. Zugleich haben weitere Mitarbeiter aus seiner Bioinformatik-Gruppe Rufe an Universitäten und Forschungsinstitute angenommen. Die Neupositionierung des Forschungsge-

bietes Bioinformatik, das - verbunden mit dem Namen Thomas Lengauer - in den vergangenen zehn Jahren zu einem ganz wesentlichen und in Forschung und Industrie hoch anerkannten Bestandteil des Institutsprofils geworden ist, ist damit eine wichtige und schwierige Herausforderung. Außer Frage steht, dass wir das Forschungsgebiet in einer neu auszurichtenden Form in unserem Institut erhalten wollen. Die kommenden Monate werden zeigen, ob dies gelingt. Ich bin dankbar für die Unterstützung, die wir von verschiedener Seite dazu erfahren - vom Vorstand der Fraunhofer-Gesellschaft, vom Bund und dem Land Nordrhein-Westfalen.

Ein Ziel der Fusion von FhG und GMD war die Bündelung der Kräfte in der "Fraunhofer-Gruppe Informations- und Kommunikationstechnik". Diese Gruppe ist mit ihren 15 Mitgliedsinstituten eine der wichtigsten Forschungsverbände Europas auf dem Gebiet der Informationstechnik. Bei ihrer Bildung wurden Prof. J. Encarnação zu ihrem Vorsitzenden und ich zu ihrem stellvertretenden Vorsitzenden gewählt. Wir haben damit auch eine globale, strategische Verantwortung übernommen. Ich bedanke mich bei meinen Kollegen für ihr Vertrauen.

Für ein traditionell mathematisch und algorithmisch orientiertes Institut wie SCAI ist eine Mitgliedschaft in der Gruppe der informations- und kommunikationstechnischen Institute naheliegend, aber nicht unbedingt zwingend. Wir sind mit unserer Kernausrüstung auf Anwendungen der numerischen Simulation, der Optimierung und der Bioinformatik den unterschiedlichsten Fachrichtungen - von der Produktionstechnik bis zu Life Science - verbunden und am Aufbau von Kooperationen mit den entsprechenden Instituten und Verbänden der Fraunhofer-Gesellschaft sehr interessiert. Wir sehen es als unsere Aufgabe an, hier Brücken zu schlagen - Brücken aus der Mathematik und Informationstechnik in die Anwendungen der Simulation in vielen Fachgebieten und Branchen. Besondere Unterstützung haben wir vom Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik in Kaiserslautern erfahren. Für manchen guten Ratschlag auf unserem Weg in die Fraunhofer-Gesellschaft bedanke ich mich herzlich bei meinen Kollegen Prof. Dieter Prätzel-Wolters und Prof. Helmut Neunzert.

Sankt Augustin, im Februar 2002



Ulrich Trottenberg

Ziele

Verfahren und Anwendungen der Computersimulation spielen in vielen Branchen heute eine herausragende Rolle. Sie unterstützen die Produkt- und Verfahrensentwicklung, sie bieten die Möglichkeit zur Optimierung und sie liefern Einsichten, die eine experimentelle Vorgehensweise nicht oder nur unter hohen Kosten bringen würde. Durch Computersimulation werden Kosten gesenkt und Entwicklungszeiten reduziert.

Computersimulation ist ein Gebiet, das Mathematik, Informatik mit den Natur- und Ingenieurwissenschaften verknüpft. Die Expertise von SCAI liegt im wissenschaftlichen Rechnen, d.h. bei den mathematischen und informatischen Methoden und Algorithmen, in der Softwareentwicklung, der Visualisierung und in der Programmierung der unterschiedlichsten Rechnersysteme. Wir bringen unser Wissen und unsere Entwicklungen in Kooperationsprojekte mit Anwendern aus Industrie und Wissenschaft ein. In unserer Forschung entwickeln wir die Technologien dafür und erarbeiten innovative Beiträge zur Weiterentwicklung unserer Fachgebiete in angewandter Mathematik und Informatik. Unsere Aufgabe sehen wir darin, Lösungen zu schaffen für die Problemstellungen bei unseren Partnern und Kunden.

Kurzporträt

Das Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen ist im Jahre 1992 aus dem Institut für Methodische Grundlagen der Informationstechnik der damaligen Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung hervorgegangen. Seit Juli 2001 gehört das Institut zur Fraunhofer-Gesellschaft.

Die Historie des Instituts ist im informatischen Bereich stark geprägt durch Theorie und Praxis der Petrinetze (Carl Adam Petri war bis 1990 einer der Leiter des Instituts) und im numerischen Bereich durch Entwicklung und Anwendung der Mehrgittermethoden).

SCAI unterhält vielfältige nationale wie internationale Kooperationsbeziehungen. Das Institut ist Mitglied der Fraunhofer Unternehmensgruppe Informations- und Kommunikationstechnik. Die Verbindung zur akademischen Forschung und Lehre ist über den Lehrstuhl des Institutsleiters an der Universität Köln gegeben. Mit dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt ist SCAI im Rahmen einer strategischen Allianz über die DLR-Forschungsgruppe SISTEC zum Software-Engineering und zur Software-Qualitätssicherung verbunden.

Rund 80 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, vorwiegend Mathematiker und Informatiker, arbeiten in den vier Fachabteilungen des Instituts. Das Jahresbudget von SCAI liegt bei rund 10 Millionen Euro. Geleitet wird das Institut von Prof. Dr. Ulrich Trottenberg.

Geschäftsfelder

Numerische Lösungen

Algorithmen- und Softwareentwicklung für Systeme von Partiellen Differentialgleichungen. Für die Lösung großer linearer Gleichungssysteme werden effiziente Bibliotheksroutinen entwickelt und auf spezielle Anwendungen zugeschnitten. Anwendungen u.a. in Strömungs- und Strukturmechanik, Meteorologie und Klimaforschung, Ölreservoirsimulation.

Multidisziplinäre Kopplung

Simulation gekoppelter und interagierender Prozesse, klassisches Beispiel Strömungs- und Strukturkopplung. Mit dem System MpCCI wird eine Softwarebasis für die Kopplung von (kommerziellen) Simulationscodes geboten. Entwickelt werden spezielle Kundenlösungen und Services für Softwarehersteller und Anwender:

Optimierung

Lösungen für Optimierungsaufgaben in technischen und industriellen Anwendungen, zum Beispiel optimaler Ressourceneinsatz, Minimierung von Transportkapazitäten, Erhöhung von Packungsdichten, Zuschnittoptimierung für Textilien, Bleche u.v.m.

Data Mining

Nutzung von Data Mining Technologie für ingenieurwissenschaftliche Anwendungen. Intelligente Interpretation vorhandener Simulationsergebnisse und Daten für Optimierungszwecke.

Paralleles Rechnen

Parallelisierung von industriellen Anwendungen, Entwicklung paralleler Kernalgorithmen, Verfahren zur Lastverteilung, Benchmark-Studien, Grid-Computing. Rechnerarchitekturen umfassen massiv parallele und Shared Memory Systeme, parallele und vektorielle Superrechner, PC-Custer und vernetzte heterogene Systeme.

Bioinformatik

Verfahrens – und Softwareentwicklungen zur Analyse von Sequenz, Struktur und Funktion von Proteinen sowie für den rechnergestützten Entwurf von Wirkstoffmolekülen und für die Suche in Wirkstoffdatenbanken. Methoden zur Analyse von Genexpressionsdaten.

Zu allen Geschäftsfeldern bietet das Institut Beratung, Problemanalyse und Projektentwicklung an. Es werden Algorithmen und Software entwickelt, die in die beim Kunden vorhandene Hard- und Softwareumgebung angepasst werden. Gemeinsam mit Softwarehäusern und SpinOff-Unternehmen werden zudem eigene Softwareprodukte und Benutzer-Support angeboten.

Organigramm

Institutsleiter	Prof. Dr. Ulrich Trottenberg Prof. Dr. Thomas Lengauer PhD (bis 30.9.01)		+49 (0) 2241 14-2760
Abteilungen	Angewandte Numerik	Dr. Anton Schüller	+49 (0) 2241 14-2572
		Dr. Barbara Steckel (stv.)	+49 (0) 2241 14-2768
		Dr. Wolfgang Joppich (stv.)	+49 (0) 2241 14-2748
	Schnelle Simulationsverfahren	Clemens-August Thole	+49 (0) 2241 14-2739
		Dr. Klaus Stüben (stv.)	+49 (0) 2241 14-2749
	Integrierte Softwaresysteme	Ottmar Krämer Fuhrmann	+49 (0) 2241 14-2202
Klaus Wolf (stv.)		+49 (0) 2241 14-2557	
Bioinformatik und Optimierung	Prof. Dr. Thomas Lengauer (bis 30.9.01)		
	Dr. Johannes Linden (komm., seit 1.1.02)		+49 (0) 2241 14-3481
	Dr. Ralf Heckmann (stv., seit 1.1.02)		+49 (0) 2241 14-2810
Zentrale Bereiche	Institutsverwaltung, Planung, Controlling	Carl Vogt (seit 1.1.02)	+49 (0) 2241 14-3479
		Helmut Griebler	+49 (0) 2241 14-2736
	IT-Infrastruktur	Horst Schwichtenberg	+49 (0) 2241 14-2577
	Presse- und Öffentlichkeitsarbeit	Michael Krapp (seit 1.1.02)	+49 (0) 2241 14-3483

Crash-Simulation auf Knopfdruck

Karosserieentwurf führt verschiedene ingenieurwissenschaftliche Disziplinen zusammen. Die Veränderungsgeschwindigkeit der Märkte und der Druck des Wettbewerbs führen dabei – bei stetig wachsenden Qualitätsanforderungen an den Entwurf – zu immer kürzeren Entwicklungszeiten. Beides – Komplexität des Entwurfsobjektes und die Geschwindigkeit der Märkte – zwingen dazu, den gesamten Entwurfsprozess als integrierten Prozess rechnerbasiert abzuwickeln.

Damit nehmen Informatik und Mathematik einen zunehmenden Raum in dieser traditionell von Ingenieuren beherrschten Domäne des Automobilbaus ein. Sie liefern Algorithmen und Methoden, die es erlauben, einzelne Entwurfsphasen interaktiv zu koppeln und substantiell zu beschleunigen.

Für die interaktive Nutzung kommt es entscheidend darauf an, dass die Simulations- und Visualisierungsalgorithmen schnell genug ablaufen: Der Nutzer soll in die Lage versetzt werden, auf die visualisierten Simulationsergebnisse warten zu können; das

heißt, sie müssen im Sekundentakt auf dem Bildschirm sichtbar werden.

Ziel dieser Entwicklung ist eine integrierte Entwurfsumgebung, die die verschiedenen Entwurfsbeiträge miteinander verbindet. Die Vision ist der virtuelle Prototyp, das Auto aus dem Computer, die Simulation auf Knopfdruck.

Im BMBF-Projekt AUTOBENCH wurde dazu mit deutschen Automobil- und Softwareherstellern für Strukturanalyse und Crash-Simulation eine neue Softwareumgebung entwickelt, die die Entwicklungsphasen CAD, CAM und CAE miteinander verknüpft und mit neuen Werkzeugen für das Pre- und Postprocessing zu einer CAE-Prozesskette integriert. Simulations- und Optimierungsalgorithmen wurden wesentlich beschleunigt (AMG, DesParO) und neue Analysetools zum Verständnis des Stabilitätsverhaltens der dabei zugrundeliegenden mathematischen Modelle bereitstellt (DIFFCRASH).

Schnelle Simulationsverfahren, S.26

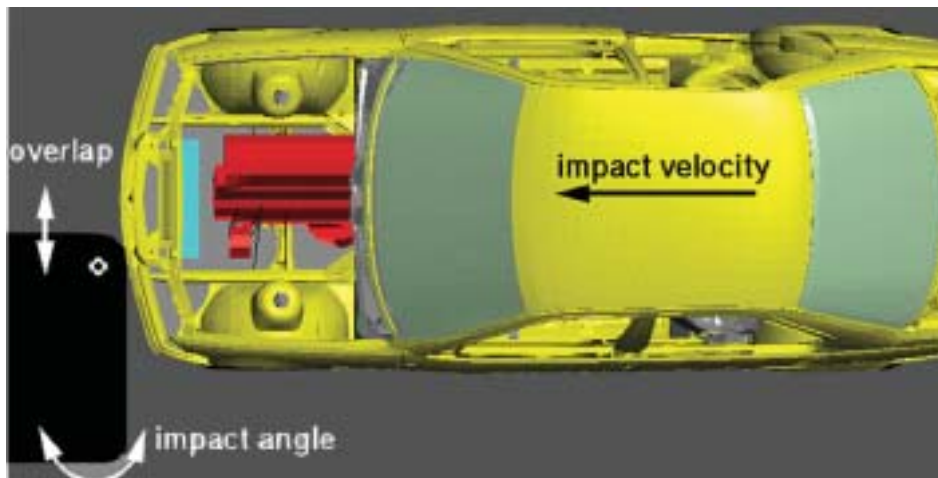
Ölreservoirsimulation

Bei der Ausbeute von Ölvorkommen wird mit hohem Druck z.B. Wasser an verschiedenen Einlassstellen in die Erde gepresst, um das Öl zu den Förderlöchern zu treiben. Entscheidend ist dabei die Positionierung der Förderlöcher und der Einlassstellen. Numerische Simulation auf Basis geologischer Daten hilft, die Positionierungen zu bestimmen.

Im Computer werden Ölreservoirs durch komplexe Gitter repräsentiert. Je feiner die Gitter, umso höher ist die Simulationsgenauigkeit, umso größer sind aber auch die aus dem Diskretisierungsprozess resultierenden zu lösenden Gleichungssysteme.

Klassische Verfahren zur Lösung dieser Gleichungen sind ineffizient. SCAI entwickelt vollautomatisch arbeitende algebraische Mehrgitterverfahren. Der Rechenzeitgewinn bei großen Systemen kann im Bereich mehrerer Größenordnungen liegen. Die Verfahren sind einfach in die einschlägige Simulationssoftware zu integrieren.

Schnelle Simulationsverfahren, S. 26



Packungs- und Verschnittoptimierung

Zu wissen, wie viele Taschen und Koffer in den Kofferraum passen, würde nicht nur so manche Familienstreitigkeit vor dem lang ersehnten Urlaub verhindern – auch für die Automobilindustrie ist diese Überlegung interessant. Denn dem Kunden den größtmöglichen Stauraum anzubieten und dabei dennoch Unentbehrliches, wie das Ersatzrad oder Autoelektronik, zusätzlich unterzubringen, erhöht die Attraktivität der Fahrzeugs.

Für solche dreidimensionalen Packungsprobleme, dazu gehört auch die optimale Beladung von Containern, bietet SCAI individuelle Softwarelösungen an.

Die zweidimensionale Variante findet in der Textil- und Möbelindustrie Anwendung. Hier geht es um den verschnittarmen Zuschnitt von Stoffen oder Lederhäuten. Das Programm AutoNesterT berechnet die optimale Lage der Schnittschablonen unter Berücksichtigung von Nebenbedingungen wie Fadenlauf oder Qualität.

Bioinformatik und Optimierung, S. 52

Zielproteine und neue Medikamente

Die biomolekulare Forschung liefert fast täglich neue Erkenntnisse über die Prozesse, die in Zellen und Organismen ablaufen. Dieses neue Wissen für Diagnose und Therapie von Krankheiten und für die Entwicklung von neuen Medikamenten zu nutzen, ist eine der großen aktuellen Herausforderungen und eine Aufgabe, zu der die Bioinformatik entscheidende Beiträge leistet.

Im Projekt TargId entwickelte SCAI mit dem Max Dellbrück Centrum (MDC), dem European Molecular Biology Laboratory (EMBL) und den Pharmaunternehmen Merck und Aventis Methoden und Software für die Sequenzanalyse und für die Proteinstruktur- und Funktionsvorhersage.

Liegen räumliche Strukturdaten für ein Zielprotein vor, muss für die Entwicklung von Wirkstoffen das Docking-Problem – die Vorhersage von Molekülkomplexen zwischen einem Protein und einem potentiellen Wirkstoffmolekül – gelöst werden. SCAI hat dazu die Software FlexX entwickelt.

Bioinformatik und Optimierung, S. 52

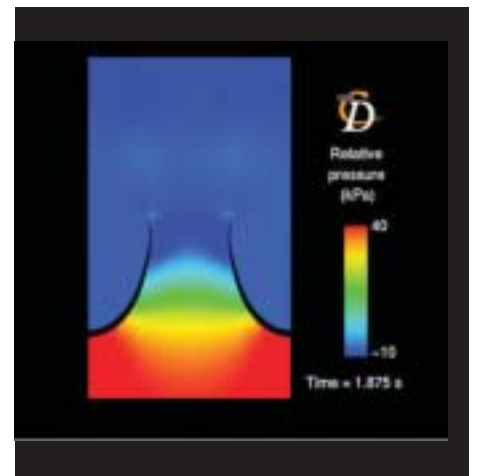
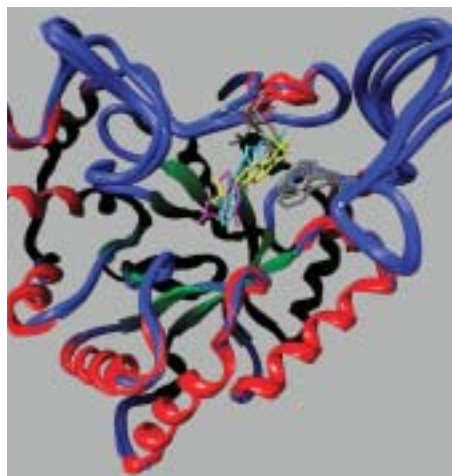
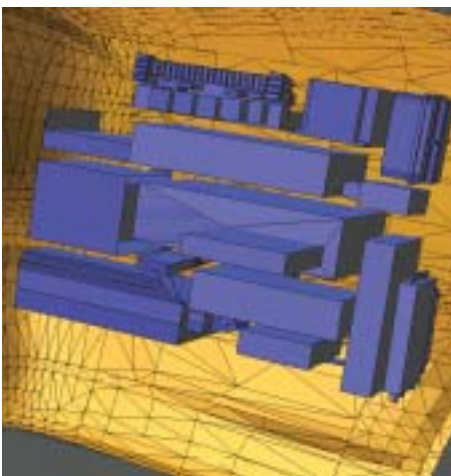
Gekoppelte Simulationen

Bei vielen Anwendungen spielen einander überlagernde Prozesse eine Rolle. Die aerodynamisch günstige Auslegung eines Tragflügels etwa ist nur ein Aspekt. Zusätzlich müssen die Auswirkungen der aus der Strömung resultierenden Kräfte auf die Struktur und die sich ergebenden Bewegungen des Flügels berechnet werden, die wieder auf die Strömung Einfluss haben.

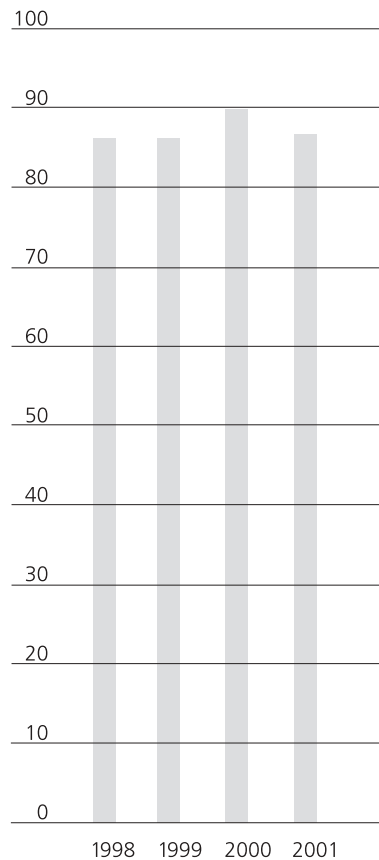
Bei solchen gekoppelten oder multidisziplinären Problemen liegen häufig für jeden einzelnen Prozess (z. B. für die Strömungs- und die Strukturberechnung) bewährte Simulationsprogramme vor. Diese sollen ohne oder nur mit geringen Eingriffen für die gekoppelte Simulation genutzt werden.

Dies leistet die MpCCI Kopplungsbibliothek (Mesh-based parallel Code Coupling Interface). Sie wird ergänzt durch Graphische Benutzerschnittstellen zur Steuerung und Kontrolle der gekoppelten Anwendungen, Werkzeuge zur Visualisierung von Berechnungsdaten und für das Debugging.

Integrierte Softwaresysteme, S. 42



Entwicklung der
Personalkapazität 1998-2001



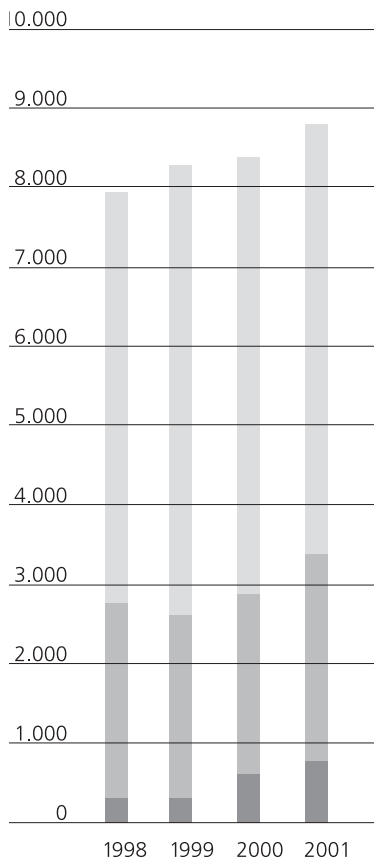
Mitarbeiterentwicklung

Im SCAI waren 2001 durchschnittlich 86,5 Stellen besetzt (unter Berücksichtigung von Teilzeit).

Die Personalkapazität ist in den letzten Jahren nahezu konstant geblieben. Hemmende Faktoren im Personalausbau war in den Jahren 1998-1999 vor allem der enge Arbeitsmarkt im boomenden Sektor der Informations- und Kommunikationstechnik. 1999-2001 waren geprägt durch zurückhaltende Neueinstellungen aufgrund der Unsicherheiten im Fusionszusammenhang. Für das Jahr 2002 sind zahlreiche Neueinstellungen geplant.

Die Personalfuktuation liegt bei rund 8%. Knapp 40% der Stellenplanmitarbeiter haben befristete Verträge. Die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter von SCAI waren 2001 in 41 Drittmitelprojekten eingebunden.

Betrieb absolut (T€)



- Wirtschaftserträge
- Drittmittelerträge
- Grundfinanzierung

Betriebs- und Investitionshaushalt

Der Betriebsaufwand von SCAI ist proportional zur Personalentwicklung gegenüber dem Vorjahr um rund 4% auf insgesamt 8,76 Mio Euro gestiegen. Der Personalkostenanteil liegt bei knapp 71%. Einschließlich Investitionen betrug der Gesamtaufwand im Jahre 2001 rund 10 Mio Euro.

Die bis zur Fusion geltende GMD-Zielvorgabe, 30% der Gesamtkosten über Drittmittelerträge zu erwirtschaften, hat SCAI seit Jahren deutlich erfüllt. Aufgrund der nach der in der Fraunhofer-Gesellschaft anderen Finanzierungsvorgaben sind die Akquisitionsbemühungen vor allem um Industrieaufträge – zu Lasten der Vorlauforschung – verstärkt worden, so dass die Ertragsentwicklung im geplanten Zielkorridor verläuft.

	SCAI (inT€)
Betriebsaufwand 2001	8.760,70
davon Personalaufwand	6.213,40
davon Sachaufwand	2.547,30
Investitionsaufwand	1.196,60
Gesamtaufwand	9.957,30

Die Fraunhofer-Gruppe Informations- und Kommunikationstechnik

Die Fraunhofer -Gruppe Informations- und Kommunikationstechnik (IuK-Gruppe) besteht aus fünfzehn Instituten und einer Forschergruppe mit zusammen mehr als 2400 Mitarbeitern und einem Budget von über 200 Millionen Euro – der nach Volumen und thematischer Breite größte und sichtbarste Forschungsverbund für Informations- und Kommunikationstechnik in Europa und einer der größten in der Welt.

Unter dem Titel „Leben und Arbeiten in einer vernetzten Welt“ entwickelt die Gruppe eine gemeinsame Programmatik für die anwendungsorientierte Grundlagen- und Vorlaufforschung. In neun Forschungsprogrammen wird an den Kernthemen einer künftigen Informations- und Kommunikationstechnik gearbeitet. Themen sind:

- New Generation Internet
- Software Engineering und innovative Systemarchitekturen
- Multimodale Dialoge und neue Medien
- Knowledge und Content Engineering
- IT – Sicherheit
- Computing und Biologie
- Simulation und Virtuelles Engineering
- Engineering und Enterprise Systems
- Innovative Anwendungen und IuK-basierte Dienstleistungen

Die Fraunhofer IuK-Gruppe bietet ihr Kompetenzportfolio im Rahmen der Auftragsforschung und -entwicklung Partnern aus Wirtschaft, Wissenschaft

und Verwaltung an. Innovative, auf den Kundenbedarf zugeschnittene IT-Lösungen und mittel- und langfristige Vorlaufforschung für neue Produkte und Dienstleistungen am Markt gehören zum Leistungsspektrum ebenso wie eine umfassende Technologieberatung. Als Partner internationaler Forschungsprogramme verfügen die Mitgliedsinstitute über eine Europa- und weltweite Vernetzung mit Universitäten, Wirtschaftsunternehmen und Forschungsorganisationen der Informations- und Kommunikationsbranche.

Vorsitzender
Prof. Dr.-Ing. José L. Encarnação
Fraunhofer-Institut für Graphische Datenverarbeitung IGD
Rundeturmstraße 6
D-64283 Darmstadt

Stellv. Vorsitzender
Prof. Dr. Ulrich Trottenberg
Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI
Schloss Birlinghoven
D-53754 Sankt Augustin

Die Institute der Fraunhofer IuK-Gruppe

- Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI, Sankt Augustin
- Angewandte Informationstechnik FIT, Sankt Augustin
- Arbeitswirtschaft und Organisation IAO, Stuttgart
- Autonome intelligente Systeme AiS, Sankt Augustin
- Experimentelles Software Engineering IESE, Kaiserslautern
- Graphische Datenverarbeitung IGD, Darmstadt
- Informations- und Datenverarbeitung IITB, Karlsruhe
- Integrierte Publikations- und Informationssysteme IPSI, Darmstadt
- Integrierte Schaltungen IIS-A, Erlangen
- Medienkommunikation IMK, Sankt Augustin
- Offene Kommunikationssysteme FOKUS, Berlin
- Rechenarchitektur und Softwaretechnik FIRST, Berlin
- Sichere Telekooperation SIT, Darmstadt
- Software und Systemtechnik ISST, Berlin
- Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM, Kaiserslautern
- Forschungsgruppe Biomolekulare Informationsverarbeitung BIOMIP, Sankt Augustin

Die Fraunhofer-Gesellschaft im Überblick

Die Fraunhofer-Gesellschaft ist die führende Trägerorganisation für Einrichtungen der angewandten Forschung in Deutschland. Sie betreibt Vertragsforschung für die Industrie, für Dienstleistungsunternehmen und die öffentliche Hand. Für Kunden aus der Wirtschaft werden einsatzreife Lösungen technischer und organisatorischer Probleme rasch und kostengünstig erarbeitet. Im Rahmen der Technologieprogramme der Europäischen Union wirkt die Fraunhofer-Gesellschaft in Industriekonsortien an der Lösung technischer Fragen zur Verbesserung der Wettbewerbsfähigkeit der europäischen Wirtschaft mit. 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 Schlüsseltechnologien beitragen.

Die Globalisierung von Wirtschaft und Forschung macht eine internationale Zusammenarbeit unerlässlich. Niederlassungen der Fraunhofer-Institute in Europa, in den USA und in Asien sorgen daher für Kontakt zu den wichtigsten gegenwärtigen und zukünftigen Wirtschaftsräumen.

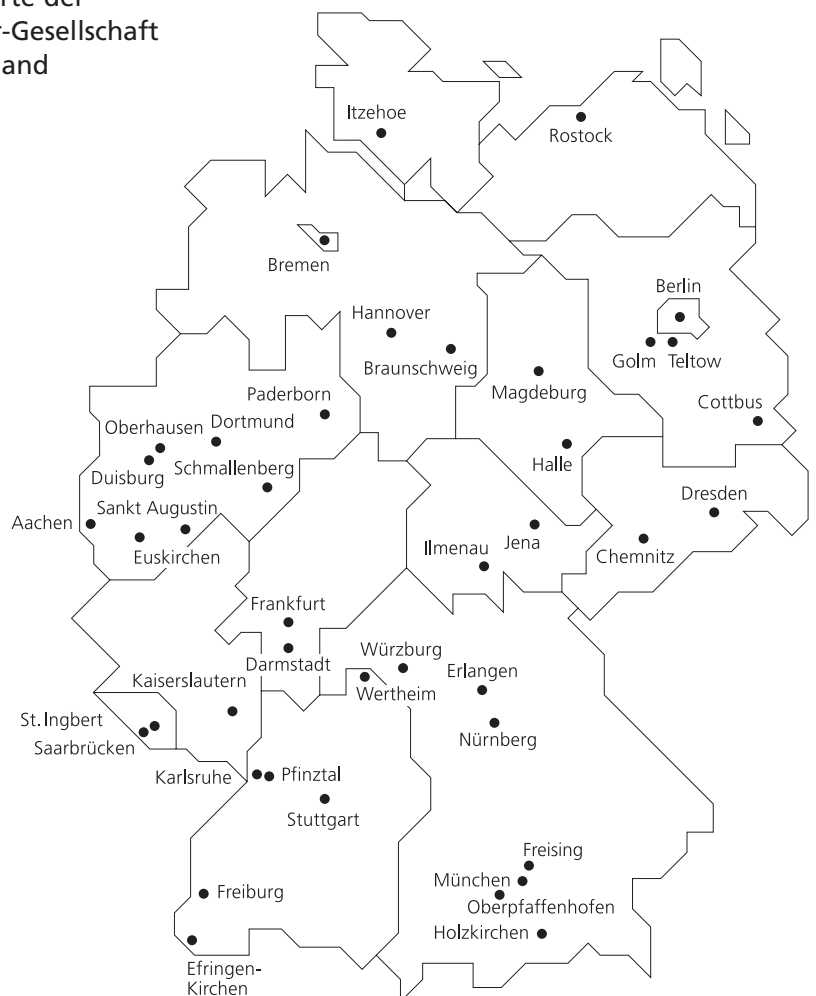
Die Fraunhofer-Gesellschaft betreibt derzeit 56 Forschungseinrichtungen an Standorten in der gesamten Bundesrepublik. Rund 11 000 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, überwiegend mit natur- oder ingenieurwissenschaftlicher Ausbildung, bearbeiten das jährliche Forschungsvolumen von rund 900 Millionen Euro. Davon fallen mehr als 750 Millionen Euro auf den Leistungsbereich Vertragsforschung. Rund zwei Drittel dieses Leistungsbereichs erwirtschaftet die Fraunhofer-Gesellschaft aus Aufträgen der Industrie und öffentlich finanzierten Forschungsprojekten.

Die Fraunhofer-Wissenschaftler sind auf differenzierte Forschungsaufgaben aus einem breiten Spektrum von Forschungsfeldern spezialisiert. Wenn Systemlösungen gefragt sind, arbeiten mehrere Institute interdisziplinär zusammen.

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.

Ihren Namen verdankt die Gesellschaft dem als Forscher, Erfinder und Unternehmer gleichermaßen erfolgreichen Münchner Gelehrten Joseph von Fraunhofer (1787-1826).

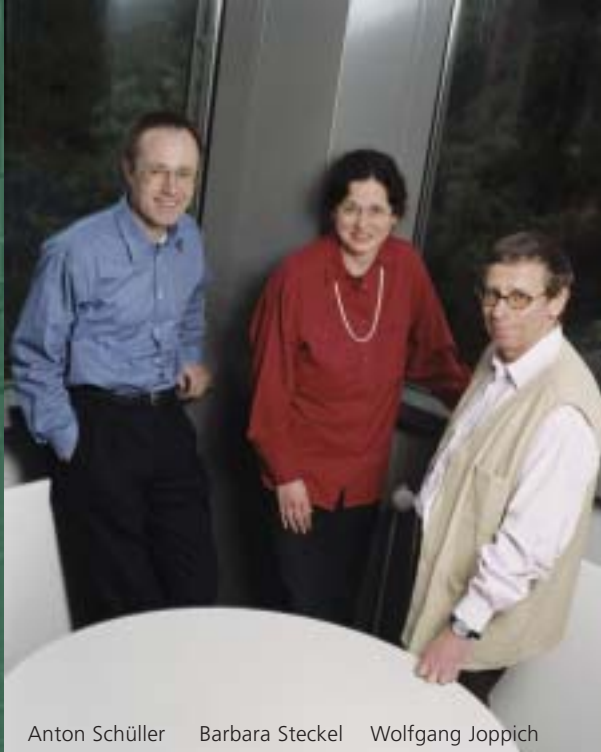
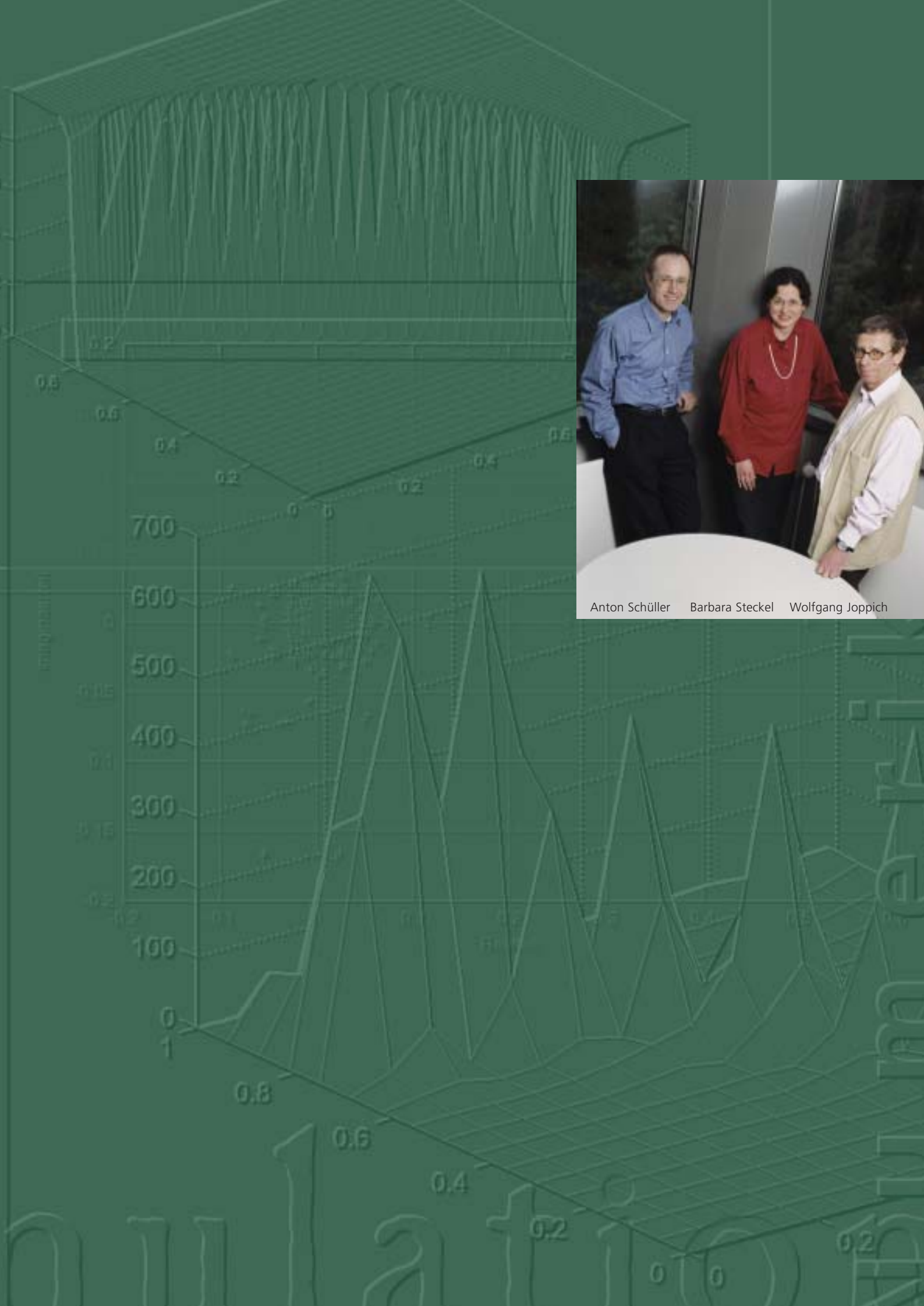
Die Standorte der Fraunhofer-Gesellschaft in Deutschland



Die zentrale Anschrift

Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V.
Leonrodstraße 54
D-80636 München

Telefon: +49 (0) 89/12 05-01
Fax: +49 (0) 89/12 05-03 17
Internet: www.fraunhofer.de



Anton Schüller Barbara Steckel Wolfgang Joppich

In der Abteilung Angewandte Numerik werden Algorithmen für partielle Differentialgleichungen und Computersimulationen für wissenschaftlich-technische Anwendungen entwickelt. Die Kompetenzen der Abteilung spiegeln sich wider in den drei Arbeitsbereichen

*Schnelle Lösung partieller Differentialgleichungen,
Multidisziplinäre Probleme,
Meteorologie und Klimasimulation.*

Im Arbeitsbereich *Schnelle Lösung partieller Differentialgleichungen* wird die grundlegende numerische Methodik entwickelt. Im Mittelpunkt stehen gitterbasierte Methoden (Finite Volumen, Finite Differenzen, Finite Elemente) zur Diskretisierung und Lösungsverfahren für die entstehenden linearen und nichtlinearen Gleichungssysteme. Besondere Kompetenz liegt im Bereich der Mehrgitterverfahren, der adaptiven Gitter und der Nutzung paralleler Systeme (Hochleistungsrechner, Workstation- und PC-Cluster). Im Kundenauftrag werden numerische Anwendungsprogramme unter Berücksichtigung der beim Kunden vorhandenen Rechner algorithmisch optimiert und auf parallele Systeme portiert. Typische Anwendungen stammen aus Strömungsmechanik und Aerodynamik, Meteorologie und Device Simulation.

Einen besonderen Schwerpunkt in der Projektarbeit bilden die *multidisziplinären oder gekoppelten Probleme*. Dazu gehört zum Beispiel die Simulation der Interaktion von Strömung und Struktur oder die Kopplung von Ozean- und Atmosphärenmodellen in der Klimaforschung. Die Abteilung bietet Anwenderberatung für die Entwicklung gekoppelter Simulationen und entwickelt auf die Kundenspezifikation zugeschnittene Kopplungsalgorithmen und -software. Die Entwicklung von Anwendungslösungen basiert

auf der im Institut (Abteilung Integrierte Softwaresysteme) entwickelten Kopplungsbibliothek MpCCI.

Meteorologie und Klimasimulation ist ein seit Jahren gut eingeführter Arbeitsbereich. In Zusammenarbeit mit dem Deutschen Wetterdienst und anderen Partnern aus der Klimaforschung wird an der Parallelisierung und Optimierung operationeller Wettervorhersageprogramme und Klimasimulationen gearbeitet. Neue Algorithmen werden im Hinblick auf ihre Parallelitätseigenschaften und ihr Laufzeitverhalten auf speziellen Zielrechnern untersucht. Es werden ferner Methoden zur Assemblierung der Ausgangsdaten (von Messstationen) für die numerische Wettervorhersage entwickelt. Als neues Thema ist die Aufbereitung von Satellitendaten hinzugekommen.

Kontakt:

Dr. Anton Schüller
Abteilungsleiter
Tel.: +49 (0) 2241 - 14 2572
E-Mail: schueller@scai.fhg.de

Dr. Barbara Steckel
Tel.: +49 (0) 2241 - 14 2768
E-Mail: steckel@scai.fhg.de

Dr. Wolfgang Joppich
Tel.: +49 (0) 2241 - 14 2748
E-Mail: joppich@scai.fhg.de

Schnelle Lösung partieller Differentialgleichungen

Im Bereich der numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen haben Fortschritte in der Rechnerentwicklung und der Numerischen Mathematik in den letzten 15 Jahren zu drastischen Rechenzeitreduktionen für die sehr rechenintensiven numerischen Simulationen geführt. Die erfolgreiche Kombination von schnellen numerischen Verfahren und parallelen Hochleistungsrechnern hat dabei die Lösung von komplizierten Simulations- und Optimierungsaufgaben in Disziplinen wie der Aerodynamik, der Strukturmechanik oder der Meteorologie möglich gemacht, die noch vor 10 Jahren kaum vorstellbar waren.

Das Institut SCAI hat insbesondere mit seinen Arbeiten über Mehrgitterverfahren, parallele und adaptive Methoden anerkannte Beiträge zu dieser Entwicklung geleistet, die die Entwicklung vieler heute kommerziell verfügbarer Codes beeinflusst haben. Eine zusammenfassende Darstellung der Mehrgitterverfahren in Theorie und Praxis bietet das im vergangenen Jahr erschienen Buch Multigrid (Academic Press, New York 2001) von Ulrich Trottenberg, Anton Schüller und Kees Oosterlee.

Typische moderne Simulationsprogramme zeigen eine bemerkenswerte Leistungsfähigkeit: So wird heute die komplexe reibungsbehaftete Luftströmung um eine komplette dreidimensionale Flugzeugkonfiguration in etwa einer Stunde berechnet. Die Anforderungen steigen jedoch auch hier mit den Möglichkeiten. Zunehmend wächst bei Praktikern das Interesse, immer komplexere Probleme zu lösen, ohne dass sich die erforderliche Rechenzeit vervielfacht. Beispiele sind die multidisziplinären Probleme. Gewünscht sind ferner komplette Parameterstudien, die eine Vielzahl von Einzelsimulationen erfordern, oder größere Genauigkeitsanforderungen und verbesserte Modellvarianten.

Die Anpassung der numerischen Algorithmen auf den jeweiligen Anwendungsfall, ggf. auch die Neuentwicklung und die Erstellung effizienter Softwarelösungen ist Gegenstand dieses Arbeitsbereiches ebenso wie intensive Beratungen des Kunden.

Mehrgitterverfahren

Im Rahmen der Eigenforschung und qualifizierender Arbeiten wurde die Untersuchung von Mehrgitterverfahren weitergeführt. Die Arbeiten bezogen sich auf eine Vielzahl von Einzelaspekten, darunter

- Behandlung adaptiver Gitter
- lokale Fourieranalyse für Konstruktion und Analyse von algorithmischen Komponenten
- Ausbau der Mehrgitter-Programmumgebung LiSS-2D

Adaptive Gitter:

Die numerische Simulation wissenschaftlicher und ingenieurtechnischer Fragestellungen erfordert vielfach eine mehrskalige Betrachtungsweise. Einerseits verlangen schon die großen Datenmengen und die gleichzeitigen Anforderungen an die Geschwindigkeit der Simulation, dass in weiten Bereichen relativ grobe Gitter und damit wenige Datenpunkte zur Berechnung genutzt werden. Andererseits ist es notwendig an exponierten Stellen, wie zum Beispiel an Grenzschichten oder Schocks, besonders feine Gitterstrukturen zu verwenden, um die Vorgänge in der gewünschten Genauigkeit berechnen zu können. Die gleichzeitige Verwendung dieser verschiedenen Skalen wird dadurch

Kontakt:

Dr. Anton Schüller
Abteilungsleiter
Tel: +49 (0) 2241 - 14 2572
E-Mail: schueller@scai.fhg.de

Dr. Wolfgang Joppich
Tel: +49 (0) 2241 - 14 2748
E-Mail: joppich@scai.fhg.de

erschwert, dass vielfach nicht bekannt ist, an welchen Stellen ein feineres Gitter verwendet werden muss und wie sich dessen Lage mit der Zeit verändert. Ein Ansatz sind selbst-adaptive Prozesse, die in der Lage sind, selbständig die Feinheit der verwendeten Gitter zu steuern.

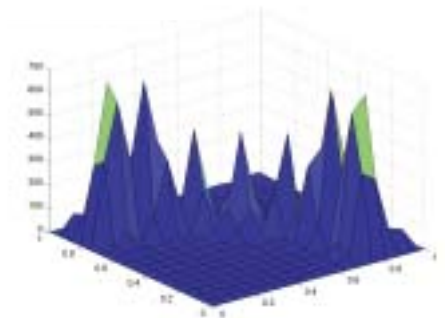
Die dabei auftretenden Fragestellungen lassen sich in drei Bereiche einteilen:

- softwaretechnische Fragen, wie eine möglichst günstige Datenstruktur,
- Quantifizierung und Messung der numerischen Fehler,
- Bestimmung des Schwellenwertes, ab dem geringere Gittermaschen weiten zu verwenden sind.

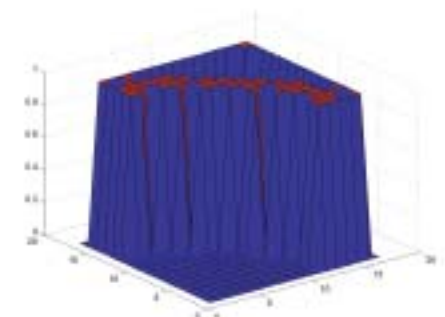
Kritisch ist die Festlegung des Fehlerschätzers. In den durchgeführten Arbeiten wurden dazu verschiedene Fehlerschätzer verglichen und mittels einer Bibliothek von Testproblemen mit bekannter Lösung validiert.

Generell sind Mehrgitterverfahren sehr gut für selbstadaptive Verfeinerungen geeignet, da mit der Nutzung unterschiedlicher Gitterweiten ein natürliches Maß für einen relativen Diskretisierungsfehler und damit ein Fehlerschätzer zur Verfügung steht. Die Untersuchungen zeigen, dass es problemabhängig erforderlich ist, auf einfachere oder auch aufwendigere Fehlerschätzer überzugehen. Im Vordergrund steht dabei ein besseres Verhältnis von Kosten (d.h. Aufwand zur Berechnung des Fehlerschätzers) zu Nutzen (Rechenzeitgewinn durch lokale Gitterverfeinerung bzw. -vergrößerung). In der praktischen Umsetzung sind Kompromisse zwischen Effektivität des Schätzers, Genauigkeit und technischer Machbarkeit zu finden. Die

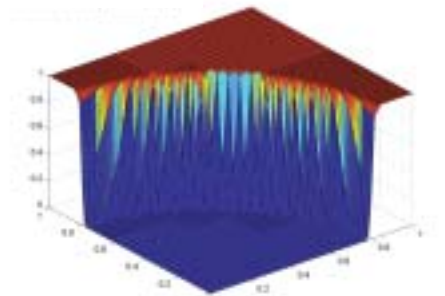
folgenden Abbildungen zeigen einen Fehlerschätzer, daraus ermittelte Verfeinerungspunkte und ein aus rechteckigen Verfeinerungsgebieten zusammengesetztes Verfeinerungsgitter mit der exakten Lösung.



Fehlerschätzer: Relativer lokaler Diskretisierungsfehler



Verfeinerungspunkte



Verfeinerungsgitter und exakte Lösung

Lokale Fourieranalyse

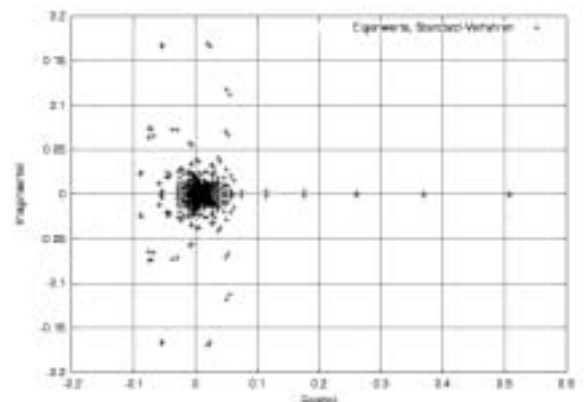
Mehrgitterverfahren sind die schnellsten numerischen Methoden für elliptische Differentialgleichungen. Sobald jedoch nichtelliptische und unsymmetrische Effekte auftreten – wie es für viele Anwendungen typisch ist – steht eine rigorose mathematische Theorie im Allgemeinen nicht zur Verfügung. In solchen Situationen greift man auf die lokale Fourier-, Glättungs- und Zweigitteranalyse zurück, die auf Idealisierungen beruht und heuristischen Charakter hat. Diese Analysen zeichnen sich dadurch aus, dass sie in der Regel verlässliche quantitative Konvergenzabschätzungen liefern und sind damit für Komponententwicklung und -bewertung wichtige Werkzeuge.

- Es wurde ein allgemeines theoretisches Kalkül bereitgestellt, in dem die Fourieranalyse auf k-Gitterzyklen und auf Mehrgitterverfahren als Vorkonditionierer verallgemeinert wurde. Es wurden damit eine Reihe in der Literatur bekannter Modellprobleme detailliert untersucht, darunter die anisotrope Potentialgleichung, die rotierte anisotrope Diffusionsgleichung, die Konvektions-Diffusionsgleichung mit dominantem Konvektionsteil und die inkompressiblen Navier-Stokes Gleichungen bei großen Reynoldszahlen. Diese

Probleme bilden Prototypen singulärer Störungen; ihr Verständnis ist Ausgangspunkt für die Behandlung von Systemen mit nicht-elliptischem Charakter.

- Mit Hilfe einer k-Gitteranalyse ist es möglich, tatsächliche Mehrgittereffekte zu entdecken und zu erklären, die von einer Zweigitteranalyse nicht aufgelöst werden können. Dies stellt vor allem einen entscheidenden Durchbruch für eine erfolgreiche Behandlung von Grobgitterproblemen dar, wie sie häufig im Zusammenhang mit singulär gestörten Problemen auftreten. Unter Verwendung der neuen Analysemethoden gelingt es, die charakteristischen Schwierigkeiten von singulären Störungen im Mehrgitterkontext zu identifizieren.

Beispiel: In einer Fourier k-Gitteranalyse werden die Eigenwerte der Iterationsmatrix des zu untersuchenden k-Gitterverfahrens approximiert. Der betragsmäßig größte Eigenwert ist ein Maß für die asymptotische Konvergenzgeschwindigkeit. Am Beispiel einer rotierenden inkompressiblen Strömung bei Reynoldszahl 5000 zeigen die Abbildungen die Eigenwertverteilungen in der komplexen Ebene. Die obere Abbildung ist ein 3-Gitter-Verfahren mit einem dominanten Eigenwert vom Betrag 0.5, was einer Fehlerreduktion pro Iterationsschritt um den Faktor 1/2 entspricht. Diese Konvergenzrate ist unbefriedigend; Ursache ist eine falsche Skalierung von Konvektion und Diffusion zwischen feinen und groben Gittern. In der unteren Abbildung ist das Problem behoben. Die Komponenten des Verfahrens wurden verändert mit dem Ergebnis, dass der dominante Eigenwert jetzt unter 0.06 liegt.



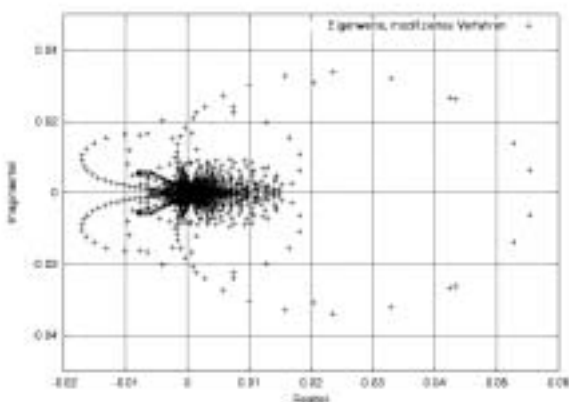
LiSS-2D

LiSS-2D ist eine in SCAI entwickelte Programmierumgebung zur Lösung von Systemen partieller Differentialgleichungen (z.B. Navier-Stokes Gleichungen) auf allgemeinen blockstrukturierten Gebieten in zwei Dimensionen. LiSS-2D beinhaltet Werkzeuge zur Vor- und Nachbereitung (Visualisierung) der Ergebnisse. Zentrales Element von LiSS-2D ist der numerische Löser, der effiziente parallele adaptive Mehrgitterverfahren einsetzt. Dieser Löser ist sowohl auf sequentiellen als auch auf parallelen Rechnern ganz unterschiedlicher Architektur lauffähig.

LiSS-2D ist modular aufgebaut. Die Lösung neuer bisher nicht behandelte partieller Differentialgleichungen erfordert nur die Entwicklung relativ weniger Unterprogramme (Diskretisierung, Randbedingungen, Kriterien zur lokalen Gitterverfeinerung). Diese Allgemeinheit ist eine besondere Eigenschaft von LiSS-2D. Zur Simulation multidisziplinärer Anwendungen kann LiSS-2D auch mit sich selbst gekoppelt werden.

Aktuelle Erweiterungen, die in Kooperation mit der Orcom Systemhaus GmbH, Freiberg, integriert wurden, umfassen:

- Beschleunigung durch Krylov-Unterraum-Verfahren,
- Integration von Defektkorrekturtechniken bei Glättungsverfahren für Diskretisierungen höherer Ordnung,
- Einführung einer benutzerfreundlichen grafischen Oberfläche und Integration von Visualisierungstools.



Die Differentialgleichungen, die in der mathematischen Physik, den Ingenieur- und Naturwissenschaften der Modellierung von Prozessen zugrunde liegen und die die Grundlage für die numerische Simulation und Vorhersage bilden, beschreiben typischerweise nur ein Phänomen, zum Beispiel die Strömung eines Gases um einen aerodynamischen Körper (Euler- oder Navier-Stokes Gleichungen). In der Praxis ergibt sich zunehmend die Notwendigkeit, andere, interagierende oder überlagernde Prozesse mit zu berücksichtigen. Aus der Strömung wirken Kräfte auf den Strömungskörper, der sich damit bewegt oder verformt, was umgekehrt die Strömung beeinflusst. Erforderlich ist in diesem Beispiel eine Kopplung von Strömungs- und Strukturberechnung. Man spricht von gekoppelten oder multidisziplinären Problemen.

Eine Neuentwicklung von Simulationssoftware für gekoppelte Probleme (Frontallösung) verbietet sich in der Regel aus Gründen der mathematisch-numerischen Komplexität und des erforderlichen Entwicklungsaufwandes und steht daher in der Regel nicht im Interesse des Anwenders. Im Arbeitsbereich wird stattdessen der Weg verfolgt, existierende Codes, zum Beispiel für Strömung und Struktur, wie sie je einzeln beim Kunden im Einsatz sind, durch geeignete Interfaces und speziell entwickelte Verfahren iterativ miteinander zu koppeln. Mit diesem Zugang wird gewährleistet, dass bisherige Investitionen des Kunden in die Software erhalten bleiben und weiter genutzt werden können.

Die Projekte des Arbeitsbereichs setzen auf der in SCAI entwickelten Kopplungsbibliothek MpCCI auf (vgl. hierzu Abteilung Integrierte Softwaresysteme). Die Arbeiten beziehen sich auf die problemabhängige Definition von Interfaces, auf geeignete Strategien für Datenaustausch und Dateninterpolation und die Entwicklung effizienter Kopplungsalgorithmen. Dem Anwender und Kunden wird umfassende Beratung und Analyse seiner speziellen Aufgabenstellung angeboten, sowie Erstellung und Test der gekoppelten Simulation.

COSIWIT - Gekoppelte Simulationen in Wissenschaft und Technik

GCE (General Coupling Environment) heißt eine neue Softwareumgebung, die es Anwendern und Programmentwicklern erlauben wird, Simulationsprogramme aus den verschiedensten Disziplinen miteinander zu koppeln. GCE wird entwickelt im Verbundprojekt COSIWIT, an dem neben SCAI die Fraunhofer Institute EMI, IGD, ILT, IMK und IZFP beteiligt sind, sowie Forschergruppen der RWTH Aachen, der TU Braunschweig und der Universität Rostock. Die SCAI-Abteilungen *Angewandte Numerik* und *Integrierte Softwaresysteme* analysieren die unterschiedlichen Anwendungen im Hinblick auf ihre Kopplungseigenschaften, entwickeln effiziente problemangepasste Kopplungsalgorithmen und Erweiterungen der Kopplungsbibliothek MpCCI, die das Herz von GCE bildet, und unterstützen die Anwender bei der Realisierung der gekoppelten Simulationen.

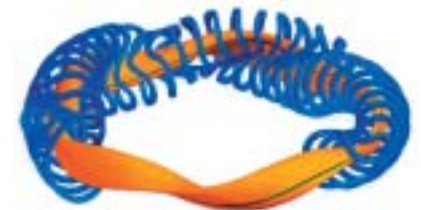
Mit dem GCE entsteht ein Werkzeug zur Kopplung vielfältiger multidisziplinärer Anwendungen. Die Grundideen des GCE sind: lose Kopplung der Simulationenwerkzeuge, minimale Eingriffe in die bestehenden (monodisziplinären) Simulationscodes, Unterstützung unterschiedlicher Rechnerarchitekturen, Portabilität der resultierenden Software-Lösungen.

In COSIWIT wird die Allgemeinheit des GCE an einer breiten Palette gekoppelter Probleme demonstriert, die von Projektpartnern eingebracht werden:

- Strukturverhalten bei Druckstoßbelastungen,
- Materialbearbeitung mit Lasern,
- Ultraschallprüfköpfe,
- Thermografie,
- Thermoelastisches Strukturverhalten
- Wechselwirkung von elektromagnetischen Feldern und mechanischer Verformung. Ein Beispiel ist die Berechnung der Kräfte an den supraleitenden Spulen des Stellarators Wendelstein 7-x beim MPP in Greifswald.

Das GCE und die einzelnen Simulationscodes bilden einen Baukasten, der es erlaubt, für die unterschiedlichsten gekoppelten Anwendungen schnell Lösungen „zusammen zu setzen“. Die im GCE zum Einsatz kommenden Kopplungsverfahren erlauben die parallele Ausführung der Einzelkomponenten, die ihrerseits entweder sequentiell oder auch parallel ausgeführt werden können.

Die erforderlichen Kopplungsalgorithmen werden für klassifizierte Anwendungen über eine Bibliothek zur Verfügung gestellt. Hinzu treten angepasste Werkzeuge für die Visualisierung von Simulationsergebnissen und zur Unterstützung von Implementierung und Debugging.



Plasma und Spulenordnung beim Wendelstein 7-x (MPP-Greifswald)

Kontakt:

Dr. Barbara Steckel
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 2768
E-Mail: steckel@scai.fhg.de

Es gibt wenige Anwendungen der numerischen Simulation, die eine vergleichbar hohe Rechenleistung erfordern wie die Wettervorhersage oder die Klimasimulation. In beiden Bereichen gehört das parallele Rechnen daher heute zum Standard. Erforderlich ist auch, dass Algorithmen, Software und Rechnerhardware optimal aufeinander abgestimmt sind, um die erforderlichen Rechenleistungen zu gewährleisten.

Im Arbeitsbereich werden (Teil-)Algorithmen für Vorhersageprogramme neu entwickelt und existierende Algorithmen auf verschiedene Rechnerarchitekturen portiert und getestet. Projektpartner sind der Deutsche Wetterdienst, Institute der Klimaforschung sowie Hersteller von Hochleistungshardware und einschlägige Softwarehäuser.

Im Rahmen von Beratungsaufträgen werden ferner Laufzeitabschätzungen für Vorhersagemodelle durchgeführt, die es dem Kunden etwa im Vorfeld von Rechnerbeschaffungen erlauben, die Performanz von Algorithmen auf einer spezifischen Rechnerarchitektur einzuschätzen. Im Mittelpunkt stehen dabei Systemcluster mit gemeinsamem Speicher. Für Systeme dieser Art verfügt das Institut über bewährte Laufzeitmodelle, die eine rasche Einschätzung des tatsächlichen Laufzeitverhaltens erlauben.

Numerische Analyse und Algorithmenentwicklung

Durchgeführt werden Vergleiche und Neuentwicklungen von algorithmischen Komponenten.

- **Zeitdiskretisierung**

Bei der täglichen Wettervorhersage ist es wichtig die Vorhersageergebnisse mit einer möglichst geringen Zahl von Zeitschritten zu erzielen. Dies gilt noch stärker bei der Klimasimulation mit ihren extrem langen Simulationszeiträumen. Die Wahl der Zeitdiskretisierung und die Festlegung der maximal möglichen Zeitschrittweiten unter Berücksichtigung von Stabilitäts- und Genauigkeitsanforderungen, einschließlich Amplituden- und Phasenfehler, ist daher entscheidendes Element des Gesamtverfahrens.

- **Vergleichende Bewertungen von Spektralverfahren, klassischen Iterations- und Mehrgitterverfahren**

Mit dem Wechsel des Vorhersagemodells des Deutschen Wetterdienstes von einem globalen Spektralverfahren zu einem globalen Gitterpunktmodell auf Basis eines Ikosaedergitters wird der Einsatz neuer Lösungsalgorithmen möglich und attraktiv. Die Arbeiten beziehen sich die vergleichende Untersuchung von Diskretisierungsschemata und Interpolationen, insbesondere auf Erhaltungseigenschaften, die für Langzeitsimulationen von Bedeutung sind.

Für das Ikosaedergitter wird ferner ein Transportmodell höherer Ordnung zur Auswertung von Satellitendaten (als Anfangswerte für die Simulation) entwickelt.

- **Lokale Verfeinerungen**

Besondere Wetterbedingungen, z.B. Stürme, Eisregen, Hagelschlag, erfordern genauere Diskretisierungen. Die Phänomene selbst sind lokaler Natur und entsprechend sollte - im Hinblick auf den Rechenaufwand - die Verfeinerung auch nur lokal und soweit erforderlich erfolgen. Untersucht werden dafür Methoden zur Erkennung und Lokalisierung der Phänomene selbst als auch für die Abschätzung der auftretenden Diskretisierungsfehler.

Technische Kopplung von Modellkomponenten

Bei Anwendungen, die aus unterschiedlichen Komponenten zusammengefügt sind (multidisziplinäre Anwendung), ist zu untersuchen, wie die Performanz der Einzelkomponenten auf unterschiedlichen Rechnerarchitekturen ist. Ziel einer solchen Untersuchung ist es, für die Einzelkomponenten jeweils das optimale Zielsystem zu identifizieren und die verschiedenen Systeme dann für die gekoppelte Anwendung zu einem heterogenen, verteilten Rechnersystem zusammen zu führen. Erste Arbeiten in dieser Richtung wurden für eine Ozean-Atmosphärenkopplung auf einem PC-Cluster mit 32 Prozessoren durchgeführt. Die Weiterführung der Arbeiten erfolgt im Projekt Planet Simulator.gen.

Planet Simulator - ein gekoppeltes System von Klimakomponenten für Langzeitsimulationen

Die natürliche Variabilität des Klimasystems resultiert im wesentlichen aus dem Zusammenspiel zwischen dem externen solaren Antrieb und einer Vielzahl von Subsystemen (wie Atmosphäre, Ozean, Meer- und Landeis, Vegetation). Modelle, die ein vollständiges Verständnis unseres Klimas, das Nachvollziehen seiner Vergangenheit, sowie Prognosen für zukünftige Entwicklungen ermöglichen, erfordern die Berücksichtigung vieler, im Idealfall aller dieser Komponenten. Die numerische Umsetzung erfordert die Verwendung moderner, auf die Problemstellung zugeschnittener Algorithmen sowie eine weitreichende Optimierung und Parallelisierung. Bei der Kopplung der einzelnen Subsysteme ergeben sich weitere Probleme, die selbst für das System Atmosphäre-Ozean-Meereis bisher nicht zufriedenstellend gelöst sind. Unterschiedliche typische Raum- und Zeitskalen der Komponenten erschweren dabei die Entwicklung und den Test geeigneter Algorithmen und Parameterisierungen erheblich.

Die Basiskomponente in diesem Projekt ist das Atmosphärenmodell PUMA, das vom Institut für Meteorologie der Universität Hamburg entwickelt wurde. Daraus wird durch Erweiterung des Modells sowie der Hinzunahme weiterer Komponenten wie Ozean, Eis, Boden/Vegetation der *Planeten-Simulator* entstehen. Der Planeten-Simulator wird parallel, portabel (verschiedene Architekturen, insbesondere PC Cluster) und modular aufgebaut sein. Er wird eine grafische Benutzerschnittstelle besitzen, die es erlaubt, das Modell während der Simulation zu beobachten und per Maus oder Tastatur Änderungen an den Modellparametern vorzunehmen.

Neben der Rechnerleistung spielt bei der Entwicklung jeglicher Simulationssoftware auch die verwendete Numerik eine enorme Rolle. Während die meisten Programme zur Klimasimulation auf bewährte Verfahren zurückgreifen, wird in diesem Projekt bewusst versucht, alternative Algorithmen zu finden. Da die Eignung innovativer Techniken nicht a priori gesichert ist, sollen ganz gezielt Experimente dazu durchgeführt werden. Zudem muss die Kopplungskomponente eine einfache Integration neuer Komponenten gestatten.

Numerische Analyse

Im Hinblick auf das Ziel extrem langer Simulationszeiträume bei gleichzeitig möglichst kurzen Rechenzeiten spielt das Problem der Zeitschrittweitenwahl eine entscheidende Rolle, da eine Parallelisierung in der Zeit nicht möglich und sinnvoll erscheint. Eine Auswahl geeigneter Zeitschemata unter den speziellen Anforderungen der Einzelmodelle kann nur aufgrund umfangreicher numerischer Analysen getroffen werden. Die klassische von Neumann-Stabilitätsanalyse diverser Zeitschemata für Modellprobleme bringt erste Erkenntnisse. Bewertungskriterien sind unter anderem die Größe und die Lage des Stabilitätsgebietes, weil sich daraus die Zeitschrittweite ergibt. Auch relative Amplituden- und Phasenfehler werden in die Bewertung einbezogen. Dabei ist besonders darauf zu achten, wie sich die Fehler verhalten, wenn der Zeitschritt so groß wie möglich ist. Von den untersuchten expliziten Methoden erlauben allein Einschrittverfahren höherer Ordnung größere Zeitschritte, sind aber numerisch wesentlich aufwendiger.

Kopplung der Modelle

Eine entscheidende Bedeutung bei der Entwicklung des modularen Planeten-Simulators hat die Kopplung der einzelnen Komponenten. Dabei gibt es neben der meteorologischen Modellierung das Problem einer geeigneten mathematischen Formulierung der Kopplungsbedingungen und der programmtechnischen Realisierung. Dabei muss die Kopplungstechnik so flexibel sein, dass unterschiedliche Kopplungsalgorithmen ebenso realisierbar sind wie die Kopplung von Komponenten mit völlig unterschiedlichen Gitterstrukturen. Wegen der Ausrichtung auf die Benutzung von Parallelrechner-Systemen einschließlich Cluster von Workstations und PCs muss die Kopplungssoftware selbst parallel sein. SCAI entwickelt die erforderliche Kopplungs- und Interpolationssoftware auf Basis von MpCCI. Durch die Verwendung von Kopplungsbibliotheken bleibt das Gesamtmodell auf der Ebene der Klimasubsysteme Atmosphäre, Ozean, Eis und Boden modular.

Kontakt:
Dr. Wolfgang Joppich
Tel: +49 (0) 2241 14-2748
E-Mail: joppich@scai.fhg.de

Problemangepasste Verfeinerungen

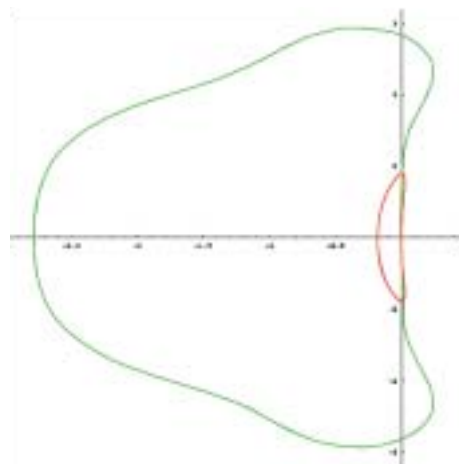
Neue Lösungsverfahren können insbesondere bei feiner werdenden Auflösungen interessant werden. Feinere Auflösungen sind von Interesse an Eiskanten und Küstenlinien. Die Qualität der Ergebnisse hängt entscheidend von der Güte der Auflösung der Eisbedeckung ab, da je nach Bedeckungsgrad extrem unterschiedliche Wärmeflüsse in die Simulationen eingehen. Für gitterpunktorientierte Ansätze wird untersucht, ob Verfeinerungen hinsichtlich Daten- und Softwarestrukturen problemlos in die ausgewählten Modellkomponenten integrierbar sind. Spezielle Interpolationsmethoden werden entwickelt, um unerwünschte Oszillationen auf unterschiedlichen Skalen zu vermeiden.

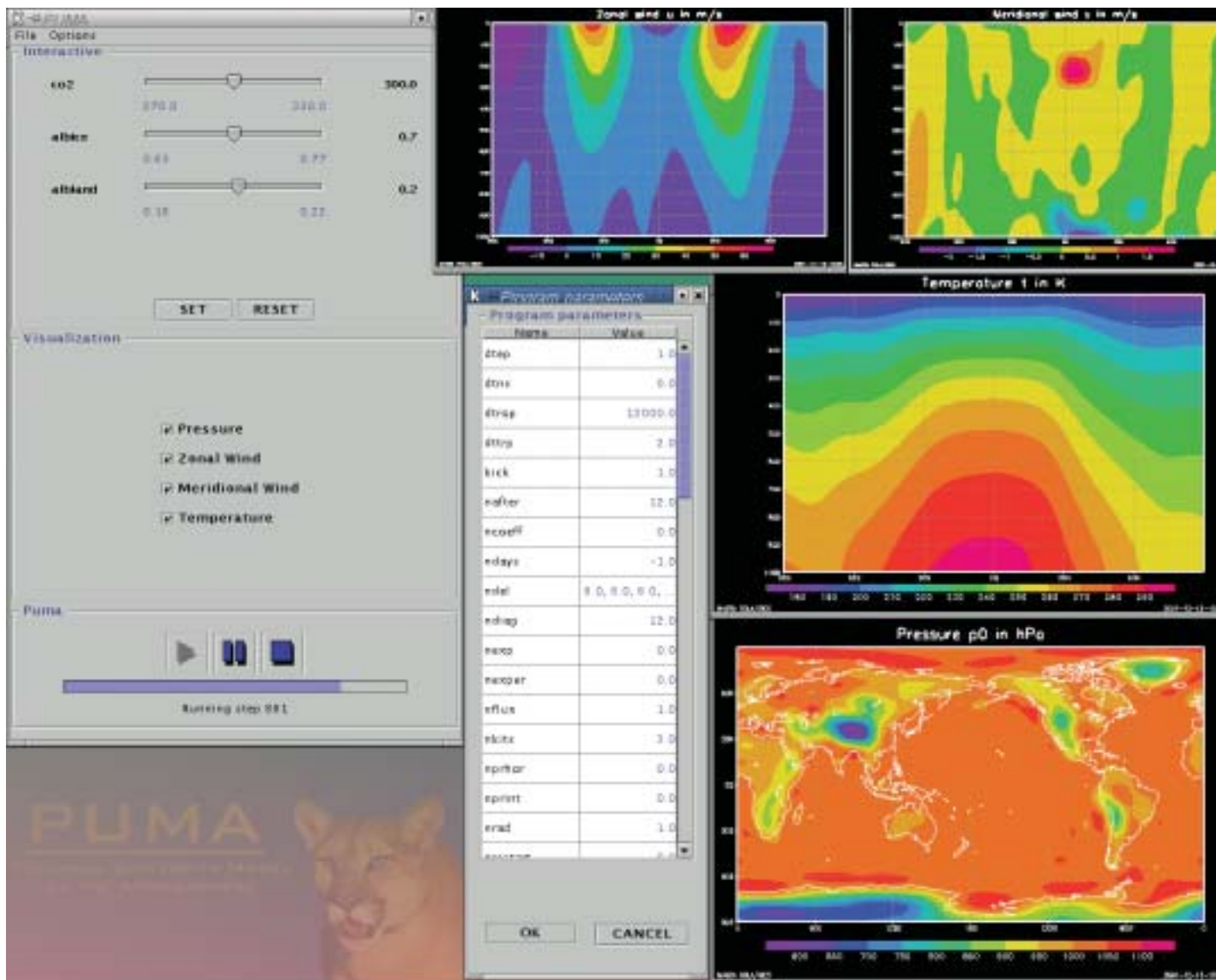
Feine Auflösungen im obengenannten Sinne sind bei Gitterpunktansätzen generell sinnvoll. Das Mehrgitterverfahren bietet prinzipiell die Möglichkeit, eine Verfeinerung in Abhängigkeit von der sich entwickelnden Lösung einzuführen genauer: in Abhängigkeit von einer Schätzung des relativen lokalen Diskretisierungsfehlers. Im Projekt werden verschiedene Fehlerschätzer auf ihre Verwendbarkeit in Mehrgitterverfahren und speziell im Zusammenhang mit zeitlich veränderlichen Eisträndern untersucht.

Lage und Größe der Stabilitätsgebiete für das in PUMA verwendete Zeitschrittverfahren (rot) und für eine Runge-Kutta-Verfahren vierter Ordnung (grün). Die Schnittpunkte der Kurven mit der vertikalen Achse bestimmen die maximale Zeitschrittweite.

Visualisierung

Da die interaktive Visualisierung von Klima- und Wetterdaten heute wichtig ist, jedoch eher stiefmütterlich behandelt wird, wird eine Java-basierte grafische Oberfläche geschaffen, die eine integrierte Auswertung und speziell eine Bewertung der laufenden Simulation gestattet. Aufgrund der dargestellten Ergebnisse kann dann entschieden werden, ob das Simulationsexperiment so weitergeführt werden soll, oder ob in die Parameterbelegung einzelner Komponenten eingegriffen werden muss. Ein derartiger Einsatz bietet sich speziell für die universitäre Ausbildung an. Für die Zukunft bietet sich der Ausbau des Systems zu einer innovativen Lehr- und Lernumgebung mit multimedialen Techniken an.





PUMA: Grafische Benutzeroberfläche

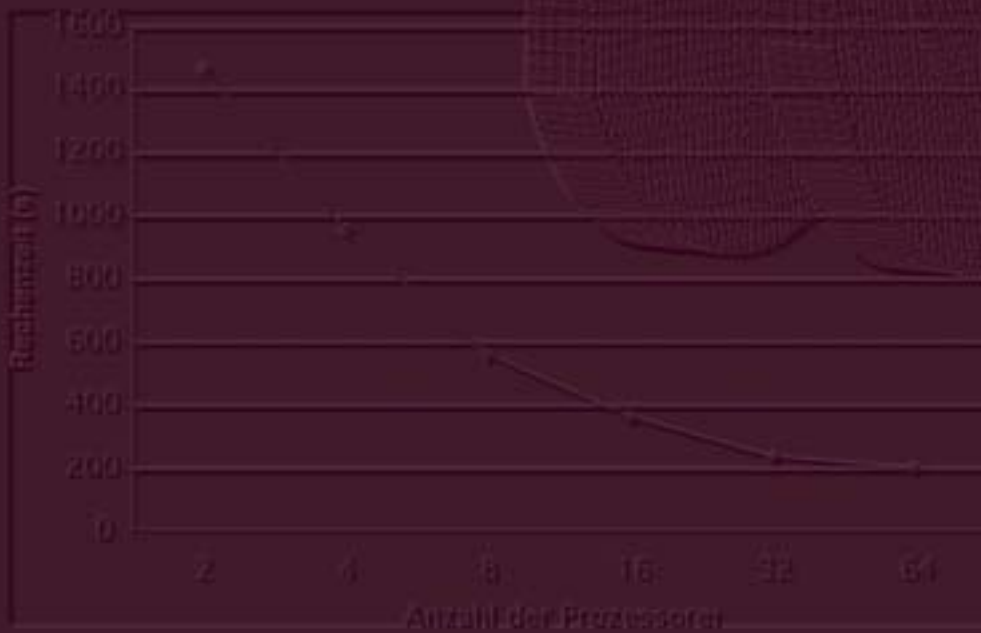
Simulationen



Klaus Stüben



Clemens-August Thole



In der Abteilung *Schnelle Simulationsverfahren* entwickeln wir Methoden und Software für industrielle Simulationsanwendungen. Wir bieten Verfahrens- und Programmentwicklungen an, die helfen, existierende Simulationssoftware effizienter nutzbar zu machen und neue Anwendungen zu erschließen.

Die Arbeiten gliedern sich in vier Bereiche:

- *Methoden und Werkzeuge für die Crash Simulation*
- *Dünnbesetzte Matrixprobleme*
- *Parameter Optimierung*
- *Datenparallele Compiler*

Numerische Crash-Simulation ist die Anwendung, für die die Automobilindustrie die meiste Rechenzeit aufwendet. Im Arbeitsbereich *Methoden und Werkzeuge für die Crash-Simulation* entwickeln wir algorithmische Komponenten, die Crash-Simulationsprogramme auf Parallelrechnern effizienter ablaufen lassen. Dazu gehören Methoden für die dynamische Lastverteilung auf parallelen Systemen und parallele Kontaktsuchverfahren. Für die Zuverlässigkeit der Crash-Simulation hat sich gezeigt, dass Modelleigenschaften und numerische Eigenschaften des Simulationscodes zu starken Streuungen der Simulationsergebnisse bei kleinen Änderungen der Modelldaten führen. Damit gewinnen Stabilitätsuntersuchungen in praktischer Hinsicht an Bedeutung. Wir entwickeln unter dem Namen DIFF-CRASH entsprechende Analysetools, die helfen, Ursachen für beobachtete Instabilitäten aufzudecken und stabile Modelle zu entwickeln.

Dünnbesetzte Matrixprobleme bilden den rechenintensiven Kern vieler Simulationen. Sie entstehen bei der Diskretisierung von Differentialgleichungen. Systeme mit mehreren Millionen Unbekannten sind heute durchaus keine Seltenheit mehr. Klassische Lösungsverfahren, wie sie die mathematisch-numerische Literatur in reicher Auswahl bietet, sind hier - selbst bei Verwendung von Höchstleistungsrechnern - zu langsam. Wir entwickeln hierarchische Löser, zum Beispiel Algebraische Mehrgitterverfahren, passen sie auf den konkreten Anwendungsfall an und stellen sie in Form von Bibliotheks-routinen zur einfachen Integration in existierende Simulationscodes unseren Anwendungspartnern und Softwarehäusern zur Verfügung.

Im Bereich *Parameter Optimierung* entwickeln wir Optimierungsmethoden, die es erlauben, komplexe Parameterstudien in technischen Simulationen zu steuern und optimale Parameterkonfigurationen zu identifizieren. Die Methoden werden in der Toolbox DesParO zusammengeführt, die mit anwenderseitig vorhandenen Simulationscodes kombiniert werden kann.

Die Arbeiten über *Datenparallele Compiler* konzentrieren sich auf die automatische Erzeugung von datenparallelem Code, sowie auf Werkzeuge zur Analyse und Performanzverbesserung paralleler Programme. Die Arbeiten basieren zum Großteil auf dem im Institut entwickelten datenparallelen Übersetzungssystem ADAPTOR.

Kontakt:

Clemens-August Thole
Abteilungsleiter
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 27 39
E-Mail: thole@scai.fhg.de

Dr. Klaus Stüben
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 27 49
E-Mail: stueben@scai.fhg.de

Methoden und Werkzeuge für die Crash-Simulation

In der modernen Automobilentwicklung spielen Verfahren der numerischen Simulation eine eminente Rolle. Die Fragestellungen dabei sind breit gefächert. Im Mittelpunkt stehen die Strömungs- und Strukturanalyse. Die weitaus meiste Rechenzeit und die größten Rechner werden für die numerische Crash-Simulation eingesetzt.

In diesem Arbeitsbereich entwickeln wir in Zusammenarbeit mit Automobilunternehmen, Zulieferern und Softwarehäusern Algorithmen und Software für die numerische Crash-Simulation. Wir setzen dabei auf den eingeführten methodischen und softwaretechnologischen Standards der Industrie auf. Unsere Arbeiten haben zwei Zielrichtungen:

- Beschleunigung von existierenden Simulationscodes durch effektive Nutzung von parallelen Rechnersystemen.
- Beschleunigung durch Entwicklung und Implementierung von verbesserten (Teil-)algorithmen und Anpassung auf anwenderseitig vorhandene Hardware.
- Untersuchungen über die Stabilität von Crash-Simulationen und Entwicklung zugehöriger Analysewerkzeuge,
- Integration von SW-Umgebungen und Visualisierung, einschließlich VR-Technologie (in Zusammenarbeit mit der Abteilung für Integrierte Softwaresysteme).

Lastverteilung für die Crash Simulation

Crash-Programme beruhen in der Regel auf expliziten Finite-Element Verfahren. Sie bieten sich daher für eine Parallelisierung für Parallelrechner mit verteiltem Speicher an. Das Finite-Element Netz wird dazu in geometrisch zusammenhängende Teile zerlegt (Partitionierung) und auf die jeweilige Prozessorstruktur abgebildet. Jeder Prozessor führt die Rechenoperationen durch, die auf das ihm zugeordnete Teilgebiet entfallen. Zwischen den einzelnen Berechnungsschritten werden die Berechnungsergebnisse an den Rändern der Teilgebiete ausgetauscht (Synchronisation). Entscheidend für eine gute Performanz der parallelen Anwendung ist die Lastverteilung zwischen den Prozessoren und der erforderliche Kommunikationsaufwand zur Synchronisation der Berechnung. Was sich auf den ersten Blick als einfach erweist, ist im Detail mit erheblichen algorithmischen Überlegungen verbunden. Die Crash-Simulation besteht nämlich im wesentlichen aus zwei Phasen. In der ersten Phase werden eigentliche Finite-Element Berechnungen durchgeführt (FE-Phase), in der zweiten werden dann Kontakte zwischen den verschiedenen Elementen gesucht und resultierende Kontaktkräfte berechnet (Kontakt-Phase). Die Kontakt-Phase spielt sich nur in einem Teilbereich des Gesamtmodells ab. Daraus ergibt sich, dass eine für die erste Phase geeignete Partitionierung des Gesamtproblems in aller Regel für die zweite Phase untauglich ist.

Für eine gute parallele Performanz der Gesamtanwendung muss daher eine Technik gefunden werden, die für beide Berechnungsphasen gleichzeitig eine akzeptable Lastverteilung gewährleistet. Eine Methode dies zu erreichen

besteht darin, für jede Phase eine eigene Partition zu verwenden. Dies führt allerdings zu einem erheblichen Kommunikationsaufwand, da sich die beiden Partitionen stark voneinander unterscheiden würden.

Ausgehend von Standard-Partitionierungsverfahren (z.B. rekursive spektrale oder geometrische Bisektion), mit denen typischerweise kompakte zusammenhängende Teilgebiete für die FE-Phase erzeugt werden, wurde ein Verfahren entwickelt, das gleichmäßige Lastverteilungen für beide Phasen, FE- und den Kontakt-Phase, erzielt. Dazu wird eine Über-Partitionierung, d.h. eine k-fache Menge von Teilmen im Verhältnis zur Anzahl der Prozessoren, erzeugt. Kleine Teilgebiete (Blöcke) der Über-Partitionierung mit gleicher FE-Last aber unterschiedlicher, in der Summe jedoch durchschnittlicher Kontakt-Last werden zu Teilgebieten mit gleich großen FE- und Kontakt-Lasten zusammengefasst.

Im Rahmen des Projektes AUTOBENCH sind zudem Strategien entwickelt worden, die die durch die Über-Partitionierung induzierte erhöhte FE- und Kontakt-Kommunikation niedrig halten. Es wurden ferner weitere Optimierungen zur Senkung der Interprozessorkommunikation vorgenommen.

Die Entwicklungen wurden am Modell BMW-CRASH50 mit 6000 Shell-Elementen erfolgreich getestet. Als Crash Code wurde PAM-CRASH der ESI-GmbH Eschborn verwendet. Es wurde ein Rechenzeitgewinn von rund 15% erzielt.

Partner:

BMW AG, München
ESI GmbH, Eschborn

Kontakt:

Dr. Hans-Georg Galbas
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 2765
E-Mail: galbas@scai.fhg.de

Dr. Otto Kolp
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 2319
E-Mail: kolp@scai.fhg.de

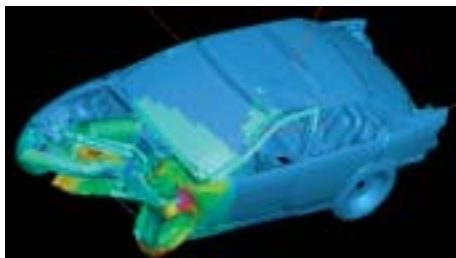
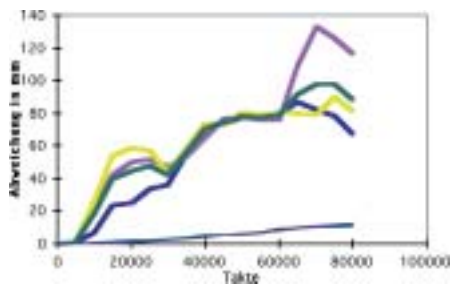


Abb. 1: Maximale und mittlere Streuung der Knotenpositionen (oben) und Abweichung der Knotenpositionen bei verschiedenen Simulationläufen als Farbkodierung auf der Karosserie

DIFF-CRASH - Stabilität von Crash-Simulationen

Bei Experimenten auf Parallelrechnern zeigen sich bei Crash-Simulationen Streuungen der Simulationsergebnisse (Knotenpositionen), ohne dass Modell oder Simulationsparameter verändert werden. Die Abb. 1 zeigt die maximale und durchschnittliche Differenz zwischen verschiedenen (farblich gekennzeichneten) Simulationläufen mit dem Programm PAM-CRASH der ESI GmbH, Eschborn, auf einem Parallelrechner mit verteiltem Speicher. Auf der waagerechten Achse sind die Zeitschritte aufgetragen. Das Modell war ein BMW der 3er Serie mit ca. 60.000 Elementen. Es treten Abweichungen um 10 cm und mehr auf. Ähnliche Ergebnisse sind von anderen Modellen und anderen Simulationsprogrammen bekannt.

Im Verbundprojekt AUTOBENCH wurden in Kooperation mit ESI und BMW die Ursachen dieser Streuung näher untersucht. Dafür wurde das Softwaretool DIFF-CRASH entwickelt, das die Ergebnisse verschiedener Simulationen miteinander vergleicht und verschiedene Maße für die Streuung für jeden Knoten und Zeitschritt berechnet.

Abb. 2 zeigt die Streuung von Simulationsergebnissen im Fußraum sowie auf dem Motorträger. Da die Eindringtiefe der Stirnwand in den Fußraum ein entscheidendes Designkriterium für die Crash-Auslegung eines Fahrzeugs ist, ist die Frage nach der Ursache der Streuung wichtig. Handelt sich um einen lokalen numerischen Effekt oder um eine Instabilität des Modells mit Konsequenzen für die Konstruktion?

DIFF-CRASH berechnet zur Untersuchung des Streuverhaltens ein Abhängigkeitsfunktional, das Relationen zwischen den Streuungen an verschiedenen Knoten zu verschiedenen Zeitpunkten auswertet. In Clustern werden die Knoten zusammengefasst, die miteinander im Sinne dieses Abhängigkeitsfunktionals verwandt sind. Das Clusterfunktional weist zu jedem Zeitpunkt allen Knoten die gleiche Zahl zu.

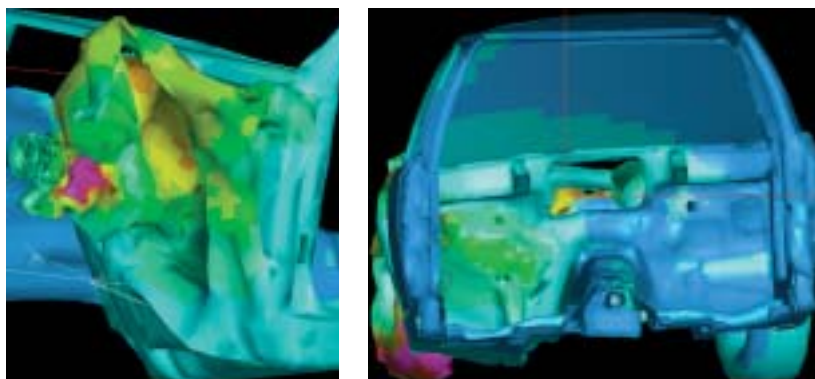


Abb. 2: Streuung von Simulationsergebnissen im Fußraum (rot = maximal, grün = mittlere Streuung)

Abb. 3 zeigt das Clusterfunktional zum Zeitpunkt 81 ms am Ende der Simulation. Die Farben Grün und Hellblau zeigen zwei dominierende Cluster. Dunkelblau gefärbte Knoten lassen sich keinem Cluster genügender Größe zuordnen. Das zweite Bild in Abbildung 4 zum Zeitpunkt 28 ms zeigt die Ursache der Streuung. Durch das Auftreffen des Pralldämpfers auf die Innenseite des Motorträgers entsteht Druck in Richtung des Motorträgers und damit «buckling». Die Grüne Farbe signalisiert, dass die Streuung im Innenraum eine direkte Folge des buckling an dieser Stelle ist.

Durch eine Modifikation am Längsträger im Bereich des Pralldämpfers und am Pralldämpfer selbst konnte das Modell soweit stabilisiert werden, dass die Streuung der Stirnwand als Ergebnis von Simulationen auf Parallelrechnern vernachlässigbar wird. In diesem Beispiel konnte damit geklärt werden, dass die beobachtete Instabilität der Berechnung auf eine Eigenschaft des der Simulation zugrundeliegenden Modells selbst zurückzuführen ist.

Bei Simulationen in sicherheitskritischen Bereichen sollten Streuungs- bzw. Stabilitätsuntersuchungen dieser Art in jedem Fall durchgeführt werden. Numerische oder Modellinstabilitäten sind dabei nur ein Aspekt. Das untersuchte Modell sollte darüberhinaus im Umfang der Produktionstoleranzen stochastisch variiert werden mit entsprechenden Simulationsläufen für die variierten Modelle.

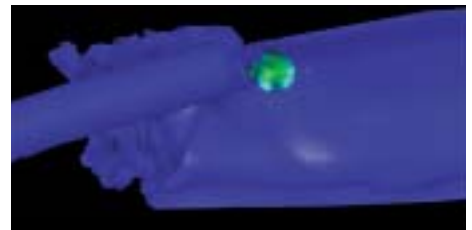
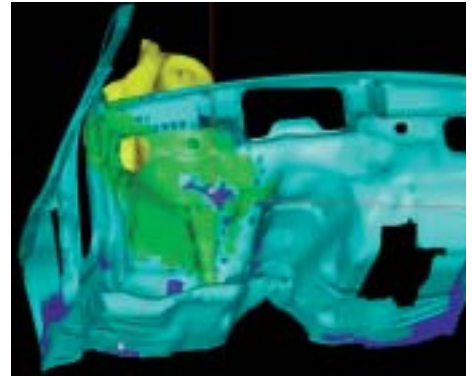


Abb. 3: Clusterfunktional als Farbkodierung im Innenraum zum Zeitpunkt 81 ms und auf dem Motorträger zum Zeitpunkt 28 ms.

Partner:

BMW AG, München
ESI GmbH, Eschborn
Volkswagen AG, Wolfsburg

Kontakt:

Clemens-August Thole
Tel: +49 (0) 2241 14 - 27 39
E-Mail: thole@scai.fhg.de

Dünnbesetzte Matrixprobleme

In vielen Anwendungen der numerischen Simulation, z.B. der Strömungs- und Strukturmechanik, werden die Strukturen und Geometrien durch komplexe Gitter diskretisiert. Je feiner die Auflösung eines solchen Gitters, umso höher ist im allgemeinen die Simulationsgenauigkeit, umso größer sind aber auch die aus dem Diskretisierungsprozess resultierenden numerisch zu lösenden Gleichungssysteme. Bei den heutzutage verlangten Simulationsgenauigkeiten ist die Geschwindigkeit, mit der diese Gleichungssysteme gelöst werden können, eine kritische Größe.

Numerische Standardverfahren sind nicht in der Lage, Gleichungssysteme dieser Größe mit ökonomisch vertretbarem Zeitaufwand zu lösen. In Frage kommen nur spezielle hierarchische Verfahren. Zu dieser Verfahrensklasse gehören die Mehrgitterverfahren, die in den Arbeiten des Instituts traditionell einen breiten Raum einnehmen. Anstatt nur auf dem gegebenen, sehr

feinen Gitter zu arbeiten, kombinieren solche Verfahren die numerische Information einer Hierarchie größerer Gitter. Damit gelingt es, das gegebene Problem mit optimaler Geschwindigkeit zu lösen, d.h. mit einem Rechenaufwand, der nur proportional zur Zahl der Unbekannten ist. Abhängig von der konkreten Anwendung kann der Rechenzeitgewinn bei großen Systemen im Bereich mehrerer Größenordnungen liegen.

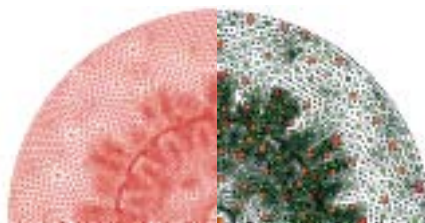
Eine direkte Integration der klassischen geometrischen Mehrgitterverfahren in existierende kommerzielle Simulationssoftware ist oft nur mit großem Aufwand möglich. Zum einen haben existierende kommerzielle Softwareprodukte typischerweise eine langjährige Entwicklung hinter sich und sind datenstrukturell für den Einsatz geometrischer Mehrgitterverfahren nicht ausgelegt. Zum anderen sind industriell relevante Gittermodelle oft so komplex, dass eine «natürliche» geometrische Gitterhierarchie nur mit großem Aufwand - wenn überhaupt möglich - konstruiert werden kann.

Bei den in diesem Arbeitsbereich entwickelten Algebraischen Mehrgitterverfahren (AMG) wird diese Problematik umgangen. Die Ermittlung einer konkreten Vergrößerungshierarchie erfolgt vollautomatisch und basiert auf den Koeffizienten der gegebenen Diskretisierungsmatrix, im einfachsten Fall ausschließlich auf deren Größe und Vorzeichen. Die hierarchische Struktur eines algebraischen Mehrgitterverfahrens ist nicht geometriebasiert und insbesondere nach außen völlig transparent: Ein AMG-Verfahren ist damit genauso einfach in ein vorhandenes Simulations-Softwarepaket zu integrieren wie ein Standardverfahren.

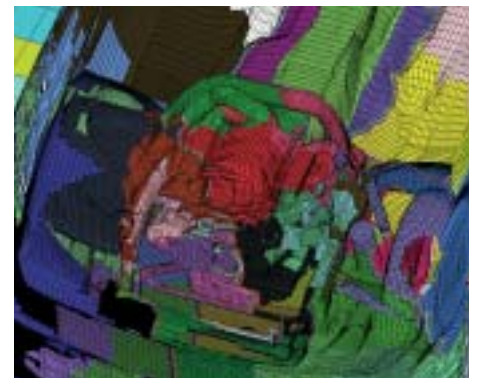
Mit unseren Arbeiten sprechen wir Partner und Kunden sowohl aus der Softwareentwicklung als auch der Anwendung an. Wir bieten neben unserer Lösertechnologie auch Analyse und Beratung zu Anwendungsproblemen sowie die Anpassung unserer Software auf kundenseitig betriebene Rechnersysteme, speziell Parallelrechner an.



Gittermodell für die Strömungssimulation im Motorraum (Computational Dynamics Ltd.)



FiniteElement Gitter (links), daraus erzeugt: AMG-Hierarchie von 5 Gittern (rechts)



Verteilung eines Gitters auf die Prozessoren eines Parallelrechners

AMG in der Strömungssimulation

Die Simulation von komplexen Strömungen spielt in der Automobilentwicklung eine herausragende Rolle. Neben der Umströmung des Autos für eine optimale aerodynamische Auslegung gehört dazu z.B. die optimale Auslegung von Heiz- und Kühlsystemen, die Durchströmung des Motorraumes oder die Innenströmung in der Fahrgastzelle. Komplizierte unstrukturierte und hochauflösende Gitter werden zur Modellierung dieser Anwendungen benötigt. Die Anforderungen an die Genauigkeit praktisch relevanter Simulationen steigen ständig, was wiederum zu immer feineren Gittern, verbunden mit wachsendem Rechenaufwand, führt. Gitter werden lokal verfeinert, um eine Genauigkeitssteigerung mit so wenig zusätzlichen Gitterpunkten wie möglich zu erreichen. Trotzdem sind bereits heute Gittergrößen mit über 10 Millionen Punkten keine Seltenheit, z.B. bei der Simulation der Umströmung von kompletten Fahrzeugen durch das kommerzielle Softwarepaket STAR-CD von Computational Dynamics Ltd.

Bei Anwendungen dieser Größenordnung bildet die numerische Lösung der zugrundeliegenden Gleichungssysteme einen Engpaß: Standardlöser wie etwa das präkonditionierte Verfahren der konjugierten Gradienten können nur noch mit Schwierigkeiten und großem Zeitaufwand eingesetzt werden. Die Softwareindustrie ist daher an Effizienzsteigerungen durch neue Algorithmen für große Gleichungssysteme interessiert. Für Computational Dynamics Ltd., einem führenden Soft-



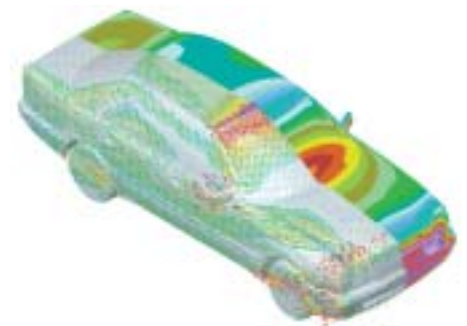
Gittermodell für die Autoumströmung (Computational Dynamics und Daimler Chrysler)

warehaus im Bereich general-purpose CFD-Software für den Automobilsektor, wurde im Institut ein optimiertes AMG-Verfahren entwickelt und in den kommerziellen CFD-Code STAR-CD integriert.

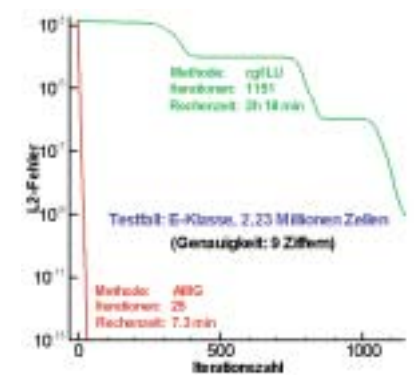
Das AMG-Verfahren ist durch Schnelligkeit und Robustheit charakterisiert und hat sich in vielen Tests den bisher verwendeten Standardverfahren als überlegen erwiesen. Es konvergiert nicht nur sehr schnell, sondern seine Konvergenzgeschwindigkeit ist, im Gegensatz zu klassischen Verfahren, weitgehend unabhängig von der Größe des zugrundeliegenden Problems. Das heißt, die Effizienzvorteile von AMG kommen um so mehr zum Tragen, je größer ein gegebenes Problem ist. Auch die Robustheit dieses AMG-Verfahrens, d.h. die Unabhängigkeit seiner Performanz von verschiedenen Einflussgrößen wie etwa der Komplexität des Gitters, variierenden Anisotropien oder der Nichtglattheit von Koeffizienten, ist sehr viel höher als bei klassischen Verfahren.

Eine kritische Größe bei hierarchischen Verfahren ist allerdings der Speicherbedarf. Gerade für Anwendungen in der Strömungssimulation mit extrem feinen Gitterauflösungen ist eine restriktive Verwendung von Speicherplatz zwingend. In unseren Verfahrens- und Softwareentwicklungen spielt diese Anwendervorgabe daher eine wichtige Rolle. In der Zusammenarbeit mit Computational Dynamics wurde eine Vergrößerungsstrategie entwickelt, die einen pragmatischen Kompromiss zwischen Speicherplatzbedarf und Rechengeschwindigkeit darstellt.

Die dargestellten Ergebnisse entstammen einer Windkanal-Simulation für einen Mercedes-Benz der E-Klasse. Der Konvergenzverlauf zeigt den Vergleich des AMG-Verfahrens mit einem Standardlöser (hier ILU kombiniert mit konjugierten Gradienten). Dargestellt ist der Konvergenzprozess für ein Gleichungssystem von rund 2.3 Millionen Unbekannten, das in jedem Zeitschritt des Simulationslaufes zu lösen ist. Mit einer Rechenzeit von rund 7.3 Minuten erweist sich das AMG-Verfahren dem Standardlöser (rund 138 Minuten) als überlegen. Bei wachsenden Problemgrößen steigt der Gewinn weiter an.



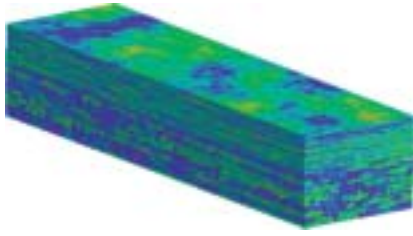
Visualisierung der Autoumströmung (Computational Dynamics und Daimler Chrysler)



Konvergenzverlauf: klassisches Einlevelverfahren vs. AMG-Verfahrens

Partner:
Computational Dynamics Ltd., London

Kontakt:
Dr. Klaus Stüben
Tel: +49 (0) 2241 14 - 27 49
E-Mail: klaus.stueben@scai.fhg.de



Variation der Permeabilität in einem Ölreservoir

AMG in der Ölreservoir-Simulation

In der Ölreservoir-Simulation werden komplexe Mehrphasenströmungen in porösen Medien numerisch approximiert. 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. Die vollimplizite Lösung dieses Systems für realistische Anwendungen ist so teuer, dass die Größe heute behandelbarer Probleme stark beschränkt ist. Schnelle Lösungsverfahren, insbesondere vom AMG-Typ, sind noch in der Entwicklung.

Halbimplizite IMPES-Verfahren (implicit in pressure, explicit in saturation), bei dem die zeitliche Entwicklung der Sättigung explizit diskretisiert wird, bieten grundsätzlich eine deutlich einfachere Alternative. In jedem Zeitschritt können die relevanten Druckverteilungen (z.B. der Öldruck) durch die Lösung skalarer Diffusionsgleichungen der Form berechnet werden. Der Tensor T steht dabei in direkter Beziehung zu dem Tensor der absoluten Permeabilität, die sich typischerweise als Funktion des Ortes um mehrere Größenordnungen und in stark unstetiger Weise ändert.

Wie bei jeder expliziten Zeitschrittmethode besteht aber der wesentliche Nachteil der IMPES-Methode in einer starken Beschränkung der maximal zulässigen Zeitschrittweite (CFL-Bedingung). Da sich diese Beschränkung mit abnehmender räumlicher Diskretisierungsschrittweite oder zunehmender Variation in der Größe des Tensors T zunehmend verschärft, ist die klassische IMPES-Methode, selbst bei Vorliegen eines schnellen Verfahrens zur numerischen Lösung der obigen Druckgleichung, aus praktischer Sicht zu ineffizient, wenn das gegebene Problem zu groß wird.

Seit einiger Zeit ist ein IMPES-ähnlicher Zugang populär geworden, bei dem die Beschränkung der Zeitschrittweite durch die CFL-Bedingung entfällt. Anstatt die zeitlich explizite Berechnung der Sättigungen auf dem statischen Raumgitter durchzuführen, wird eine Stromlinienmethode benutzt. Durch den Transport der Fluide entlang sich periodisch ändernder Stromlinien ist die Stromlinienmethode praktisch

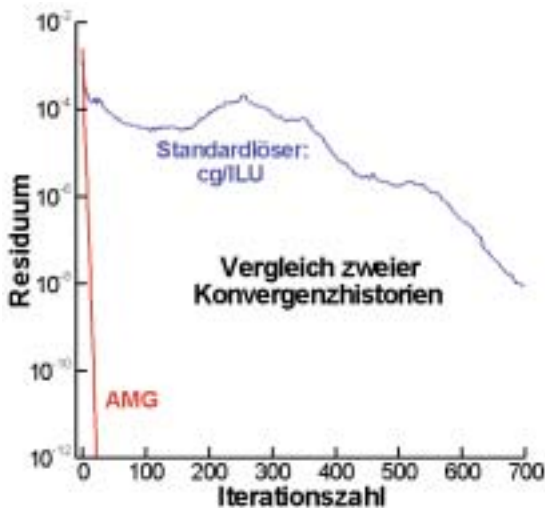


Stromlinien: Farblich markiert nach ihrem Ursprung

äquivalent zu einem dynamisch adaptierten Gitterverfahren bzgl. eines Gitters, das von dem statischen Gitter, das zur Beschreibung des Reservoirs (und zur Berechnung des Druckes) benutzt wird, entkoppelt ist. Die eindimensionale Natur einer Stromlinie erlaubt die Entkopplung des dreidimensionalen Problems in eine Serie eindimensionaler Probleme. Der Hauptvorteil dieses Ansatzes ist, dass die CFL Bedingung eliminiert ist, was die Durchführung globaler Zeitschritte ermöglicht, deren Größe unabhängig von der Feinheit der räumlichen Schrittweite ist.

Da die Berechnung der Phasen-Sättigungen bei der Stromlinienmethode sehr schnell ist, ist die Lösung der in jedem Zeitschritt anfallenden Druckgleichungen der mit Abstand zeitaufwendigste Prozess. Klassische Verfahren zur Lösung dieser Gleichungen sind sehr ineffizient. Das liegt zum Einen an der Größe der heute untersuchten Reservoirs, wesentlich aber auch an der starken Variation und Unstetigkeit der Permeabilität, die zu entsprechenden Variationen in den Koeffizienten der linearen Gleichungssysteme führt. Die Konvergenz klassischer iterativer Verfahren wird dadurch extrem verlangsamt. Abhängig von der konkreten Situation und einer Reservoirgröße von wenigen Millionen Unbekannten kann die Lösung einer einzelnen Druckgleichung mehrere Stunden dauern.

Eine Reduktion der Rechenzeit zur Lösung der Druckgleichungen impliziert direkt Möglichkeiten zu genaueren Reservoir-Simulationen und ist daher von hohem kommerziellen Interesse. Ein am Institut SCAI entwickeltes AMG-Verfahren ist bei zwei kommerziellen Softwarehäusern im Einsatz. Dadurch konnten zum erstenmal Reservoirs mit mehreren Millionen Zellen simuliert werden.



Standardlöser vs. AMG – Beschleunigung um den Faktor 20

Partner:

StreamSim Technologies Inc., San Francisco
GeoQuest Limited, Abingdon (UK)

Kontakt:

Dr. Klaus Stüben
Tel: +49 (0) 2241 14 - 2749
E-Mail: stueben@scai.fraunhofer.de

P-Löser in der Strukturmechanik

Der P-Löser ist ebenfalls ein hierarchisches iteratives Lösungsverfahren für dünnbesetzte Matrizen, das aber - im Unterschied zu AMG - spezielle geometrische Eigenschaften des zugrundeliegenden Problems ausnutzt: Insbesondere in der Strukturmechanik verwendet man zur Diskretisierung der kontinuierlichen Modelle auf Finite-Element Gittern typischerweise quadratische Ansatzfunktionen, manchmal wird die Ordnung auch adaptiv für jedes Finite Element des Gitternetzes an das Problem angepasst. Der P-Löser verwendet nun im Mehrgitterprozess anstelle eines groben Gitters eine Diskretisierung des Problems mit einer niedrigeren Ordnung.

Im Fall von Hexaedergittern, Ansatzfunktionen zweiter Ordnung auf dem „feinen“ und erster Ordnung auf dem „groben“ Gitter, reduziert sich - wie bei herkömmlichen Mehrgitterverfahren - die Anzahl der Gitterpunkte um den Faktor acht, da die Knoten auf den Kanten, Flächen und in der Mitte der Elemente wegfallen. Die Anzahl der Matrixeinträge verringert sich entsprechend um den Faktor 64.

Im Mehrgitterprozess wird auf dem groben Gitter ein iteratives Lösungsverfahren wie AMG verwendet oder - aufgrund der geringen Anzahl der Matrixeinträge - auch ein direkter Löser eingesetzt. Obwohl der P-Löser ein geometrisches Verfahren ist, kann er einfach für beliebige Finite Element Netze eingesetzt werden, da das „Grobgridproblem“ lokal für jedes Element definiert wird. Wie bei geometrischen Mehrgitterverfahren wird die Konvergenzgeschwindigkeit allerdings durch lokal verzerrte Elemente negativ beeinflusst. Es wurden hierfür spezielle Glättungsverfahren entwickelt, die diesen Effekt eliminieren.

In vergleichenden Untersuchungen anhand von MSC-NASTRAN V70 für zwei typische Anwendungsfälle (Kurbelwelle, Inliner) konnte die Überlegenheit des P-Lösers gegenüber dem schnellsten direkten (MSC-direct) und iterativen Verfahren (MSC-BIC) nachgewiesen werden. P-Löser können zudem effizient auf Parallelrechnern eingesetzt werden. Für das Beispiel der Kurbelwelle konnte eine hervorragende Skalierbarkeit bis zu einer Prozessorzahl von 32 nachgewiesen werden.



Gittermodelle einer Kurbelwelle (ca. 950.000 Unbekannte) und eines Inliners (ca. 500.000 Unbekannte) (Audi, McNeal Schwendler)

Prozessorzahl	Löser	Rechenzeit (in Sek.)	
		Inliner	Kurbelwelle
1	MSC-direct	808	4330
1	MSC-BIC	4988	17089
2	P-Löser	375	1460

Laufzeitvergleich von MSC-Nastran Lösungsverfahren mit dem P-Löser auf einer SGI Origin

Partner:
MSC Software GmbH, München

Kontakt:
Clemens-August Thole
+49 (0) 2241 14 - 27 39
E-Mail: thole@scai.fhg.de

Parameter Optimierung

Die Computersimulation erlaubt es, im Vorfeld einer konkreten, meist sehr teuren Prototypentwicklung wichtige Parameter oder auch Geometrien des zu entwickelnden Werkstückes oder Produktes zu optimieren. Typischerweise müssen jedoch für jede Parameter- oder Geometrieänderung immer neue Simulationsläufe durchgeführt werden. Wir entwickeln in diesem Arbeitsbereich Methoden, die den Prozess der Parameterwahl beschleunigen und automatisieren sollen. Wir verwenden dazu numerische Optimierungsalgorithmen, die Parameterkonstellationen systematisch testen und zu einer deutlich verbesserten Konstellation im Sinne einer vorgegebenen Zielfunktion führen. Unsere Methoden und unsere Software sind mit anwenderseitig vorhandenen Simulationsprogrammen kombinierbar. Sie berücksichtigen, dass die Berechnung eines einzelnen Zielfunktionswerts in der Regel einen kompletten Simulationslauf erfordert und damit viel Rechenzeit beansprucht und dass Gradienteninformation in der Regel nicht verfügbar ist.

Optimierungsverfahren

In einer Optimierungs-Toolbox werden verschiedene Optimierungsverfahren und zugehörige Suchstrategien bereitgestellt:

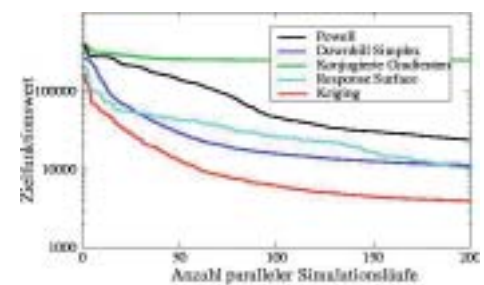
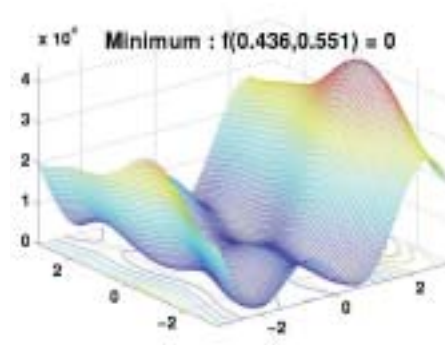
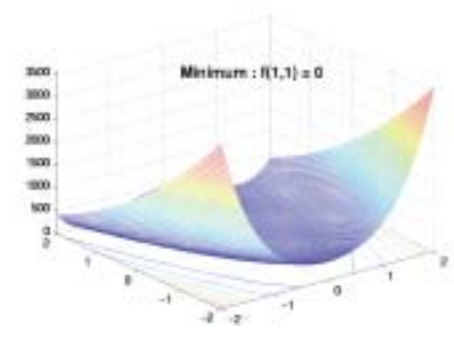
- Gradientenverfahren (Quasi-Newton, konjugierte Gradienten)
- direkte Suchverfahren (Downhill-Simplex, Powell, Multidirectional Search)
- Evolutionäre Verfahren (Simulated Annealing, Evolutionsstrategien)
- Verfahren mit Ersatzmodell (Design-of-Experiment, Response-Surface-Methode, Kriging)

Durch eine einfache Parameterdatei können verschiedene Strategien kombiniert und der Ablauf gesteuert werden. So kann z.B. die Response-Surface-Methode zur Evaluierung der globalen Zielfunktionslandschaft eingesetzt werden, gefolgt von einem Quasi-Newton-Verfahren zur gezielten lokalen Optimierung. Bei der Implementierung der verschiedenen Algorithmen wurde darauf geachtet, dass die Algorithmen eine parallele Berechnung von Stützstellen unterstützen.

Die Optimierungstoolbox wird unter dem Namen DesParO (Design Parameter Optimierung) vermarktet. Sie bietet dem Anwender:

- Effiziente Optimierungsalgorithmen
- Einfache Anpassung an beliebige Simulationsprogramme
- Parallele Berechnung
- Anwendungsberatung

Wir bieten dem Anwender zu DesParO Beratungsleistungen an: Definition der Zielfunktion, Auswahl der Optimierungsstrategie. Wir bieten ferner Unterstützung bei der Integration von DesParO und eventuell erforderlicher Erweiterungen in die Simulationsumgebung des Kunden an.



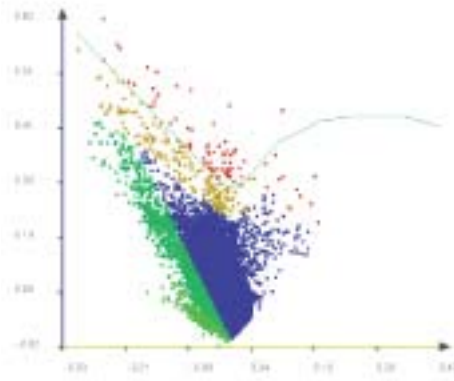


Abb. 1: FLC-Diagramm mit kritischen Bereichen:
grün =Faltengefahr rot/gelb =Reißgefahr

Optimierung der Tiefziehsimulation

Bei der Simulation eines Tiefziehvorgangs für Bleche geht es darum, Werkzeuggeometrien und Prozessparameter z.B. Niederhalterkräfte zu bestimmen, die die Herstellung des Werkstücks in gewünschter Form ohne Risse und Falten ermöglichen. Hierzu gehört auch die Berücksichtigung des Rückfedereffektes. Nach dem Öffnen der Werkzeuge bleibt das Werkstück wegen vorhandener Spannungen im Material nicht in der Form der Werkzeuge, sondern federt leicht zurück. Die Form nach der Rückfederung muß daher der gewünschten Form entsprechen.

In Zusammenarbeit mit der INPRO GmbH, Berlin, wurden Verfahren zur Optimierung von Tiefziehvorgängen entwickelt. Eingesetzt wurde die Simulationssoftware INDEED der INPRO GmbH kombiniert mit der SCAI Optimierungstoolbox DesParO.

Zielfunktion

Voraussetzung für die Optimierung sind Bewertungskriterien für Riss- und Faltenbildung sowie den Rückfedereffekt. Hierzu wurden verschiedene Kriterien, die auf der Auswertung von Postgrößen der INDEED-Simulation beruhen, ausgetestet. Zur Bewertung der Gefahr einer Rissbildung stellte sich die Betrachtung der Lage der

Punkte im FLC-Diagramm als besonders geeignet heraus. Abb. 1 zeigt ein FLC-Diagramm. Dort wird für jedes Element des Werkstücks die erste Hauptdehnung als Funktion der 2. Hauptdehnung aufgetragen. Punkte in der Nähe der grünen FLC-Kurve oder darüber indizieren Rissgefahr. Auch für die Bewertung der Gefahr von Faltenbildung wurde das FLC-Diagramm benutzt. Als Faltenkriterium wird die Anzahl der Elemente in der Nähe der Kurve „1.Hauptdehnung = -2 mal 2.Hauptdehnung“ benutzt (grüner Bereich in Abbildung 1). Durch die Analyse der Lage der Elemente im FLC-Diagramm kann die Tendenz zur Faltenbildung erkannt werden.

Durch den Rückfedereffekt nach Öffnen des Werkzeugs entspricht die endgültige Form des Werkstücks nicht genau der Form der Werkzeuge (Stempel und Matrize). Die Größe dieser Abweichung von der gewünschten Form muss durch eine Zielfunktion bewertet werden. Hierzu können vom Anwender beliebig viele Kreise auf der Matrize angegeben werden, an denen der Abstand in Ziehrichtung zwischen Werkstück und Matrize berechnet wird. Der Zielfunktionswert ist die Summe der einzelnen Abstände. Ist dieser Wert minimal, so ist auch die ungewünschte Rückfederung am geringsten. Abb. 2 zeigt die für das Testbeispiel Srail (siehe unten) definierten 9 Kreise.

Identifikation von Prozessparametern

Zur Identifikation von möglichen Prozessparametern wurden bei INPRO Parameterstudien am 2D-Tiefzieh-Benchmark Hutprofil der Numisheet '93-Konferenz durchgeführt. Dieses Testbeispiel ist für die Identifikation von Prozessparametern sehr geeignet, da es wenig rechenzeitintensiv ist und einen deutlichen Rückfedereffekt zeigt. Abb. 3 zeigt die Werkzeuge und die Platine.

Die Tests ergaben, dass durch eine Variation der Niederhalterkraft während des Tiefziehens die Rückfederung stark beeinflusst werden kann. Der Verlauf der Niederhalterkraft kann durch 7 Parameter beschrieben werden. Abb. 4 zeigt den schematischen Niederhalterkraftverlauf und die verwendeten Parameter.



Abb. 2: Kreise am Testfall Srail zur Bestimmung des Abstands von der gewünschten Form

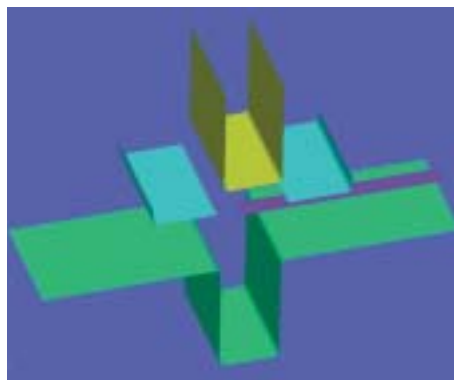


Abb. 3: Werkzeugsatz für den 2D-Bending-Benchmark mit Matrize (grün), Stempel (gelb), Niederhalter (türkis) und der Platine für das zu ziehende Hutprofil (violett, zu einem Viertel eingezeichnet).

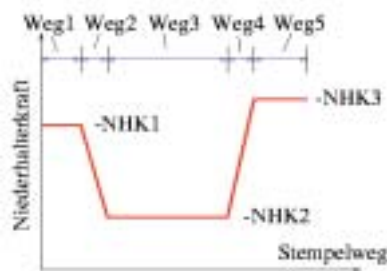


Abb. 4: Parametrisierung des Niederhalterkraftverlaufs mit 7 Parametern (3 Niederhalterkräfte (NHK), 4 Wege (Weg 3 ergibt sich aus dem Gesamtzieheweg))

Optimierungsalgorithmen

Wegen der großen Rechenzeit, die für eine Tiefziehsimulation nötig ist, müssen die Optimierungsalgorithmen mit möglichst wenigen Stützstellen eine möglichst große Verbesserung erreichen, denn die Berechnung des Ziel-funktionswertes an einer Stützstelle bedarf einer Tiefziehsimulation. Ferner sollte die Optimierungsstrategie die parallele Berechnung der Simulationen erlauben. Die Optimierungs-Toolbox DesParO bietet diese Möglichkeiten.

Werden mehrere Stützstellen unabhängig von einander benötigt, wie z.B. bei einem Design-of-Experiment Schritt oder einer Gradientenberechnung, stößt DesParO die Simulationsläufe mit INDEED auf verschiedenen Prozessoren bzw. auf verschiedenen Rechnern in einem Rechnergitter an. DesParO überwacht die Simulationen und führt die Ergebnisse zusammen.

Testfall Hut-Profil

Bei der rechnergestützten Optimierung des Hutprofils konnten verschiedene von DesParO bereitgestellte Verfahren schon nach wenigen Simulationsläufen eine deutliche Verringerung der Rückfederung erzielen. Aber nur das Kriging fand nach 32 Simulationsläufen eine Parameterkonfiguration, bei der keine zu starke Ausdünnung der Hutränder zu beobachten ist (Abb. 5). Für alle bei der INPRO-Parameterstudie betrachteten Parameterkonfigurationen konnten bei den genannten Zielfunktionen zum Teil signifikante Verbesserungen nachgewiesen werden.

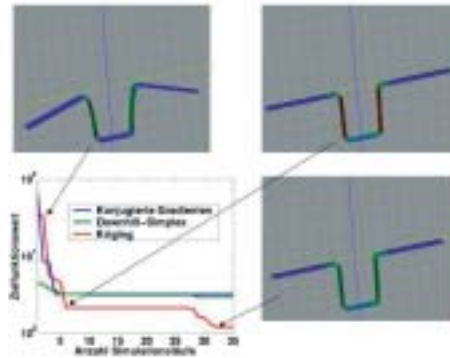


Abb. 5: Konvergenzverhalten verschiedener Optimierungsstrategien beim Hutprofil

Testfall Srail

Einen praxisnäheren Tiefzieh-Testfall stellt das Srail der Numisheet '96-Konferenz dar, das trotz seiner scheinbar einfachen Form schon alle in der Praxis wesentlichen Probleme aufweist. Abb. 6 zeigt den Konvergenzverlauf des Kriging-Verfahrens. Hier findet Kriging nach 19 Simulationsrechnungen eine Parameterkonfiguration, die kaum noch eine Rückfederung aufweist. Nach weiteren 5 Simulationsläufen wird eine fast ideale Parameter-einstellung gefunden, bei der nicht nur die Rückfederung verschwindet, sondern auch die Ausdünnung sehr regelmäßig ist.

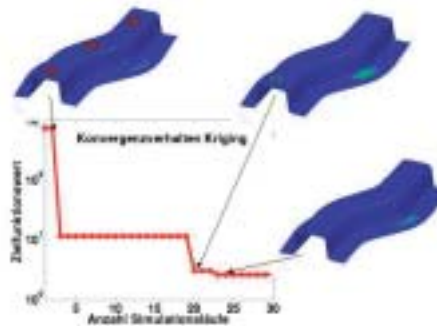


Abb. 6: Konvergenzverhalten des Krigings am Testfall Srail

Datenparallele Programmiersprachen wie z.B. High Performance Fortran (HPF) nutzen in typischen Simulationsanwendungen die Parallelität, die sich aus den inhärent parallelen Operationen auf großen Feldern ergibt. Die Verteilung der Berechnungen auf die zur Verfügung stehenden Prozessoren und die Ausformulierung von entsprechender Kommunikation bzw. Synchronisation erfolgt nicht explizit, sondern über eine Abbildung der Daten auf die Prozessoren des parallelen Systems. Hieraus generiert der Compiler ein Programm, wo jeder Prozessor die Anweisungen auf seine lokalen Daten ausführt. Er übernimmt somit die mühsame Verteilung der Daten auf die Prozessoren und die oft fehleranfällige Ausprogrammierung entsprechender Kommunikation für Zugriffe auf nicht lokale Daten. Datenparallele Programme sind wesentlich schneller zu erstellen und einfacher zu warten als entsprechende parallele Programme mit explizitem Nachrichtenaustausch in MPI (message passing interface).

Das Institut verfügt über das eigens entwickelte datenparallele Übersetzungssystem ADAPTATOR, mit dessen Hilfe neue und effizientere Optimierungstechniken für datenparallele Sprachen entwickelt und anhand von Simulationsanwendungen evaluiert werden. Ziel ist es, mit datenparallelen Programmen die gleiche Effizienz zu erzielen wie mit handoptimierten MPI Programmen. Der modulare Entwurf des ADAPTATOR-Systems und der Einsatz von Compiler-Werkzeugen gestattet eine flexible Realisierung und Evaluierung von Analysen und Transformationen, die für den Anwender eine effektivere Entwicklung von parallelen Programmen gestatten.

Partner:
INPRO GmbH, Berlin

Kontakt:
Dr. Jürgen Jakumeit
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 27 46
E-Mail: jakumeit@scai.fhg.de

ADVICE – HPF Umgebung für NEC Computer

Vektor-Supercomputer wie z.B. die NEC SX-5 verfügen über einen gemeinsamen Hauptspeicher und sehr leistungsfähige Vektor-Einheiten. Da kommerzielle HPF Compiler für Parallelrechner mit verteiltem Speicher, insbesondere auch PC-Cluster, entwickelt worden sind, können diese Compiler zwar auch auf der SX-5 eingesetzt werden, nutzen aber die speziellen Hardware-Eigenschaften dieser Architektur nicht optimal aus. Im Rahmen des ADVICE-Projektes wurde in Zusammenarbeit mit C&C Research Laboratories, NEC Europe Ltd., ein neues Ausführungsmodell für datenparallele Sprachen entwickelt und mittels ADAPTOR implementiert, das sowohl einen gemeinsamen Speicher als auch Vektor-Einheiten unterstützt. Dieses Ausführungsmodell trägt auch der Architektur des in Japan im Aufbau befindlichen Systems «Earth Simulator» Rechnung, das als ein Cluster von SX-Systemen realisiert wird.

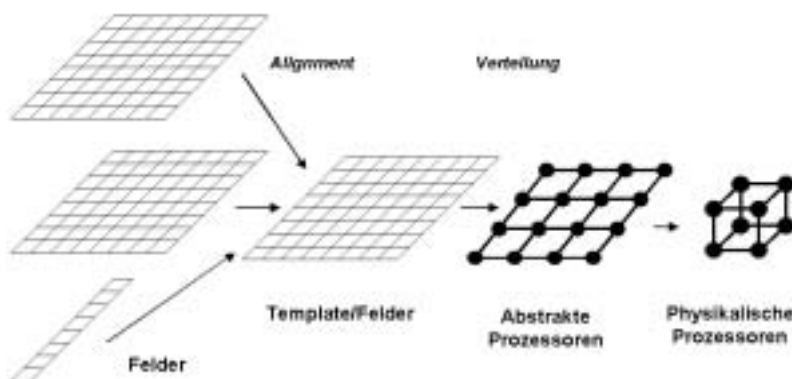
Der wesentliche Ansatz im Projekt ADVICE ist ein datenparalleles Programm für alle Arten von Parallelrechnern effizient zu übersetzen, nicht nur für Parallelrechner mit verteiltem Speicher, sondern auch für Parallelrechner mit gemeinsamem Speicher (SMP Systeme) sowie für Cluster von SMP Systemen. Der Anwender hat damit die Möglichkeit, mit einem einzigen Programm die unterschiedlichen Architekturen effizient zu nutzen und hat nicht mehr unterschiedliche Versionen ein und desselben Programms. Dieser Ansatz konnte für eine große Klasse von datenparallelen Programmen erfolgreich verifiziert werden.

Für Parallelrechner mit gemeinsamem Speicher sieht ADAPTOR die Möglichkeit vor, aus einem HPF Programm direkt ein äquivalentes OpenMP Programm zu erzeugen. OpenMP hat sich zum Standard für die parallele Programmierung bei Vorliegen eines globalen Adressraums etabliert. Da die Verteilung der Berechnungen vom Compiler so vorgenommen wird, dass die Lastverteilung konform zur Datenverteilung unter Ausnutzung der

Datenlokalität erfolgt, bietet der Ansatz über HPF gegenüber expliziter OpenMP Programmierung den Vorteil, dass typische Programmierfehler, die zu einem erhöhten Datentransfer zwischen den Prozessoren führen, von Anfang an vermieden werden. Der globale Adressraum bietet gegenüber dem MPI Modell den entscheidenden Vorteil, dass aufwendige Kommunikationsmuster nicht mehr zur Laufzeit berechnet werden müssen, da jeder Prozessor direkten Zugriff auf nicht lokale Daten hat.

Für Cluster von SMP Systemen wurde der HPF Abbildungsmechanismus so erweitert, dass für den Anwender die hierarchische Struktur eines SMP Clusters berücksichtigt wird und somit eine Nutzung der beiden Speichermodelle (verteilt im Cluster, gemeinsam im Knoten eines Clusters) transparent wird. Der Compiler generiert ein hybrides Programm, das OpenMP und MPI gemeinsam verwendet. Die explizite Programmierung in einem derartigen hybriden Modell findet bei Anwendern kaum Zuspruch, da es die Komplexität der beiden Modelle vereinigt.

Auch bzgl. der Vektorisierung des vom Compiler generierten Programms wurden innerhalb von ADAPTOR Optimierungen vorgenommen. Zwar verfügen Vektorrechner-Systeme wie die SX-Serie über leistungsfähige Compiler, die automatisch vektorisieren können, aber ein datenparalleles Programm bietet zusätzliche Informationen, die in vielen Fällen für eine noch bessere Vektorisierung genutzt werden können.



Spezifikation von Datenlokalität in HPF

Partner:

C&C Research Laboratories, NEC Europe Ltd.

Kontakt:

Dr. Thomas Brandes
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 24 92
E-Mail: brandes@scai.fhg.de

Template/Felder

Abstrakte



Klaus Wolf

Ottmar Krämer-Fuhrmann

IHPFS ALIGN

IHPFS DISTRIBUTE

Implementat
compiler dir

IHPFS TEMPLATE

IHPFS PROCESSORS

*Integrierte
Simulations-
umgebungen*

Arbeitsgebiet B
Netzwerke Visualisierung

MinCCI

ExtraServer

In der Abteilung Integrierte Softwaresysteme werden Softwarewerkzeuge für die Simulation wissenschaftlicher und technischer Prozesse entwickelt und auf Netzen aus Hochleistungsrechnern, auf Workstation- und PC-Clustern ausgeführt. Die Arbeiten konzentrieren sich auf zwei Bereiche:

Softwarelösungen für die integrierte und multidisziplinäre Simulation

Es werden Softwarelösungen erarbeitet, die die Realisierung von integrierten und multidisziplinären Simulationsanwendungen erleichtern oder teilweise erst möglich machen. Ein Schwerpunkt ist die Entwicklung und der Einsatz der multidisziplinären Kopplungsbibliothek MpCCI (Mesh-based parallel Code Coupling Interface). Die Arbeiten dazu erfolgen in Kooperation mit der Pallas GmbH in Brühl, weltweit agierenden Softwarehäusern für Simulationscodes und Anwendungspartnern aus Industrie und Forschung.

Ein weiterer Schwerpunkt in diesem Arbeitsbereich ist die Integration von Datenflüssen zwischen den verschiedenen Arbeitsschritten im industriellen computergestützten Produktentwurf. Durch allgemeine und generische Datenschnittstellen wird der Austausch und die Verwaltung von Daten zwischen den Softwarewerkzeugen der unterschiedlichen Hersteller erleichtert. Entsprechende Softwarewerkzeuge (DataServer) unterstützen diesen Prozess der Daten(fluss)integration.

MpCCI als Schnittstelle zwischen verschiedenen Simulationsverfahren und der DataServer als Informationsbroker zwischen den verschiedenen Arbeitsschritten im Entwurfsprozeß zusammen bieten eine Softwareplattform für die Realisierung von Systemumgebungen für integrierte und multidisziplinäre Simulationsanwendungen.

Grid Computing

SCAI verfügt über eine moderne, verteilte Rechnerinfrastruktur. Parallele Rechnersysteme verschiedener Hersteller (IBM, NEC, SUN und PC-Cluster) und Betriebssysteme sind durch schnelle Netze verbunden.

Mit Technologien des Grid-Computing steht diese Infrastruktur auch externen Anwendern aus Industrie und Wissenschaft zur Verfügung. Ein Ingenieurbüro, welches ein neu entwickeltes Bauteil testen und optimieren möchte, soll nicht weiter zu einer großen Investition für schnelle Rechner und für teure Softwarelizenzen gezwungen werden. Statt dessen genügt ein Internetanschluss, um bei SCAI oder einem seiner Partner eine Simulations- oder Optimierungsberechnung mit einem Simulationsprogramm auf einem leistungsfähigen Computersystem durchführen zu können. Unsere Entwicklungsarbeiten zum Grid Computing sichern das Know How, um die Zuverlässigkeit und Verfügbarkeit des Gesamtsystems, die Sicherheit der Kommunikation und die einfache Nutzung der Grid-Ressourcen zu gewährleisten.

Entwickelt werden ferner graphische Benutzeroberflächen sowie Werkzeuge für Analyse, Optimierung und Steuerung von Simulationsanwendungen. Dazu gehören auch Visualisierungsschnittstellen für die unterschiedlichen Anwenderprogramme, die es dem Entwicklungsingenieur ermöglichen, umfangreiche Berechnungsergebnisse problemangepasst und interaktiv zu bearbeiten. In Kooperation mit dem Fraunhofer-Institut für Medienkommunikation (IMK) wird Partnern und Kunden modernste VR-Technologie zur Verfügung gestellt.

Kontakt

Ottmar Krämer-Fuhrmann
Abteilungsleiter
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 2202
E-Mail: ottmar.kraemer-fuhrmann@scai.fhg.de

Klaus Wolf
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 2557
E-Mail: klaus.wolf@scai.fhg.de



Gekoppelte Simulationen und integrierte Systemumgebungen haben in den letzten Jahren, sowohl im Forschungsumfeld als auch im industriellen Einsatz an Bedeutung und Nachfrage gewonnen. Während für die Einzeldisziplinen in der numerischen Simulation häufig gute Software angeboten wird, ist mit der praktischen Durchführung einer gekoppelten oder multidisziplinären Simulation immer noch ein großer Aufwand verbunden. Gleiches gilt für die Realisierung integrierter Umgebungen, in denen die Softwarewerkzeuge aus den einzelnen Arbeitsschritten flexibel kommunizieren und interagieren können.

Mit der in SCAI entwickelten Kopplungsbibliothek MpCCI (Mesh based parallel Code Coupling Interface) ist ein Softwarestandard für die Kopplung von Simulationscodes entstanden. Die Bibliothek wird fortlaufend weiter entwickelt und an neue Anwenderanforderungen angepasst. Mit Anbietern kommerzieller Simulationscodes wird an der direkten Integration der MpCCI-Schnittstelle in die Codes gearbeitet. Die numerischen Aspekte (Kopplungsalgorithmen) werden in Zusammenarbeit mit der SCAI-Abteilung Angewandte Numerik behandelt und in die Bibliothek integriert. MpCCI ist ein eingetragenes Warenzeichen

der FhG; die Software wird von der Pallas GmbH, Brühl, vertrieben.

CAE-basierte Produktentwicklung (Computer Aided Engineering) in der Industrie beinhaltet den Einsatz unterschiedlicher CAE-Werkzeuge in den einzelnen Prozessphasen. Dazu gehört neben der eigentlichen Simulation auch die Auf- und Nachbereitung der Daten. Wir arbeiten an der Integration verschiedener Werkzeuge und ihrer Datenflüsse. Ein konkretes Softwarewerkzeug ist der MpCCI-DataServer.

MpCCI - Software und Anwendungen

Für die viele Aufgaben in der numerischen Simulation z.B. in der Strömungsmechanik, Strukturanalyse, Elektrodynamik gibt es bewährte, zum Teil kommerziell vertriebene Simulationsprogramme. Häufig müssen für Anwendungen diese Programme gekoppelt werden, um Interaktion zwischen den verschiedenen physikalischen Prozessen zu berücksichtigen.

Mit der MpCCI Kopplungsbibliothek (Mesh-based parallel Code Coupling Interface) hat das Institut einen Softwarestandard für solche gekoppelten oder multidisziplinären Simulationen etablieren können. MpCCI ist ein eingetragenes Warenzeichen der FhG, die MpCCI-Software wird in Lizenz von der Pallas GmbH, Brühl, vertrieben. Anwender-Support und -beratung werden von uns in Zusammenarbeit mit der Pallas und Softwarehäusern angeboten. Mit Anbietern von Simulationssoftware, darunter INTES, Stuttgart, Computational Dynamics, London, und Ansys, Canonsburg und anderen, wird an der Integration von MpCCI in Produktionscodes gearbeitet.

Die Nutzung und Weiterentwicklung von MpCCI werden begleitet von einem MpCCI User Forum. Im Februar 2001 fand das zweite User Forum statt, das mit mehr als 60 Teilnehmern aus Industrie und Forschung die weiter gestiegene Akzeptanz der Software dokumentiert. Im Februar 2002 findet das dritte User Forum im Fraunhofer Institutszentrum Birlinghoven statt.

Technische Details

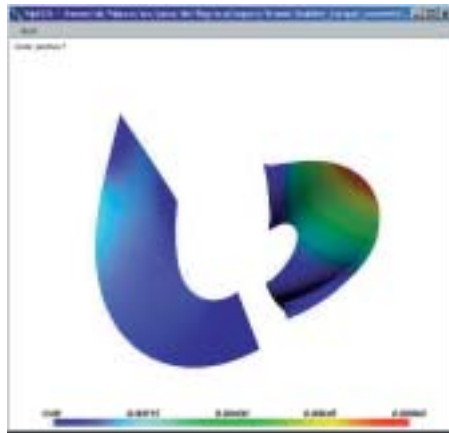
Die MpCCI-Kopplungsbibliothek und dazu passenden Werkzeuge bilden einen Simulationsbaukasten, mit dem schnell und flexibel Lösungen für komplexe, gekoppelte Aufgaben erstellt werden können. Im März 2002 wird die nächste Version der MpCCI-Bibliothek (Version 1.3) mit neuen Features auf den Markt gebracht:

- neue Elementtypen für die 2D-Kopplung,
- einfachere Unterstützung für Remeshing,
- Nearest-Neighbour-Interpolation,
- Synchronisationspunkte mit deutlich erweiterter Funktionalität.

Die Bibliothek wird ergänzt durch neue Zusatztools, die die Benutzung erheblich vereinfachen werden:

- Über eine graphische Benutzerschnittstelle kann das MpCCI-gekoppelte System konfiguriert und kontrolliert werden (MpCCI-GUI).
- Eine spezielle Visualisierung erlaubt bessere Detailuntersuchungen aller Kopplungsparameter und -ergebnisse (MpCCI-Visualiser).
- Die Fehlersuche wird erheblich durch den Einsatz des so genannten 'Playback-Tools' erleichtert (MpCCI-Playback)

Auf Basis der MpCCI-Software bietet SCAI Sonderanpassungen und Speziallösungen an, die die allgemeine Funktionalität der Software nach Kundenwunsch erweitern.



Strömung-Strukturkopplung
Chemischer Mixer (Sulzer Innotec)
Drehmomentwandler (Daimler-Chrysler)

Partner:

Fraunhofer UMSICHT
Computational Dynamics Ltd., Intes GmbH,
AEA, ANSYS, MSC/Marc
Daimler-Chrysler, Sulzer Innotec
DLR, EADS
Moeller GmbH, Forschungszentrum Karlsruhe

Kontakt

Klaus Wolf
Tel: +49 (0) 2241 14 - 2557
E-Mail: klaus.wolf@scai.fhg.de

Aeroelastische Anwendungen

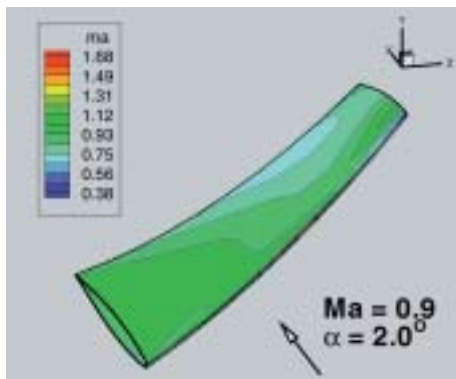
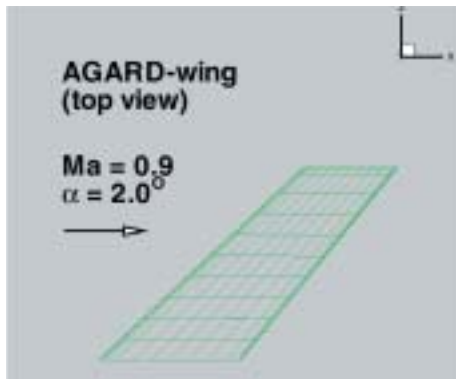
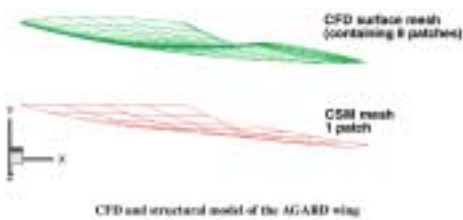
Die Aeroelastik erforscht die Wechselwirkung zwischen den Verformungen einer umströmten elastischen Struktur und den auf die Struktur wirkenden aerodynamischen Kräften. Für das Design von Flugzeugen spielen aeroelastische Aspekte insbesondere bei extremen Fluglagen eine wichtige Rolle.

Durch die voneinander unabhängige Diskretisierung für die Strömungs- und für die Strukturcodes entstehen unterschiedliche Gitter, die im allgemeinen keine gemeinsamen Knotenpunkte an der Strukturoberfläche haben. So können Spalten zwischen den Gittern von Strömung und Struktur oder auch Überlappungen der Gitter auftreten. Die räumliche Interpolation der physikalischen Größen zwischen Strömungs- und Strukturberechnung ist bei diesem Ansatz neben der Implementierung eines geeigneten Kopplungsalgorithmus die wichtigste Aufgabe. Die für die Interaktion von Strömung und Struktur erforderlichen Größen sind die aus der Strömungsanalyse resultierenden Drücke und die Verformungen der Geometrie aus der Strukturberechnung. Aus den Drücken ergeben sich die Kräfte, die an den Strukturknoten angreifen. Die durch diese Kräfte hervorgerufenen Verformungen der Struktur werden auf die Strömungsknoten interpoliert und legen damit die neue Geometrie für die Strömungsberechnung fest.

Für die Kopplung von seriellen sowie parallelen Strömungs- und Strukturcodes wird MpCCI eingesetzt. Die in MpCCI zur Verfügung stehenden Standard-Interpolationsverfahren reichen allerdings für die speziellen Anforderungen der Aeroelastik nicht aus. Die Standard-Interpolationen basieren auf Projektionen der Knoten von einem Gitter in das andere. In der Aeroelastik unterscheiden sich die Gitter aber derartig, dass sinnvolle Projektionen nicht durchgängig möglich sind. In vielen Fällen wird in der Strukturberechnung nur der Kern eines Tragflügels modelliert, wogegen im CFD die genaue Tragflügeloberfläche zur Vernetzung verwendet wird. Darüber hinaus ist die Interpolationsfunktion der Standardverfahren an den Elementübergängen nicht notwendigerweise differenzierbar. So kann sich bei der Interpolation der Verformungen keine genügend glatte Oberfläche der Tragflügel für die Strömungsberechnung ergeben. Ein weiterer Punkt, der gegen die Verwendung der Standardinterpolationen spricht, ist die Verletzung der physikalischen Erhaltungssätze.

Im Institut für Aeroelastik des Deutschen Zentrum für Luft und Raumfahrt (DLR) wurde eine Bibliothek von Interpolationsalgorithmen entwickelt, die die speziellen Anforderungen der Aeroelastik an eine räumliche Interpolation zwischen Strömung und Strukturberechnungen erfüllen (radiale Ansatzfunktionen). In dem gemeinsamen Projekt AKITA (Aeroelastik Interpolationsalgorithmen) und in einem Kooperationsprojekt mit der EADS, München, werden diese Interpolationstechniken in die Kopplungssoftware MpCCI integriert und an anwenderseitig vorgegebenen Benchmarks validiert. Die Interpolationsbibliothek wurde um radiale Basisfunktionen erweitert. Sie erweisen sich nicht nur bei aeroelastischen Problemen als sinnvoll. Ein großer Vorteil ist die Flexibilität, mit der diese Interpolationsschemata mit allen auftretenden Gitterstrukturen umgehen können. Die Scattered Data Interpolationen mit radialen Basisfunktionen können auf beliebigen Gitterstrukturen arbeiten, sowohl bei den Stützstellen als auch bei den Auswertungsstellen. Diese radiale Interpolation ist für beliebige Raumdimension anwendbar.

Ergebnisse der beiden Projekte fließen in das laufende EU Projekt TAURUS (Development for aeroelastics simulations on unstructured grids) ein. Ziel dieses Projektes ist die Entwicklung eines effizienten, benutzerfreundlichen Analysewerkzeuges für Strömungs- und Struktur-Wechselwirkungen. Der DLR Strömungscode TAU wird dabei mit Schnittstellen zu allen von den Projektpartnern verwendeten Strukturcodes, eingeschlossen der kommerziellen Codes wie z.B. NASTRAN, versehen. Das System soll sowohl statische als auch dynamische Rechnungen durch-



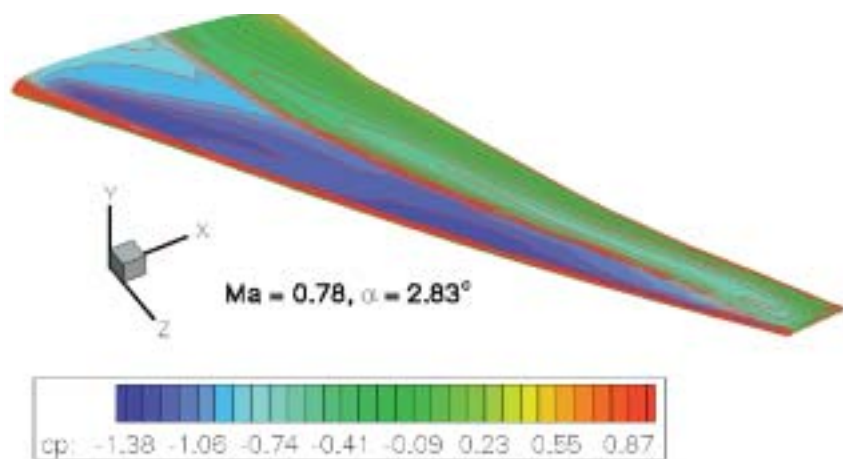
AGARD Flügel

führen können. Die Schnittstellen werden wieder mit MpCCI realisiert.

Die Arbeiten über Interpolationsschemata, Kopplungsalgorithmen und die Software wurden anhand von zwei Testkonfigurationen erfolgreich validiert:

- Der AGARD Flügel ist ein Standard-Testbeispiel in der Aeroelastik. Das Strukturmodell des Flügels liegt in einem NASTRAN-Format vor und stellt eine ebene Platte mit 121 relativ gleichmäßig verteilten Knoten dar. Das Strömungsmodell dagegen hat etwa 10000 Elemente und 873 Punkte auf der Flügeloberfläche. Der für die gekoppelte Simulation verwendete Strukturcode ist der Mehrkörper Simulationscode SIMPACK, der Strömungslöser der parallele, blockstrukturierte FLOWer Code des DLR.

- Der AMP Flügel ist ein Airbus-ähnlicher Flügel. Hierfür wurde FLOWer mit dem Finite Elemente Code NASTRAN gekoppelt. Das Strukturmodell des AMP Flügels ist eine Platte mit wenigen Knoten (75 Strukturknoten und 72 Elementen); die Flügeloberfläche des Strömungsmodells weist mit ungefähr 100000 Elementen und 50000 Knoten eine erheblich feinere Diskretisierung auf.



AMP Flügel

Partner:
Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR),
Institut für Aeroelastik, Göttingen
EADS, München

Kontakt:
Klaus Wolf
Tel.: +49 (0) 2241 - 14 - 2557
E-Mail: klaus.wolf@scai.fhg.de

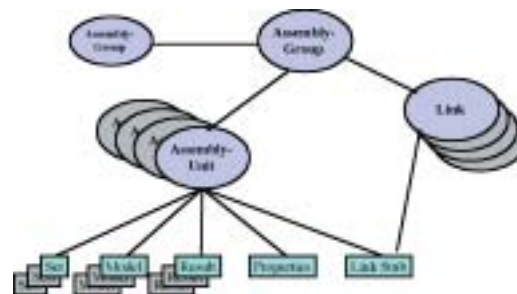
Datenmanagement für Prozessketten im CAE

Die Integration und Koordination von Datenflüssen zwischen verschiedenen CAE-Werkzeugen ist Gegenstand dieses Projektbereichs. Die Arbeiten werden gemeinsam mit den Anwendungsprojekten des Instituts durchgeführt.

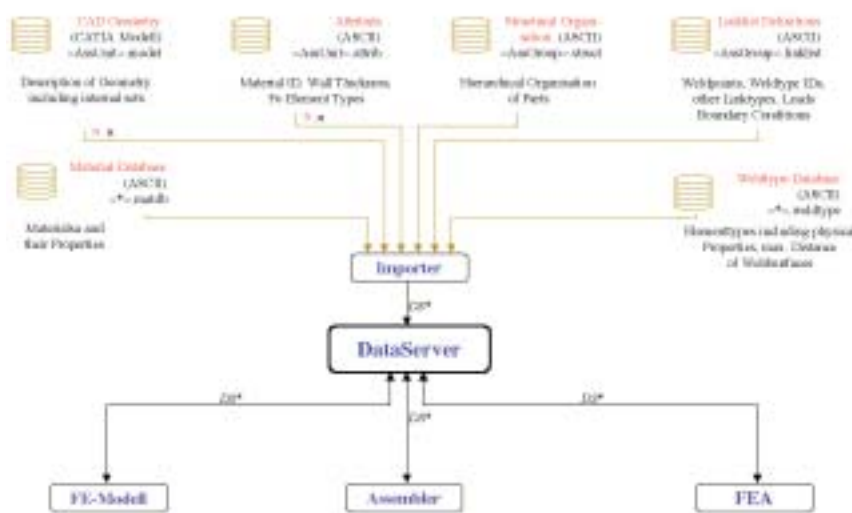
In dem im vergangenen Jahr abgeschlossenen Verbundprojekt Autobench (Integrierte Entwicklungsumgebung für virtuelle Automobile) wurde ein CORBA-basierter Ansatz realisiert, um Datenflüsse in CAE-Prozessketten zu koordinieren. Über eine zentrale Komponente, den DataServer, kann der gesamte Datenaustausch zwischen den verschiedenen Einzelwerkzeugen abgewickelt werden. Dieser DataServer ist als ein Werkzeug konzipiert, das dem Benutzer einen einheitlichen und objekt-orientierten Zugriff auf große Datenbestände ermöglicht. Dazu zählen nicht nur Berechnungsergebnisse, sondern auch alle weiteren Daten, die für den Simulationsprozess benötigt werden. Die Verwendung von CORBA gewährleistet die Portabilität der einzelnen Komponenten und die Kommunikation zwischen ihnen. Die Kommunikation der Komponenten mit dem DataServer erfolgt über eine in CORBA-IDL spezifizierte Schnittstelle.

Details der Realisierung

Das zentrale Konzept des DataServers ist die Modellierung aller Daten gemäß ihrer Bauteilzugehörigkeit. Ausgehend von der im CAD definierten Bauteilaufteilung werden alle weiteren Daten (Attribute und Materialkennwerte, Lastfälle, Randbedingungen, Netzmodell, Ergebnisse, usw.) ebenfalls direkt einem konkreten Bauteil zugeordnet. Um aus einzelnen Bauteilen eine Gesamtkonfiguration für ein Fahrzeug zu bekommen, müssen die dazu notwendigen Bauteildaten (d.h. die Netzmodelle und Randbedingungen) in einem separaten Schritt assembliert werden.



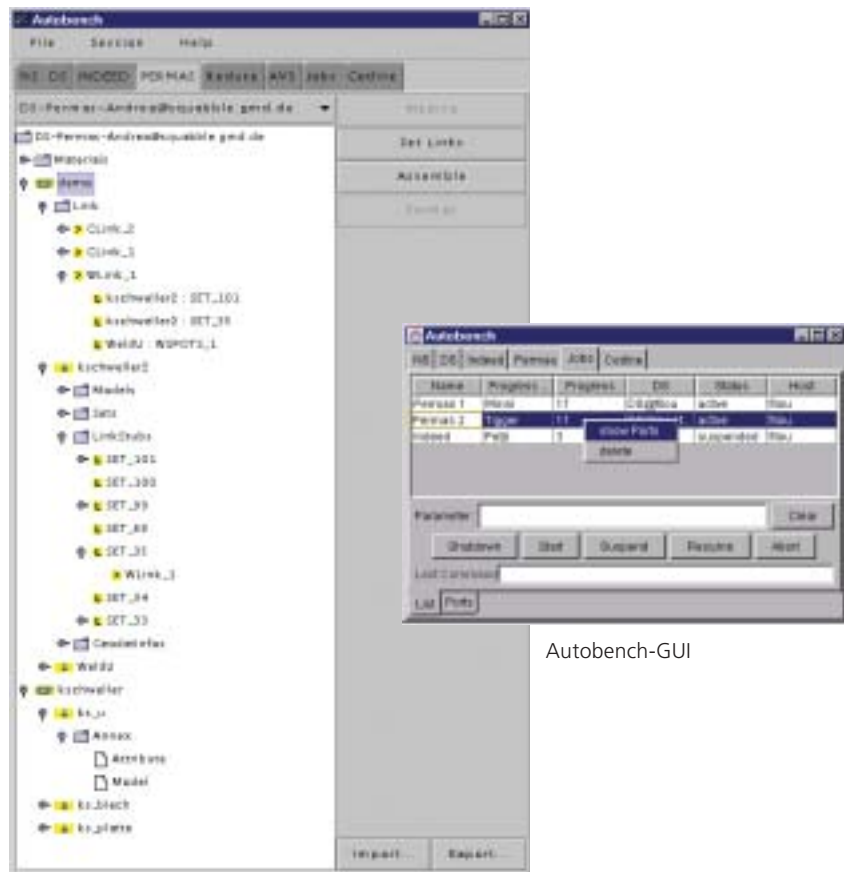
Autobench - Datenmodell



Autobench - Datenfluss

Der DataServer bietet zu diesem Zweck ein allgemeines Datenmodell an, auf das die Datensätze einer konkreten Applikation abgebildet werden müssen. Die Grundelemente des Datenmodells sind Assembly-Units, denen alle Daten eines einzelnen Bauteils zugeordnet werden können. Mehrere Assembly-Units zusammen bilden eine Assembly-Group, die konkrete Definition der Verbindung zwischen zwei oder mehr Assembly-Units wird dann über Links spezifiziert. Die eigentlichen Simulationsdaten werden in den AssemblyUnit-Objekten gespeichert. Zu einer AssemblyUnit gehört das Rechnernetz und die Ergebnisse, die auf diesem Netze berechnet wurden. Da u.U. während eines Simulationslaufes eine Verfeinerung der Netze durchgeführt werden kann, ist ein Bauteil in der Lage, eine Sequenz von Rechnernetzen zu speichern.

Zu dem DataServer gehören weitere Softwarewerkzeuge für die Konvertierung in andere Datenformate. Dies erleichtert die Integration neuer Komponenten. Einen Schwerpunkt bildet dabei die Importierung von CAD-Daten. Dazu gehören die Attribut-Dateien für die einzelnen Bauteile, Strukturierungs- und Linklisten-Dateien für Bauteilgruppen und außerdem Dateien mit Materialbeschreibungen. Alle Komponenten der Prozesskette können über eine zentrale Benutzeroberfläche (AutobenchGui) gesteuert werden.



Autobench-GUI

Partner:
 Intes GmbH, Stuttgart
 Inpro GmbH, Berlin
 Universität Stuttgart, Institut für Informatik

Kontakt:
 Klaus Wolf
 Tel.: +49 (0) 2241 14 - 2557
 E-Mail: klaus.wolf@scai.fhg.de

Die Idee des Grid Computing ist es, Computerleistungen überall und zu jeder Zeit zugänglich zu machen. Grundlage dafür ist eine Netzinfrastruktur mit hoher Bandbreite, wie sie das Internet zum Teil heute schon darstellt. Darauf aufbauend wird eine Softwareinfrastruktur geschaffen, die es jedem Benutzer ermöglicht, vielfältige Computerleistungen von seinem PC aus anzufordern. Wie der Strom aus der Steckdose entnommen wird, ohne dass der Verbraucher weiß, in welchem Kraftwerk er produziert wurde, werden Computerleistungen zur Verfügung gestellt, ohne dass der Computernutzer zu wissen braucht, auf welchem Rechner seine Anwendungen durchgeführt werden. Ein solches Modell kann auf verschiedene Ressourcen angewandt werden: Rechenleistung, Speicherplatz, Softwarelizenzen etc.

Momentan ist die Entwicklung von Grid-Infrastrukturen überwiegend durch Forschungseinrichtungen geprägt. Informatiker haben Softwarerahmen (z.B. GLOBUS, LEGION, UNICORE) entwickelt, über die es möglich ist, Rechner über das Internet in vielfältiger Weise zu nutzen. In einem solchen Grid wird - meist geschlossenen Nutzergruppen - ein einfacher Zugang zu großen Datenmengen oder schnellen Parallelrechnern ermöglicht. Ziel unserer Arbeiten ist es, die Möglichkeiten des Grid Computing für den industriellen Einsatz zu erschließen.

Unser Arbeitsbereich Grid Computing in SCAI ist im Aufbau. Er gründet sich auf langjährige Erfahrungen des Instituts im Rechnerbetrieb, in der Rechnerkopplung und im Aufbau und Betrieb von Hochleistungsnetzen.

Aktivitäten

Im Europäischen Grid Forum, einer Initiative von 20 Universitäten und Forschungseinrichtungen, wird das europäische e-grid als Prototyp und Testbett aufgebaut.

Es soll genutzt werden, um Simulationsanwendungen mit hohem Rechenzeitbedarf auf freien Ressourcen der Partner berechnen zu können. Wir sind am Aufbau dieses Grids beteiligt. Die Parallelrechner des Instituts werden auf Basis der GLOBUS Software an das Testbett angeschlossen.

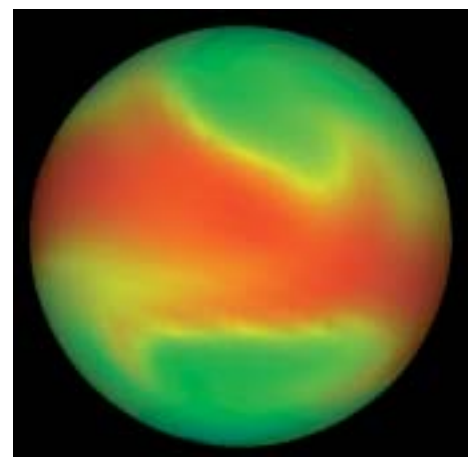
Ein wichtiges Problem beim Betrieb eines Grids ist die Zuteilung von Ressourcen zu den Aufträgen der Nutzer. SCAI hat ein Meta-Schedulingssystem entwickelt, welches diese Aufgaben sowohl für Batchjobs als auch für interaktive Nutzungen übernimmt. Mit ihm wird eine sogenannte Co-Allokation ermöglicht, also die zeitgleiche Bereitstellung von Ressourcen auf verschiedenen Rechnern, sowie Software zur Abrechnung des Ressourcenverbrauchs. Das Institut ist in verschiedenen internationalen Arbeitsgruppen an der Entwicklung von Standards für das Scheduling beteiligt.

Visualisierung und VR-Demozentrum

Anwendungen der numerischen Simulation und Optimierung führen auf Datenmengen, zu deren Auswertung eine visuelle Aufbereitung erforderlich ist. Die Gestaltung der Benutzerschnittstellen, die Visualisierung von Ergebnisdaten und die visuelle Führung von Simulationsprozessen sind bei zunehmend komplexer werdenden Anwendungen entscheidende Aspekte für die Akzeptanz durch die Nutzer.

Für vier der im Institut entwickelten Softwarewerkzeuge wurden graphische Schnittstellen entwickelt:

- DIFF-CRASH: Das SCAI-Werkzeug zur Untersuchung der Stabilität von Crash-Simulationen wurde um eine graphische Benutzerschnittstelle erweitert. Diese erlaubt eine Parametrisierung der in dem Werkzeug verwendeten statistischen Verfahren.



Temperaturverteilung auf der Erdoberfläche

- DESPARO: Das Optimierungsverfahren für die Parameteroptimierung wurde für ein Projekt zur Simulation von Tiefziehprozessen bei Blechen um eine graphische Schnittstelle erweitert. Sie erlaubt eine einfache Auswahl der Parameter und die Festlegung ihrer relativen Gewichtungen. Die Berechnungsergebnisse werden zusammen mit den kritischen physikalischen Größen graphisch dargestellt.
- MpCCI-Visualisierer: Für die SCAI-Kopplungsbibliothek MpCCI wurde der Prototyp eines Visualisierungswerkzeuges entwickelt, mit dem die physikalischen Vorgänge einer gekoppelten Simulation verfolgt werden können. Der MpCCI-Visualisierer wird in 2002 als weiteres Produkt der MpCCI-Familie herausgegeben.

Neben den Analysemöglichkeiten unmittelbar am Arbeitsplatz, gewinnen im industriellen Einsatz auch Virtual Reality Techniken an Bedeutung. Die Eigenschaften der 3D-Stereo Darstellung und die besonderen interaktiven Möglichkeiten dieser Techniken erlauben in vielen Bereichen der Simulation eine qualitativ bessere und schnellere Analyse. Virtuelle Techniken erweisen sich zudem besonders nützlich als integrierte Entwicklungsumgebungen für Ingenieure.

Im Projektbereich wird das VR-Demonstrationszentrum des Instituts aufgebaut. Derzeit wird eine 2-Seiten Workbench eingesetzt, eine Entwicklung der GMD mit der Firma TAN. Die Rückprojektion zweier Videosignale auf die in L-Form positionierten Projektionsflächen erlaubt die Darstellung dreidimensionaler Szenen in einem Bereich von etwa zwei mal einem Meter. Sie wird mit Hilfe von Shutter-Brillen betrachtet.

Lichtgriffel und die vom Fraunhofer Institut für Medienkommunikation (IMK) entwickelte Cubic Mouse werden als Interaktionsgeräte eingesetzt. Ein Trackingsystem erlaubt die Echtzeitberechnung des Bildes für die Betrachterposition.

In Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer-Institut IMK wurden VR-Demonstratoren für Anwendungen aus der Automobilentwicklung erstellt: Luftströmung und Wärmeverteilung im Innenraum eines Kraftfahrzeugs und der Crashtests. Unsere Implementierungen verwenden die IMK-Software Avango.



SCAI-2-Seiten Workbench



Kontakt:
 Ottmar Krämer-Fuhrmann
 Tel.: +49 (0) 2241 14 - 2202
 E-Mail: ottmar.kraemer-fuhrmann@scai.fhg.de



Thomas Lengauer

Die Arbeiten der Abteilung gliedern sich in die drei Themenfelder Bioinformatik, Computational Chemistry und Diskrete Optimierung. In allen Themenfeldern ist es das Ziel, eine durchgängige Forschungskette von der Grundlagenforschung zur Anwendung zu realisieren. Dabei sind die Arbeiten in der Computational Chemistry hauptsächlich grundlagen- und im Bereich Diskrete Optimierung hauptsächlich anwendungsorientiert. In der Bioinformatik sind beide Aspekte etwa gleichwertig vertreten.

Die Bioinformatik bildet den Schwerpunkt in der Abteilung; sie ist auf pharmazeutische Anwendungen ausgerichtet. Die Suche nach Zielproteinen für den Wirkstoffentwurf sowie die Suche nach Wirkstoffen stehen im Vordergrund (Arbeitsbereiche *Proteine: Sequenz, Struktur, Funktion und Rechnergestützter Wirkstoffentwurf*). Bioinformatische Methodiken, die zur Findung von Zielproteinen benötigt werden und deshalb in der Abteilung weiterentwickelt werden, umfassen die Analyse und den Vergleich von biomolekularen Sequenzen sowie die Modellierung von dreidimensionalen Strukturen der Kandidatenproteine. Ein wesentlicher Schwerpunkt der Arbeiten in den letzten Jahren war die Analyse von Genexpressionsdaten vor dem Hintergrund konkreter Krankheitssyndrome (entzündliche Darmerkrankungen, Osteoarthritis).

Der *Rechnergestützte Wirkstoffentwurf* wird mit Methoden des molekularen Docking und des Strukturvergleichs von Wirkstoffmolekülen unterstützt. Hier wurde in den letzten Jahren die Grundlage für das Durchmusteren großer Wirkstoffdatenbanken wesentlich erweitert. Ferner wird an der Entwicklung einer Methodik zur Analyse von HTS (High Throughput Screening) Daten gearbeitet.

Schließlich nahm die Abteilung Arbeiten über *Bioinformatische Methoden zur Therapieoptimierung* auf. Konkretes Anwendungsszenario hierfür ist die Auswahl von Wirkstoffkombinationen zur Therapie von AIDS. Um hier Hilfestellung zu leisten, werden statistische Lernmethoden entwickelt, die Korrelationen zwischen der Wirkstoffkombination und sich entwickelnden resistenten Virenstämmen aufdecken.

Im Arbeitsbereich *Computational Chemistry* wird im Rahmen eines Sonderforschungsbereichs der DFG an der Modellierung von dreidimensionalen Strukturen amorpher Festkörper gearbeitet. Es wird ferner ein Programm zur Vorhersage von Kristallstrukturen organischer Moleküle entwickelt. Arbeiten zur Modellierung intermolekularer Wechselwirkungen in organischen Wirt-Gast Komplexen wurden vorbereitet.

Im Arbeitsbereich *Diskrete Optimierung* wurden seit vielen Jahren erfolgreich bearbeiteten Thematiken fortgeführt:

- Berechnungen optimierter Schnittbilder für die Textil und Lederindustrie
- Optimierung dreidimensionaler Anordnungen von Bauteilen in der Fahrzeugindustrie.

In einem Industrieprojekt wird als weitere neue Anwendung der Zuschnitt von Blechteilen für Karosserien behandelt.

Die Abteilung wurde bis 30. September 2001 von Prof. Dr. Thomas Lengauer geleitet. Prof. Lengauer ist seit 1. Oktober Direktor am Max Planck - Institut für Informatik in Saarbrücken.

Kontakt:

Prof. Dr. Thomas Lengauer, PhD
seit 1. Oktober 2001
MPI für Informatik
Tel.: +49 (0) 681 9325 - 300
E-Mail: lengauer@mpi-sb.mpg.de

Dr. Johannes Linden (komm., seit 1.1.02)
Fraunhofer SCAI
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 3481
E-Mail: linden@scai.fhg.de

Dr. Ralf Heckmann (stv., seit 1.1.02)
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 2810
E-Mail: heckmann@scai.fhg.de

Das Wissen über die verschiedensten Aspekte der molekularen Maschinerie, die die biologischen Prozessen in Zellen und Organismen steuert, wächst mit großer Geschwindigkeit. Die zentrale Frage, die der bioinformatischen Forschung in SCAI zugrunde liegt, ist, wie dieses Wissen für Diagnose und Therapie von Krankheiten genutzt werden kann. Im Arbeitsbereich *Proteine: Sequenz, Struktur, Funktion* arbeiten wir an Methoden zur Identifizierung und Analyse von Kandidatengenomen für Krankheiten und von Zielproteinen für pharmazeutische Wirkstoffe. Dazu werden Methoden zur Sequenzanalyse, zur homologiebasierten 3D-Struktur- und Funktionsvorhersage von Proteinen und zur Nutzung von Expressionsprofilen sowie metabolischen und regulatorischen Netzwerken entwickelt und zusammen mit Partnern aus der Pharmaindustrie eingesetzt.

Die aktuellen Projekte befassen sich mit der Struktur- und Funktionsvorhersage großer Mengen von Proteinen (z.B. Proteine ganzer mikrobieller Genome oder aus Screeningexperimenten) und mit der Analyse von Genomdaten und von Expressionsmessungen mittels Microarrays, DNA- und Proteom-Chips. Aus dem Vergleich von Messungen von Proben von gesundem und krankem Gewebe oder Zellkulturen können Hinweise auf für die Krankheit wichtige zelluläre Faktoren berechnet werden. Diese Faktoren werden in Netzwerkmodellen lokalisiert und mittels bioinformatischer Methoden hinsichtlich Funktion und Struktur charakterisiert.

BEX - Bioinformatikmethoden für die Expressionsanalyse

In einer Kooperation mit der Aventis Pharma GmbH, Frankfurt, werden Verfahren zur Analyse von Expressionsdaten mittels statistischer Methoden und Modellen biochemischer Netzwerke entwickelt. Molekulare Hypothesen über metabolische und regulatorische Beziehungen (Pathways, Signalkaskaden) werden aus diversen Datenquellen extrahiert und mittels Petrinetzen in einheitlicher Form modelliert. Die Netzwerkhypothesen werden zur statistischen Bewertung von DNA Chip Messungen aus verschiedenen Indikationsgebieten bei Aventis verwendet. Ziel des Projekts ist einerseits die Entwicklung neuer Methoden und andererseits die Anwendung dieser Methoden auf vorliegende Chipdaten und die Entwicklung von Projekt-, Krankheits-, Gewebe-, Gen- bzw. Protein-spezifischen Netzwerken.

Die Analyse von Expressionsdaten in großem Stil mit dem Ziel der Identifizierung pharmazeutischer Zielproteine ist ein wissenschaftlich wie auch kommerziell hochkompetitives Arbeitsgebiet. Durch die Kooperation von Aventis mit SCAI und der LMU München können neue Verfahren direkt auf große und industriell relevante Datenmengen angewendet werden.

Im Institut wurden mehrere Verfahren entwickelt, die biologisches Wissen und Hypothesen, repräsentiert in Form von metabolischen und regulatorischen Netzwerken mittels Petrinetzen, mit Expressionsmessdaten kombinieren um relevante Pathways zu identifizieren: Abb. 1 illustriert das von SCAI patentierte Verfahren, das aus Netzwerken systematisch generierte, relevante Pathways anhand der gemessenen Expressionsdaten statistisch bewertet, um krankheitsrelevante Proteine, Stoffwechselwege und Signalkaskaden zu identifizieren. Die Co-Generierung statistisch signifikanter Pathways zeigt Abb. 2, bei der Expressionsdaten (gesund vs. krank) auf ein Transpath Netzwerk für die Krankheit projiziert wurden. Die Größe der (grünen) Knoten für die Gene entspricht der Signifikanz des Gens bezüglich der differentiellen Expression (gemessen mittels DNA-Chips). Ein weiteres Verfahren zum Co-Clustering von Netzwerken/Expressionsdaten wurde gerade publiziert.

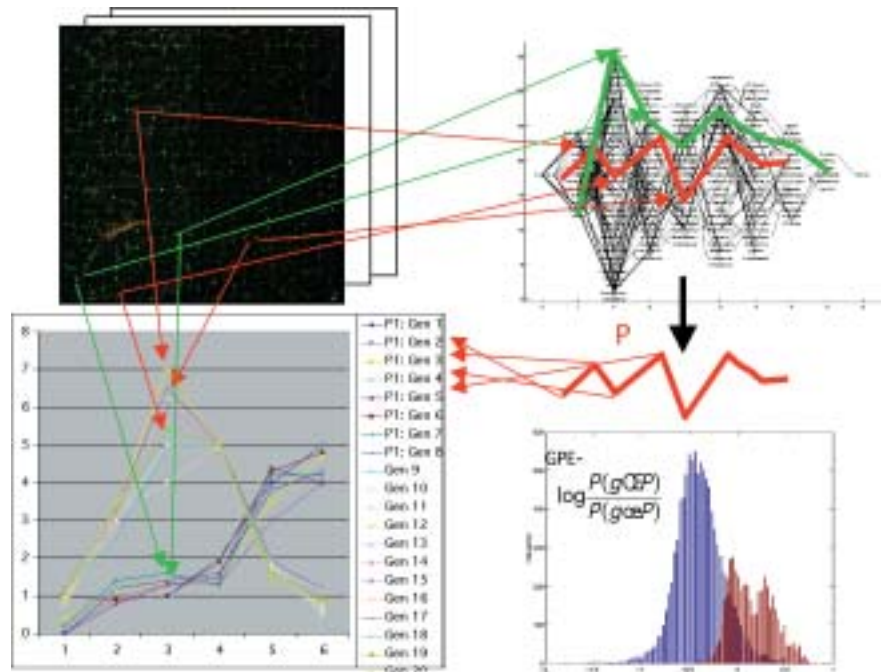


Abb. 1: Verfahren zum Pathwayscoring

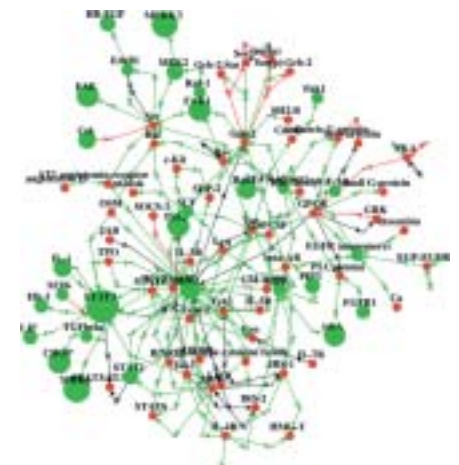


Abb. 2: Cluster von Genen mit statistisch signifikant unterschiedlicher Expression.

Partner:

Aventis Pharma GmbH, Frankfurt
 Max Delbrück Centrum, Berlin
 EMBL, Heidelberg
 Merck KGaA, Darmstadt

Kontakt:

Prof. Dr. Ralf Zimmer
 LMU München und SCAI,
 Tel.: +49 (0) 89 2180 4052 (LMU)
 +49 (0) 2241 14 - 2818 (SCAI)
 E-Mail: ralf.zimmer@scai.fhg.de
 zimmer@bio.informatik.uni-muenchen.de

TargId- Methoden zum Auffinden von Ziel- proteinen in Genomdaten

Das Ziel des BMBF- Verbundprojekts TargId war es, Bioinformatikerunterstützung für das Auffinden von Zielproteinen für die Diagnose und Therapie von Krankheiten, insbesondere für den Entwurf von neuen Medikamenten, zu liefern. Dabei stellten die Forschungspartner SCAI und MDC/EMBL die Methoden und Software zur Sequenzanalyse und zur Proteinstruktur- und Funktionsvorhersage Verfügung. Die Industriepartner Aventis und Merck lieferten Daten, halfen bei der Problemdefinition und validierten die entstehende Software. Dabei konzentrierte sich die Firma Merck mehr auf Massenscreening von EST Daten während Aventis an der Interpretation von Sequenzdaten aus Expressionsexperimenten und an Einzelanalysen der Struktur und Funktion bestimmter krankheitsrelevanter Proteine interessiert ist.

Partner:

Aventis Pharma GmbH, Frankfurt
Max Delbrück Centrum, Berlin
EMBL, Heidelberg
Merck KGaA, Darmstadt

Kontakt:

Prof. Dr. Ralf Zimmer
LMU München und SCAI,
Tel.: +49 (0) 89 2180 4052 (LMU)
+49 (0) 2241 14 - 2818 (SCAI)
E-Mail: ralf.zimmer@scai.fhg.de
zimmer@bio.informatik.uni-muenchen.de

Die Suche nach Zielproteinen umfasst viele Arten von experimentellen Daten und beinhaltet eine Vielzahl denkbarer Bioinformatik -Analysen und Verknüpfungen dieser Daten. Die Arbeit im Projekt zielte konkret auf vier Bereiche:

1. Einsatz von Analyse- und Vorhersageverfahren (Threading) für Proteinstrukturen für die Zielproteinsuche: Das umfasst die Erweiterung der Strukturvorhersagewerkzeuge auf die breitflächige Vorhersage von Struktur- und Funktionsklassen von Proteinen, die vollständig sequenzierten Genomen oder auch Datenbanken von (ggf. geclusterten) ESTs entnommen werden oder aus DNA Chip-Experimenten abgeleitet werden. Mit diesen Verfahren wurden mehrere vollständig sequenzierte bakterielle Genome systematisch analysiert und annotiert. Die Ergebnisse wurden mit den Industriepartnern (Merck) analysiert und auf dem WWW zur Verfügung gestellt.



2. Entwicklung von Verfahren zur Analyse von EST Daten: Das beinhaltet zum einen die Erweiterung der Strukturvorhersagemethoden auf EST Sequenzen (EST123D) und zur Annotation von gewebespezifischen EST Libraries bzw. deren differenziellen Vergleichsmengen. Die Annotationsverfahren wurden auf proprietäre Daten der Firma Incyte (Aventis) und Merck (HGS) sowie interessante Targetproteine aus Differential Display Experimenten bei Aventis angewendet.

3. Interpretation von DNA-Chip und Genexpressionsdaten: Dazu wurden öffentlich zugängliche Datensätze bearbeitet und neue statistische Methoden zu ihrer Auswertung entwickelt.

4. Modellierung biochemischer Netzwerke: Es zeichnete sich ab, dass die Einbeziehung möglichst großer und gut modellierter biologischer Kontexte für viele Aspekte der Targetidentifizierung wichtig wird. In der ersten Projekthälfte wurden frei verfügbare metabolische Datenbanken vereinigt und Methoden entwickelt, die aus ihnen metabolische Netzwerke extrahieren, die für bestimmte Fragestellungen wichtige Randbedingungen erfüllen. Auch für die Simulation der Kinetik metabolischer Netzwerke mittlerer Größe (bis zu zwei Dutzend Substrate) wurden auf der Basis von Petrinetzen Methoden geschaffen. Diese Arbeiten wurden auf regulatorische Netzwerke ausgedehnt. Dazu wurden Textanalyseverfahren etabliert, die PubMed Textabstrakte nach Proteinen, Genen und ihren Wechselbeziehungen durchsuchen und systematisch Netzwerkkanten bzw. Teilnetze aus ihnen extrahieren.

Die im Projekt entstandene Software ToPLign (Toolbox for Protein Alignment) wird inklusive der Threadingmethoden 123D und RDP über die spin-off Firma BioSolveIT GmbH, Sankt Augustin, vermarktet.

Die in TargId und BEX entwickelten Verfahren werden in den Projekten BOA und ProBio weiterentwickelt und auf spezifische Problemstellungen angewendet:

- BOA (Bioinformatikverfahren für die Osteoarthroseforschung) ist eine Kooperation mit Aventis, Biotech-Unternehmen und klinischen Partnern im Rahmen des Leitprojekts «Diagnose und Therapie der Osteoarthrose mit den Mitteln der molekularen Medizin».

- In ProBio wird mit der Stiftung caesar in Bonn und weiteren Partnern ein neuartiger Proteomchip und zugehörige Analyseverfahren entwickelt und für zwei exemplarische Indikationsgebiete (Blutgerinnung und AIDS) eingesetzt.

Rechnergestützte Wirkstoffentwurf

Der Arbeitsbereich *Rechnergestützte Wirkstoffentwurf* befasst sich mit der Entwicklung von neuen Methoden und Algorithmen für Probleme im Bereich des Entwurfs neuer biologisch aktiver Moleküle. Anwendung finden die entwickelten Verfahren schwerpunktmäßig in der pharmazeutischen Forschung, weitere Anwendungsgebiete sind die Entwicklung neuer Substanzen für den Pflanzenschutz sowie für biotechnologische Prozesse im allgemeinen.

Die Forschungstätigkeit umfasst die zwei Bereiche Modellierung und Algorithmenentwicklung, die in allen durchgeführten Projekten eng miteinander verzahnt sind. In der Modellierung werden Probleme des Wirkstoffentwurfs auf ihre Lösbarkeit mit dem Computer analysiert und geeignete Modelle entwickelt, die eine möglichst genaue Beschreibung auf der einen und eine effiziente Lösung des Problems auf der anderen Seite ermöglichen. In der Algorithmenentwicklung werden bekannte Verfahren aus verschiedenen Bereichen der Informatik wie der kombinatorischen und numerischen Optimierung, der Graphalgorithmen, der algorithmischen Geometrie und der Mustererkennung für das Anwendungsproblem adaptiert und miteinander kombiniert. In vielen Fällen werden spezifische Optimierungsverfahren für das Anwendungsproblem entwickelt.

LEADID - Computergestützte Analyse von Hochdurchsatz-Screening (HTS) Daten im Wirkstoffentwurf

Seit Mitte der neunziger Jahre wird das Hochdurchsatz-Screening (HTS) zur Identifikation neuer Leitstrukturen in der pharmazeutischen Forschung eingesetzt. Mit Hilfe von Roboteranlagen ist man in der Lage, mehrere 10.000 Verbindungen auf ihre Aktivität gegenüber einem Zielprotein zu testen. Verbindungen, die sich beim HTS als aktiv erwiesen haben, liefern erste Informationen über strukturelle Eigenschaften und mögliche Komponenten von Leitstrukturen. Ein HTS Experiment ist allerdings mit einer Reihe von Fehlerquellen behaftet, die typischerweise zu stark verrauschten Messergebnissen führen.

Ziel des Projektes LeadID ist die Entwicklung von Software zur Unterstützung von Wissenschaftlern bei der Analyse von HTS Daten. Auf der Basis einer neuen, in SCAI entwickelten Deskriptortechnologie (Feature Trees) werden strukturelle Ähnlichkeiten zwischen Molekülen beschrieben. Kombiniert mit speziell dafür entwickelten Matching-Algorithmen können so nicht nur Molekülpaare sondern mehrere Moleküle gleichzeitig auf ähnliche räumliche und chemische Eigenschaften untersucht werden. Der Feature Tree dient als Grundlage zur Analyse von HTS Daten mit klassischen Data-Mining Methoden. Auf diese Weise können aktive Verbindungen gruppiert werden, Prognosen für Messfehler erstellt und sinnvolle Vorschläge für einen zweiten, genaueren Messvorgang (Secondary Screen) gemacht werden.

Partner:

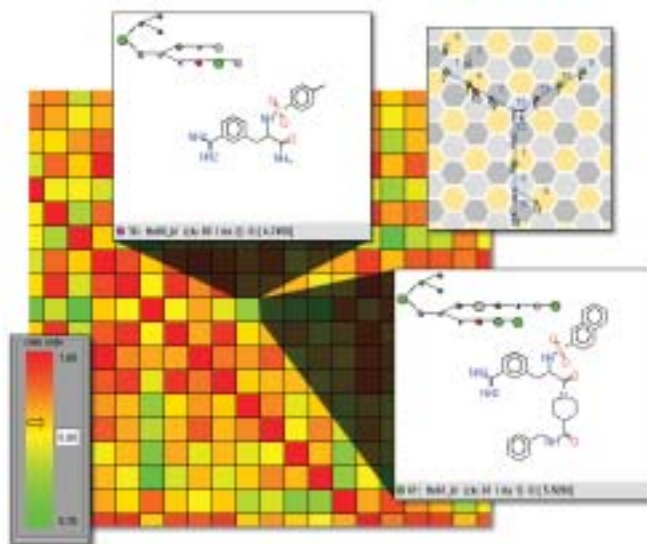
Aventis Pharma GmbH, Frankfurt

Kontakt:

Dr. Matthias Rarey
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 2476
E-Mail: rarey@scai.fhg.de

Computergestützte HTS-Datenanalyse. Ausschnitt aus einer farbcodierten Distanzmatrix, jeder Eintrag steht für ein Paar von aktiven Molekülen.

Mit Hilfe der Software lassen sich Moleküle nach ihrem Bindungsverhalten klassifizieren und gemeinsame, für die Bindung relevante, Komponenten identifizieren.



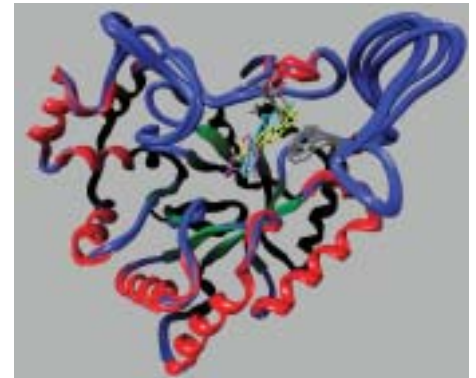
RELIMO - Neue Methoden für das strukturbasierte Wirkstoffdesign

Aufgrund der Fortschritte bei der experimentellen als auch homologiebasierten Aufklärung von Proteinstrukturen, stehen in vielen pharmazeutischen Forschungsprojekten räumliche Strukturdaten des Zielproteins zur Verfügung. Um diese Information bei der Entwicklung neuer Wirkstoffe sinnvoll zu nutzen, muss das Protein-Ligand-Docking-Problem - die Vorhersage von Molekülkomplexen zwischen einem Protein und einem potentiellen Wirkstoffmolekül - gelöst werden. In SCAI wird für dieses Problem seit 1993 die Docking-Software FlexX entwickelt, die zu den weit verbreitetsten Programmen für dieses Anwendungsproblem gehört. FlexX ist in der Lage, energetisch günstige Komplexvorschläge unter Berücksichtigung der Flexibilität des Wirkstoffmoleküls in nur wenigen Minuten zu generieren. Im Projekt RELIMO befassen wir uns mit der Weiterentwicklung der Algorithmen in FlexX für neuartige Problemstellungen im Umfeld des Protein-Ligand Docking:

- Durch die kombinatorische Chemie ist man seit wenigen Jahren in der Lage, große Molekülbibliotheken mit einer spezifischen Synthese aus einer kleinen Menge von Fragmenten zu konstruieren. Durch die Verwendung

gleicher Fragmente weisen die Moleküle lokale Ähnlichkeiten auf. FlexX-C ist eine algorithmische Erweiterung des Docking-Verfahrens in FlexX, dass die Struktur von kombinatorischen Molekülbibliotheken explizit ausnutzt. Je nach Struktur der Bibliothek kann auf diese Weise eine Laufzeitreduzierung um einen Faktor 20-50 erzielt werden.

- Proteine weisen genau wie die meisten Biomoleküle eine interne Flexibilität auf, die jedoch in zeiteffizienten Dockingverfahren bisher nicht berücksichtigt wurde. Im RELIMO-Projekt haben wir auf der Basis von FlexX einen neuen zeiteffizienten Docking-Algorithmus FlexE entwickelt, der Proteinflexibilität berücksichtigen kann. Der Algorithmus verwendet als Eingabe ein Ensemble von Proteinstrukturen, wie sie z.B. aus der homologiebasierten Strukturvorhersage oder auch aus NMR-Experimenten hervorgeht. FlexE ist in der Lage, je nach Wirkstoffmolekül die für die Komplexbildung am besten geeigneten Strukturelemente aus dem Ensemble auszuwählen und neu zu kombinieren. Mit Vorhersagezeiten im Minutenbereich eignet sich FlexE auch zum virtuellen Screening von Molekülbibliotheken mittlerer Größe unter Berücksichtigung von Proteinflexibilität.



Rückgratverlauf des Proteins Aldose-Reduktase, ein Zielprotein bei der Entwicklung neuer Therapien gegen Diabetes, in verschiedenen Konformationen.

Bekannte Wirkstoffe im Komplex mit dem Protein sind in gelb, violett und türkis dargestellt.

Partner:

Merck Pharmaforschung KGAA, Darmstadt; Boehringer Ingelheim Pharma KG, Biberach; FhI-IPSI, Darmstadt, Universität Marburg

Kontakt:

Dr. Matthias Rarey
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 2476
E-Mail: rarey@scai.fhg.de

Bioinformatische Methoden zur Therapieoptimierung

Durch die Analyse der Genome und Proteome, also der Gesamtheit des genetischen Materials und der Eiweiße (Proteine) einer Zelle, der Struktur-Funktionsbeziehungen von Molekülen, der Interaktion von Zellen und Organismen, der Aufstellung evolutionärer Stammbäume und der Durchleuchtung populationsgenetischer Zusammenhänge führt die Bioinformatik zu Softwaresystemen, die unter anderem bei der auf molekularbiologischem Wissen basierenden Diagnose und Therapie von Krankheiten sowie beim Medikamentenentwurf eingesetzt werden.

Im Fall von Infektionskrankheiten sind dabei komplizierte Zusammenhänge zwischen dem (menschlichen) Wirtorganismus und den Krankheitserregern (z.B. Viren oder Bakterien) zu berücksichtigen. Ursache eines Therapieversagens ist deshalb häufig ein Zusammenspiel verschiedener Mechanismen sowohl auf der Seite des Immunsystems als auch auf der Seite des Erregers. In einer interdisziplinären Zusammenarbeit zwischen Klinikern, Virologen und Bioinformatikern (SCAI, Max-Planck-Institut für Informatik Saarbrücken, Universität Köln, caesar Bonn, Universität Erlangen) werden Methoden zur Optimierung von Therapien gegen Infektionen mit dem humanen Immunschwäche-Virus (HIV) entwickelt. Auf der Grundlage von in einer Datenbank gesammelten Informationen werden Mutationen im viralen Genom bezüglich ihrer Bedeutung für die Medikamentenresistenz bewertet. Die Analyse der Daten erfolgt mit Methoden des maschinellen Lernens. Solche Verfahren überprüfen nicht nur die statistische Relevanz von einzelnen Bewertungsmodellen, sondern durchsuchen den Raum aller möglichen Modelle in effizienter Weise.

AREVIR - Analyse von Therapieresistenzen bei HIV Infektion

Eine wesentliche Ursache des Therapieversagens bei HIV-Infizierten ist die Fähigkeit des Virus, Resistenzen gegenüber antiretroviralen Wirkstoffen zu entwickeln. Die Resistenz von HIV gegen Medikamente kann experimentell durch genotypische und phänotypische Tests bestimmt werden. Der Vorteil der geringeren Kosten und kürzeren Laborzeiten von genotypischen Resistenzbestimmungen wird durch die Schwierigkeit der Interpretation viraler Sequenzinformationen eingeschränkt. Identifizierte Mutationen sind nicht unmittelbar in Resistenzdaten umsetzbar; in vielen Fällen ist ihre Bedeutung noch unklar.

Abbildung 1 zeigt ein Strukturmodell eines viralen Enzyms (Dimer der Protease) und zweier Moleküle eines Inhibitors als graues Vollkugelmodell (Saquinavir). Das Rückgrat der beiden Ketten ist in violett und ocker dargestellt. Das aktive Zentrum (Asparaginsäure) ist in gelben Vollkugeln angegeben. Die anderen als Vollkugeln dargestellten Aminosäuren des Wildtyps entsprechen Mutationen, die zum Teil weit vom aktiven Zentrum entfernt sind.

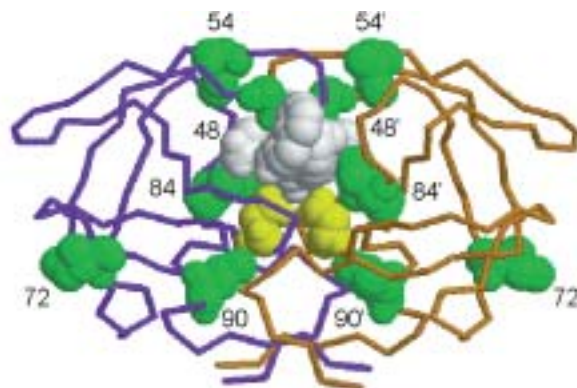


Abb. 1: Strukturmodell eines viralen Enzyms mit Inhibitor

Der Schwerpunkt unserer bioinformatischen Untersuchungen im Projekt des AREVIR liegt in der Interpretation von viralen Sequenzdaten aus genotypischen Tests. Ziel unserer Analysen ist die effektive Nutzung der Information, die ein solcher Test liefert, um eine möglichst genaue Vorhersage über den Erfolg einer neuen Therapie zu ermöglichen. Um die Qualität und Vollständigkeit der Daten systematisch überprüfen zu können, wurde eine relationale Datenbank zusammen mit einem entsprechenden Interface entwickelt. Alle Kooperationspartner haben Zugriff auf die Datenbank über eine sichere Internetverbindung. Diese Client-Server-Architektur erlaubt es, die Daten am Ort ihrer Entstehung einzugeben (z.B. in einem virologischen Labor). In einer ersten Analyse konnten aus unserer Datenbank Korrelationen zwischen Mutationen in den HIV-1-Enzymen reverse Transkriptase und Protease und phänotypischer Medikamentenresistenz abgeleitet werden.

Entscheidungsbaumverfahren wurden angewandt, um aus einem Datensatz aus 470 klinischen Proben Mutationsmuster zu extrahieren, die charakteristisch für Resistenz oder Empfindlichkeit sind. Die Vorhersagekraft der so gewonnenen Modelle für unbekannte Sequenzen wurde statistisch geprüft.

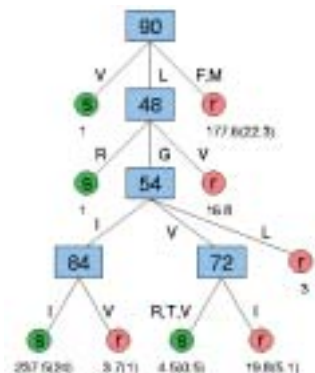


Abb. 2: Entscheidungsbaummodell

Abbildung 2 zeigt ein aus 470 Trainingsdaten abgeleitetes Entscheidungsbaummodell zur Unterscheidung von Resistenz (r-Endknoten) und Empfindlichkeit (s-Endknoten) bei Saquinavir. Die blau markierten inneren Knoten bezeichnen die Sequenzpositionen, die für die Klassifikation berücksichtigt werden. Die den Endknoten zugeordneten Zahlen bezeichnen die Anzahl der klassifizierten Sequenzen (und die Anzahl der geschätzten Fehlklassifizierungen darunter).

Das entwickelte System ist über das Internet frei verfügbar (<http://cartan.gmd.de/geno2pheno>).

Partner

Universität Köln, Institut für Virologie
Stiftung Caesar, Bonn

Das Projekt wird aufgrund des Wechsels des Projektleiters am Max Planck - Institut für molekulare Pflanzenphysiologie weitergeführt:

Kontakt:

Dr. Joachim Selbig

seit 1. Februar 2002
MPI für molekulare Pflanzenphysiologie
Am Mühlenberg 1
14476 Golm
Tel.: +49 (0)331 567-8208
E-Mail: selbig@mpimp-golm.mpg.de

Die Aufklärung von molekularen Strukturen ist ein Schlüssel zum Verständnis von Eigenschaften vieler Materialien, chemischer Substanzen und von Biomolekülen. Sie ist daher ein wichtiges Forschungsziel in Chemie, Biochemie und der molekularen Biologie. In der molekularen Struktur spiegelt sich das Bindungsnetzwerk der Substanz und vor allem auch die Anordnung der Atome im Raum wider.

Im Arbeitsbereich Computational Methods in Chemistry entwickeln wir Methoden für die Modellierung und Analyse von molekularen Strukturen. Wir behandeln dabei sowohl anorganische, organische als auch biochemische Substanzen. Methodisch beruht unser Ansatz auf diskreten und numerischen Modellierungsverfahren. Diskrete Methoden erlauben ein effizientes Durchsuchen des Raumes der strukturellen Alternativen; numerische Methoden werden für die Optimierung von Strukturmodellen eingesetzt. Für die Berechnungen setzen wir Workstations und Workstation-Cluster ein.

Makon - Modellierung von amorphen kovalenten Netzwerken

Keramiken der Zusammensetzung $\text{Si}_w\text{B}_x\text{N}_y\text{C}_z$ sind neuartige hochtemperaturstabile amorphe Werkstoffe, die als Fasern oder Beschichtungen in Verbundmaterialien zum Einsatz kommen. Experimentell werden sie durch kovalente Vernetzung von molekularen Vorläufern und Pyrolyse der entstehenden Polymere synthetisiert. Bedingt durch das Fehlen von Translationssymmetrie (Amorphie) ist die Bestimmung von Strukturmerkmalen allein aus Experimenten schwierig und bedarf der Unterstützung durch Computersimulation.

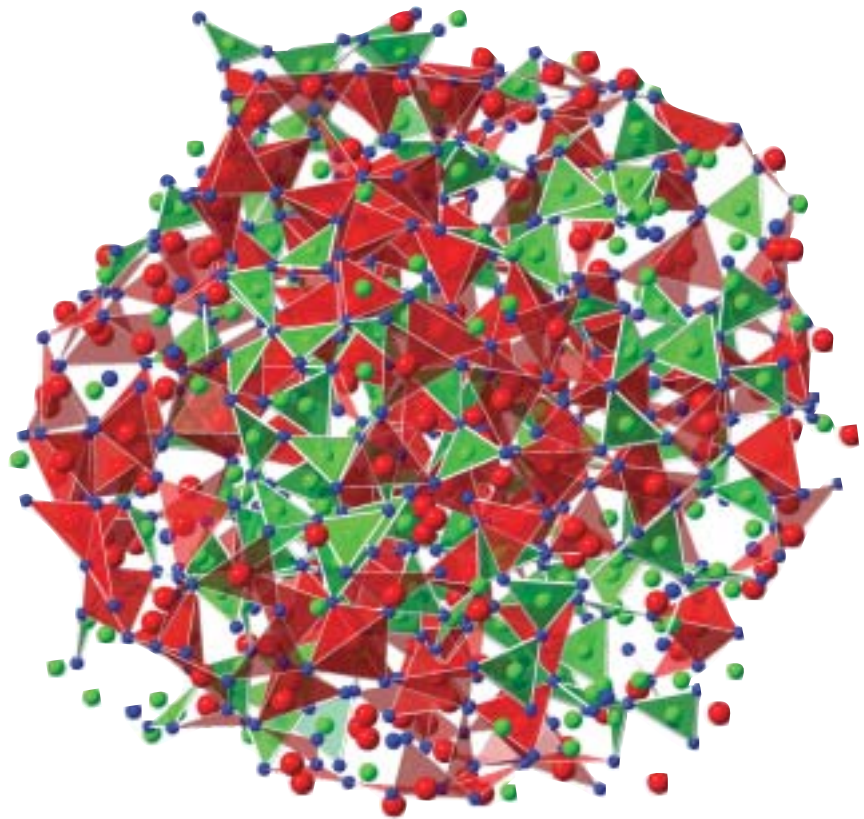
In diesem Projekt verfolgen wir drei Ansätze:

- Quantenchemische Untersuchung der Reaktionen molekularer Vorläufer
- Anpassung von Potenzialen für Molekulardynamik- und Monte Carlo-Simulationen
- Reverse Monte Carlo (RMC)-Optimierung von Strukturmodellen

Thermodynamische Daten (Reaktionswärmen, Barrierenhöhen) der Gasphasenreaktionen von [(Trichlorsilyl)amino]dichlorboran (TADB) und (Trichlorsilyl)(dichlorboryl)ethan (TSDE) mit Ammoniak bzw. Methylamin und ihrer Folgeprodukte wurden durch Lösen einer genäherten stationären Schrödingergleichung (HF/MP2) berechnet. Es zeigt sich, dass die primäre Verknüpfung der Moleküle durch B-N-B-Brücken erfolgt. Die Kinetik der Reaktion von Bortrichlorid mit flüssigem Ammoniak und der Einfluss des Lösungsmittels auf den Reaktionsverlauf konnte mit Car-Parrinello-MD (CPMD)-Simulationen aufgeklärt werden.

Empirische Energiefunktionen für Bor-nitride, Siliciumnitride und Borosilazane wurden durch Minimierung gewichteter Fehlerquadrate an experimentelle und quantenchemisch berechnete Molekül- und Kristalldaten erhalten. Simulated Annealing von $\text{Si}_w\text{B}_x\text{N}_y$ -Clustern, deren Ausgangsstruktur mit dem Continuous Random Network (CRN) Generator Tumbleweed erzeugt wurde, liefert Netzwerkmodelle mit radialen Verteilungsfunktionen, die in guter Übereinstimmung mit experimentellen Beugungsdaten stehen.

Die RMC-Optimierung von $\text{Si}_w\text{B}_x\text{N}_y$ -Strukturmodellen steckt noch in den Anfängen. Wir wollen zusätzlich zur Energie und den üblichen experimentellen Daten (Neutronen-, Röntgen- und Elektronenbeugung) auch NMR-Verschiebungen in die Kostenfunktion mit einbeziehen.



Clustermodell von amorphem $\text{Si}_3\text{B}_3\text{N}_7$



Partner:

Universität Bonn, SFB 408
MPI für Festkörperforschung, Stuttgart
Imperial College London

Kontakt:

Prof. Dr. Christel Marian
Fraunhofer SCAI und Universität Düsseldorf
Tel. +49 (0) 211-8113209
E-Mail: marian@scai.fhg.de

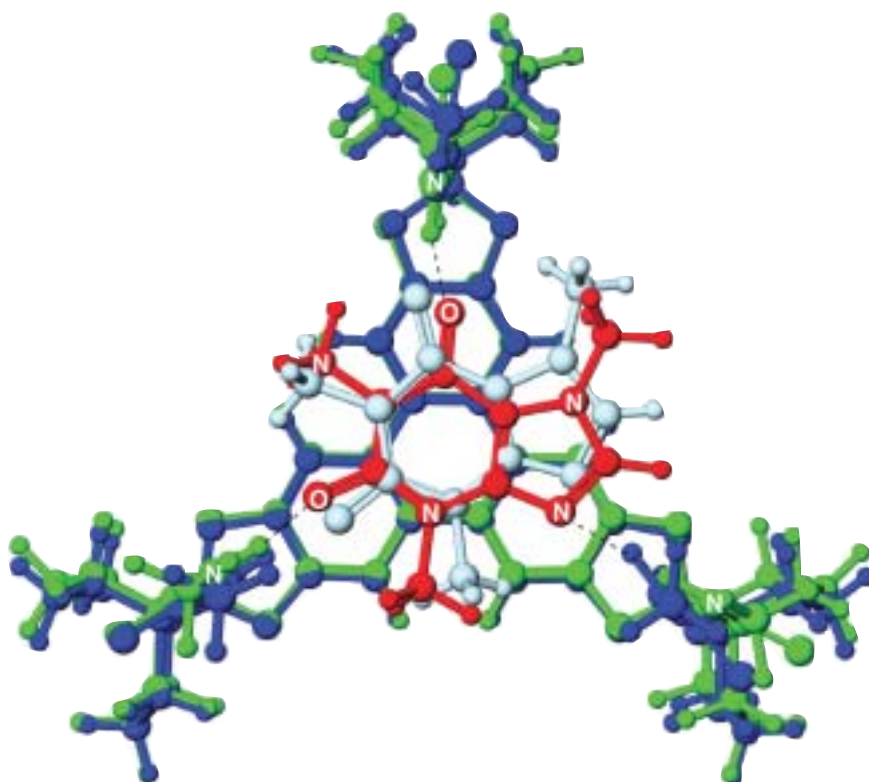
MRSOCI - Spinabhängige Phänomene in organischen Molekülen (MRSOCI)

Die photochemische Aktivität organischer Moleküle hängt entscheidend von der Effektivität spin-verbotener strahlungsloser Übergänge der elektronisch angeregten Zustände ab. Der niedrigste Triplettzustand (T1) dient dabei als (langlebiger) energiereicher Zwischenspeicher, aus dem heraus die eigentlichen photochemischen Prozesse ablaufen. Pharmakologisch interessante Beispiele sind Psoralene, die als Medikamente gegen Psoriasis und Hautkrebs eingesetzt werden. Ein Ziel des Projektes ist die Optimierung dieser photosensitiven Spezies dahingehend, dass sich nach Bestrahlung möglichst viele Moleküle im T1-Zustand aufhalten.

In diesem Projekt werden neue quantenchemische Methoden entwickelt, um Spin-Bahn-Kopplungsphänomene in organischen Molekülen effizient und mit hoher Genauigkeit zu berechnen. Die Programme bauen auf das bewährte Dichtefunktional-basierte Multireferenz-Konfigurationswechselwirkungsverfahren (DFT/MRCI) von Grimme und Waletzke zur Bestimmung des elektronischen Spektrums auf. Im ersten Schritt wurde die Möglichkeit geschaffen, für DFT/MRCI-

Wellenfunktionen Matrixelemente des effektiven Eielektronen-Spin-Bahn-mean field-Kopplungsoperators zu berechnen. Vergleichsrechnungen mit älteren, hochgenauen Methoden an kleinen Molekülen zeigen, dass das neu entwickelte Verfahren kaum eine Einbuße an Genauigkeit, aber ein Vielfaches an Effizienz mit sich bringt.

Im zweiten Schritt werden ein MRCI-Programm mit Spin-Bahn-Kopplung und Programme zur Bestimmung der Lebensdauer angeregter Triplettzustände erstellt, die die bisher notwendige Summation über Zwischenzustände vermeiden.



Coffein-Rezeptor von Waldvogel et al.: Docking-Resultat im Vergleich mit experimenteller Röntgenstruktur

Partner:

Universität Bonn,
Institut für Theoretische Chemie
Universität Münster,
Institut für Theoretische Organische Chemie

Kontakt:

Prof. Dr. Christel Marian
Fraunhofer SCAI und Universität Düsseldorf
Tel. +49 (0) 211 - 811 3209
E-Mail: marian@theochem.uni-düsseldorf.de

Im Arbeitsgebiet werden Lösungen für Optimierungsaufgaben in technischen und industriellen Anwendungen entwickelt. Die Aufgaben gehören typischerweise zur Klasse der NP-vollständigen Probleme, d.h. ein Verfahren zur optimalen, zeiteffizienten Lösung der Probleme ist nicht bekannt. Derartige Problemstellungen sind weit verbreitet und nahezu in jedem Anwendungsfeld und jeder Wirtschaftsbranche anzutreffen. Bekannte Beispiele hierfür sind die optimale Einsatzplanung von Ressourcen (Personal, Maschinen, Kapital), Minimierung von Transportkapazitäten (Wege, Transportmittel), Minimierung von Baugrößen (VLSI-Layout) oder Optimierung von Packdichten (Containerbeladung, Verschnittminimierung).

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. Unsere Aufgabe verstehen wir darin, in der Forschung gewonnene Methoden der Optimierung auf industrielle Problemstellungen anzuwenden und für die konkrete Anwendung weiterzuentwickeln.

Dabei werden die vom Anwender definierten Probleme in höchster Praxisreife mit allen vorgegebenen Randbedingungen untersucht und exakt angepasste Verfahren zu deren Lösung erarbeitet.

Durch die langjährige Erfahrung bei der Anwendung von klassischen Optimierungsmethoden auf unterschiedliche Aufgabenstellungen verfügen wir über ein vielschichtiges Wissen bezüglich Einsatzmöglichkeiten und Wirksamkeit der verschiedenen Verfahren. Die angewandten Methoden zeichnen sich durch eine große Bandbreite aus; ihre Auswahl ist abhängig von der konkreten Problemstellung. Wir verwenden exakte und heuristische Optimierungsmethoden (Branch and Bound/Cut/Price, Simulated Annealing, Sintflut, Threshold Accepting, Record-to-Record Travel, Genetische Algorithmen, Simulated Trading, Greedy, Tabu Search, Lineare Programmierung, usw.).

Ein besonderer Schwerpunkt der Arbeiten liegt derzeit in der Lösung von Verschnitt- und Packungsproblemen.

Schnittbilder in zwei Dimensionen

In unterschiedlichen Anwendungen haben wir Verfahren zur Schnittbilderstellung für zweidimensionale, polygonale Objekte neu- oder weiterentwickelt. Für die textilverarbeitende Industrie bieten wir ein System zur vollautomatischen Erstellung von Schnittbildern an. Anwendung findet diese Software bei der Herstellung von Bekleidung, Bezügen von Möbeln, Inneneinrichtung, Autoinnenausstattung, Airbags, Fallschirmen, Segeln und in vielen anderen Feldern, in denen Materialien geschnitten werden müssen, die einen gewissen «Richtungssinn» (z.B. Fadenlauf) besitzen. Eine andere Software wurde für die Erstellung von Schnittbildern auf qualitätsbehafteten Materialien, d.h. unter Berücksichtigung von Bereichen unterschiedlicher Qualität auf dem Schnittmaterial, entwickelt wie Leder oder Holz. Anwendungen sind hier gegeben bei der Herstellung von Ledersitzen, Bekleidung und Einrichtungsgegenständen.

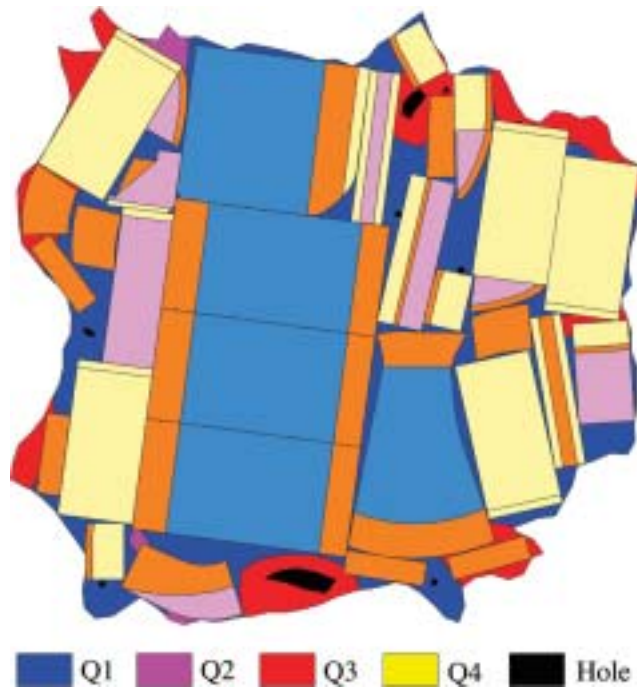
In unserem neuesten Projekt CoilNest entwerfen wir für die metallverarbeitende Industrie eine Lösung zur kostenoptimalen Anordnung von Teilen auf Blechbahnen unterschiedlicher Breite und Qualität. Hierbei sollen polygonal geformte, zweidimensionale Blechteile aus Blechbahnen begrenzter Breite und - virtuell - unendlicher Länge geschnitten werden. Die Blechteile sollen dabei miteinander verschachtelt werden. Die Breite der zu verwendenden Blechbahnen und die Zuordnung benötigter Teile zu einzelnen Blechbahnen können unter bestimmten Randbedingungen frei bestimmt werden. In der gegenwärtigen industriellen Praxis wird oftmals noch für jedes Blechteil zunächst ein rechteckiges Stück von der Blechbahn abgetrennt, das dann weiter zugeschnitten wird. Die Materi-

alkosten für die Fertigung eines Teils ergeben sich als Produkt des Materialbedarfs (Material für das Teil plus Verschnitt) und des Quadratmeterpreises, der außer von der Art des verwendeten Blechs von der Breite der Blechbahn abhängt. Diese Fertigungsweise verursacht unnötige Kosten durch Verschnitt sowie durch die Notwendigkeit, teurere Blechbahnbreiten zu verwenden. Bei dem betrachteten Problem ist für jedes Blechteil eine Liste von Materialien vorgegeben, aus denen es gefertigt werden darf. Unter Berücksichtigung dieser Listen werden die Teile verschiedenen Blechbahnen zugeordnet und auf diesen Bahnen verschachtelt. Dabei wird auch die Breite der Blechbahn optimiert.

Die unterschiedlichen Randbedingungen der konkreten Aufgabenstellungen erfordern eine problemspezifische algorithmische Herangehensweise. Bei der Verschachtelung von Teilen auf qualitätsbehafteten Materialien, bei denen sich die Schnittbilder auf Grund der Materialeigenschaften für jedes zuzuschneidende Stück des Rohmaterials unterscheiden, verwenden wir wegen enger Zeitrestriktionen schnelle, auf Mustererkennungstechniken basierende Greedy-Verfahren. Für die Erstellung von Schnittbildern in der textilverarbeitenden Industrie verwenden wir mehrfach iterierte, randomisierte Verfahren, kombiniert mit lokalen Suchverfahren.



Schnittbild für Röhre. Die unterschiedlichen Farben markieren die verschiedenen Teile.



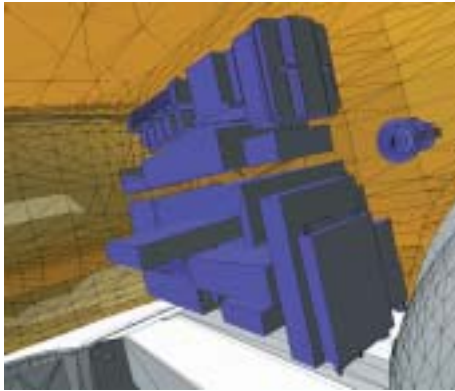
Schnittbild für eine Lederhaut. Die unterschiedlichen Farben markieren unterschiedliche Qualitäten auf der Lederhaut und Qualitätsanforderungen auf den Teilen.

Partner

Kämmerer Systemforschung, Bonn
Assyst GmbH, Kirchheim

Kontakt:

Dr. Ralf Heckmann
Tel. +49 (0) 2241 14 - 2810
E-Mail: ralf.heckmann@scai.fhg.de



Optimale Anordnung elektronischer Bauteile in einem Fahrzeug.

Dreidimensionalen Packungs-optimierung

Dreidimensionale Anordnungsprobleme treten in unterschiedlichen industriellen Anwendungsbereichen auf, bei denen der Wunsch nach möglichst guter Ausnutzung gegebener räumlicher Kapazitäten (z.B. Laderäume, Container, Transportboxen) und der damit verbundenen Einsparung von Kosten (z.B. Lagerkosten, Transportkosten) die Anforderung an die Packdichte von gegebenen Teilen (z.B. Maschinenteile, Stückgut) stetig erhöht. Auch auf Grund der zunehmenden Automatisierung bei der Bepackung von Laderäumen steigt die Nachfrage nach automatischer Software zur Lösung der zugehörigen Anordnungsprobleme.

In einem Projekt beschäftigen wir uns mit dreidimensionalen Packungsanwendungen bei der Konstruktion von Fahrzeugen. Ziel ist die Anordnung von Bauteilen in Bauräumen mit minimalem Volumen. Kabelverläufe und individuell formbare Baugruppen (wie z.B. Wassertanks) werden in die Optimierung einbezogen, wobei vielfältige Nebenbedingungen (thermische Einflüsse, Wartbarkeit, usw.) zu berücksichtigen sind. Die Anordnungsprobleme beziehen sich dabei auf alle Bereiche des Fahrzeugs (Motorraum, Armaturenbrett, Fahrgastzelle und Kofferraum). Die Hersteller stehen hier unter einem erheblichen Wettbewerbsdruck, wobei die Produkthanforderungen bei immer kürzeren Entwicklungszyklen umgesetzt werden müssen. Durch die Integration derartiger Verfahren in moderne CAD-Systeme können Entwicklungszeiten reduziert und Wettbewerbsvorteile realisiert werden.

Selbst für eingeschränkte Problemformulierungen, wie z.B. Container- oder Pallet-Loading quaderförmiger Objek-

te, fällt das dreidimensionale Anordnungsproblem schon in die Klasse der NP-vollständigen Optimierungsprobleme. Die Berechnung von Optimallösungen ist wegen der inhärenten Problemkomplexität daher nur für Probleminstanzen mit geringer Objektanzahl möglich. Grundlage für unseren Ansatz bildet eine Modellierung des Anordnungsproblems als gemischt ganzzahliges lineares Programm, wobei nicht konvexe, polyedrische Objektgeometrien zulässig sind. Überschneidungsfreiheit der Objekte wird hierbei durch die Berechnung dreidimensionaler Hodographen bzw. Minkowski-Summen sichergestellt. Mit Hilfe eines Branch&Bound Verfahrens können wir Optimallösungen oder - bei wesentlich geringeren Laufzeiten - gute, legale Lösungsvorschläge berechnen. Der Konfigurationsraum wird hierbei vollständig bzw. durch heuristische Verfahren eingeschränkt durchsucht. Wir verwenden zudem eine Beschreibungshierarchie der Objekte, um ein sinnvolles Spektrum von Laufzeit und Berechnungsgenauigkeit abzudecken.

Die entwickelten Lösungsmethoden sind über die Fahrzeugentwicklung hinausgehend auch in anderen Konstruktions- und Entwurfsbereichen von Bedeutung und vielfältig einsetzbar.

Partner:

Daimler-Chrysler, Stuttgart
Universität Bonn, Institut für Informatik

Kontakt:

Dr. Ralf Heckmann
Tel. +49 (0) 2241 14 - 2810
E-Mail: ralf.heckmann@scai.fhg.de

Computer Algebra und Differentialgleichungen

Die Lösung von Differentialgleichungen ist eines der methodischen Schwerpunkte des Instituts. Partielle Differentialgleichungen kann man – bis auf wenige Ausnahmen – nur numerisch, nicht aber analytisch, d.h. „in geschlossener Form“ lösen. Bei gewöhnlichen Differentialgleichungen sind analytische Lösungsmethoden jedoch durchaus von Interesse. Anders als numerische Approximationen erlauben solche Lösungen „in symbolischer Form“ oft weitergehende Einsichten in die Struktur des zugrunde liegenden Problems.

Die Bestimmung symbolischer Lösungen beruht meist auf heuristischen Verfahren, deren Anwendung sehr zeitraubend ist. Hinzu kommt: Es gibt keine Garantie für die Nicht-Existenz einer solchen Lösung, sollten diese Bemühungen fehlschlagen. Besondere Schwierigkeiten bereiten dabei die in vielen Anwendungen auftretenden nicht-linearen Gleichungen.

Das einzige systematische Verfahren zur analytischen Lösung solcher Gleichungen ist die Symmetrieanalyse von

Sophus Lie. Die dazu erforderlichen Rechnungen sind jedoch derartig umfangreich, dass sie mit „Bleistift und Papier“ nicht durchgeführt werden können. Die Computer-Algebra bietet sich deswegen als Hilfsmittel an. Lie selbst hat seine Theorie im wesentlichen für Gleichungen zweiter Ordnung ausgearbeitet. Im Projekt CADE wurde die vollständige Analyse für Gleichungen dritter Ordnung durchgeführt. Für alle Symmetrietypen stehen Lösungsalgorithmen zur Verfügung, die für wohldefinierte Klassen von Gleichungen vollständig algorithmisch das bestmögliche Ergebnis liefern.

Zur Implementierung der dafür notwendigen Software wurde das algebraische Typsystem ALLTYPES entwickelt, das auf dem Computer-Algebra System Reduce basiert. Es stellt etwa 100 parametrisierte Typen zur Beschreibung mathematischer Objekte, und eine besonders für die Formulierung algebraischer Algorithmen geeignete Sprache zur Verfügung. Darauf ist die Anwendungssoftware zum symbolischen Lösen von Differentialgleichungen implementiert.

Kontakt:

Dr. Fritz Schwarz
Tel.: +49 (0) 2241 14 - 2782
E-Mail: schwarz@scai.fhg.de

Publikationen

Ahrem, R.; Post, P.; Steckel, B.; Wolf, K.: MpCCI: A Tool for Coupling CFD with Other Disziplines, Conference Proceedings, 5th World Conference in Applied Fluid Dynamics, CFD - Efficiency and the Economic Benefit in Manufacturing, June 17 - 21, 2001.

Aigner T.; Gehrsitz A.; Gebhard P.; McKenna, L.; Zien, A.: Anabolic and Catabolic Gene expression Pattern Analysis in Normal Versus Osteoarthritic Chondrocytes using cDNA-array Technology, Arthritis and Rheumatism, 2001. To appear.

Apostolakis J.; Hofmann D.; Lengauer, T.: Derivation of a scoring function for crystal structure prediction, Acta Crystallographica A57, pages 442-450, 2001.

Apostolakis J.; Hofmann D.; Lengauer, T.: Using simple learning machines to derive a new potential for molecular modeling. In: Höltje, H. D. ; Sippl, W., editors, Rational Approaches to Drug Design: 13th European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationships, pages 125-134, Barcelona, 2001.

Beerenwinkel, N.; Schmidt, B.; Walter, H.; Kaiser, R.; Lengauer, T.; Hoffmann, D.; Korn, K.; Selbig, J.: Identifying drug resistance-associated patterns in HIV genotypes, In: Wingender, E.; Hofesädt, R.; Liebich, I., editors, Proceedings of the German Conference on Bioinformatics GCB 2001, pages 126-130, 2001.

Beerenwinkel, N.; Schmidt, B.; Walter, H.; Kaiser, R.; Lengauer, T.; Hoffmann, D.; Korn, K.; Selbig, J.: Geno2pheno: A system for the interpretation of genotypic HIV drug resistance tests, IEEE on Systems and their Applications, 2001. To appear.

Beerenwinkel, N.; Schmidt, B.; Walter, H.; Kaiser, R.; Lengauer, T.; Hoffmann, D.; Korn, K.; Selbig, J.: Geno2pheno: a new machine learning approach to predicting phenotypic drug resistance from genotype, Antiviral Therapy 2001, 6 (Supplement 1), 104.

Beerenwinkel, N.; Schmidt, B.; Walter, H.; Kaiser, R.; Lengauer, T.; Hoffmann, D.; Korn, K.; Selbig, J.: Identifying drug resistance-associated patterns in HIV genotypes, In: Wingender, E., Hofesädt, R., Liebich, I. (Eds.): Proceedings of the German Conference on Bioinformatics, October 7 - 10, 2001, Braunschweig, Germany, pages 126 - 130.

Beerenwinkel, N.; Däumer, M.; Hoffmann, D.; Kaiser, R.; Korn, K.; Lengauer, T.; Schmidt, B.; Walter, H.; Selbig, J.: Neue Wege zur Optimierung von Anti-HIV-Therapien - Erste Analysen mit bioinformatischen Methoden, BIOforum 12 (2001), S. 912 - 914.

Bendisich, J.; Thole, C.A.; Trotha von, H.: Investigation on car stability in crash simulations, ATTCE Proceedings, Volume 1 Safety, SAE International, 2001.

Benkner, S.; Brandes, T.: A Schedule Cache for Data Parallel Irregular Computations, In: Parallel Computing, volume, 13-14, pages 1807-1823, 2001.

Benkner, S.; Brandes, T.: Efficient Parallel Programming on Scalable Shared Memory Systems with High Performance Fortran, In: Concurrency and Computation: Practice and Experience, Special Issue of HPF Users Group Meeting 2000 Tokyo, 2001. To appear.

Benkner, S.; Brandes, T.: High-Level Data Mapping for Clusters of SMP's, In: Proceedings of 6th International Workshop, HIPS 2001, San Francisco, CA, USA, editor: Lecture Notes in Computer Science, volume 2026, pages 1-15, 2001.

Brandes, T.; Germain, C.: A Schedule Cache for Data Parallel Irregular Computations, In: Parallel Computing, Volume 26, Number 13-14, pages 1807-1823, 2001.

Claussen, H.; Buning, C.; Rarey, M.; Lengauer, T.: FlexE: Efficient Molecular Docking Considering Protein Structure Variations, Journal of Molecular Biology 308, pages 377-395, 2001.

Claussen, H.; Buning, C.; Rarey, M.; Lengauer, T.: Molecular Docking into the flexible active site of Aldose Reductase using FlexE, In: Höltje, H. D.; Sippl, W., editors, Rational Approaches to Drug Design: 13th European Symposium on Quantitative Structure-Activity Relationships, pages 324-333, Barcelona, 2001.

Eggeling, E.; Ta'asan, S.: An optimization algorithm for the meteorological data assimilation problem, In: Proceedings of: International Symposium on Computational & Applied PDEs, 2001, to appear.

Eichermann, T.; Grund, H.; Ziegler, W.; Zier, L.: Metacomputing Applications in All-optical Net-

works, ERCIM News, 45, pages 19-20, 2001. Fleig, T.; Olsen, J.; Marian, C. M.: The Generalized Active Space (GAS) Concept for the Relativistic Treatment of Electron Correlation: I. Kramers Restricted Two-Component Configuration Interaction, Journal of Chemical Physics, 114(11), pages 4775-4790, 2001.

Frickenhaus, S.; Redler, R.; Post, P.: Parallel coupling of regional atmosphere and ocean models, Proceedings of the 9th Workshop on the Use of High Performance Computing in Meteorology, Ziefelhofer, W.; Kreitz, N., editors, World Scientific Publishing, Singapore, Developments in Teracomputing, 13-17, pages 201-213, 2001.

Füllenbach, T.: Algebraische Mehrgitterverfahren für Systeme partieller Differentialgleichungen, Forschungsbericht, Graduiertenkolleg Scientific Computing 4/2000 - 3/2001, Universität zu Köln, 2001.

Gerdes, R.; Biastoch, A.; Redler, R.: Fresh water balance of the Gulf Stream system in a regional model study, Climate Dynamics 18, pages 7-27, 2001.

Hemker, P. W.; Sprengel, F.: Experience with the Solution of a Finite Difference Discretization on Sparse Grids, In: Yulkov, L.; Wasniewski, J.; Yalamov, P.; editors, Numerical Analysis and Its Applications, pages 402-413, 2001.

Hindle, S.; Rarey, M.; Buning, C.; Lengauer, T.: Flexible Docking Under Pharmacophore Constraint, Journal of Computer-Aided Molecular Design, 2001. To appear.

Jakumeit, J.; Mietzner, T.; Ravaioli, U.: Efficient Silicon Device Simulation with the Local Iterative Monte Carlo Method, VLSI Design 13, 1-4, pages 57-61, 2001.

Jakumeit, J.; Ravaioli, U.: Local Iterative Monte Carlo Analysis of Electron-Electron Interaction in Short-Channel Si-MOSFETs, IEEE Transactions on Electron Devices, 2001.

Jakumeit, J.; Ravaioli, U.: Local Iterative Monte Carlo investigation of the influence of electron-electron scattering on down-scaled Si-MOSFETs, In: Proceedings SISPAD, 2001.

Jakumeit, J.; Ravaioli, U.: Influence of electron-electron scattering on the hot electron distribution in ultra-short Si-MOSFETs, Physica B, 2001. To appear.

- Jakumeit, J.; Ravaioli, U.: Semiconductor Transport Simulation with the Local Iterative Monte Carlo Technique, *IEEE Transactions on Electron Devices*, 2001.
- Joppich, W.: Parallel Methods for Weather Forecast and Climate Simulation, *Geophysical Research Abstracts*, Proceedings of the 26th General Assembly of the European Geophysical Society, Nice, France, 2001.
- Joppich, W.; Mierendorff, H.: Performance Prediction for Parallel Local Weather Forecast Models. Proceedings of the International Conference, In: *Computational Science 2001*, Editor: Alexandrov, V.N.; Dongarra, J.J.; Juliano, B.A.; Renner, R.S.; Tan, J.K., Publisher: Springer Lecture Notes in Computer Science and Engineering, Volume LNCS 2073, pages: 492-501, 2001.
- Joppich, W.; Mierendorff, H.; Thole, C.-A.; Trottenberg, U.: Performance-Analyse des DM-MPP Benchmark auf IBM NH II, FhG-SCAI, Sankt Augustin, 2001.
- Joppich, W.; Quaas, J.: Coupling General Circulation Models on a Meta-Computer, *Cluster-Computing*, 2001.
- Klawonn, A.: A FETI Domain Decomposition Method for Edge Element Approximations in Two Dimensions with Discontinuous Coefficients, *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 2001. To appear.
- Klawonn, A.; Widlund, O.B.; Dryja, M.: Dual-Primal FETI Methods for Three-Dimensional Elliptic Problems with Heterogeneous Coefficients, Technical Report TR 815, Courant Institute of Mathematical Sciences, Dept. of Computer Science, New York University, USA, April 2001, rev. November 2001, p. 21, Accepted for publication in *SIAM J. Numer. Anal.*
- Klawonn, A.; Widlund, O. B.: FETI and Neumann-Neumann Iterative Substructuring Methods: Connections and New Results, *Communications on Pure and Applied Mathematics*, 54, page 57-90, 2001.
- Klawonn, A.; Widlund, O. B.: FETI-DP Methods for Elliptic Problems with Discontinuous Coefficients in Three Dimensions, In: Proceedings 13th Conference on Domain Decomposition Methods, 2001. To appear.
- Klawonn, A.; Widlund, O.B.; Dryja, M.: Dual-Primal FETI Methods with Face Constraints, Proceedings of a workshop on domain decomposition methods held at ETH Zürich June 7/8, 2001. *Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, editors: L. Pavarino und A. Toselli, p.14 To appear.
- Kleinschmidt, M.; Flug, T.; Marian, C. M.: Kramers-type splitting in the X2II and a 4S¹ states of CH and CD calculated in a Hund's case (a) basis, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 2001. To appear.
- Kleinschmidt, M.; Tatchen, J.; Marian, C. M.: Spin-Orbit Coupling of DFT/MRCI Wavefunctions: Method, Test Calculations, and Application to Thiophene, *Journal of Computational Chemistry*, 2001. To appear.
- Krechel, A.; Stüben, K.: Parallel algebraic multigrid based on subdomain blocking, *Parallel Computing*, 27, pages 1009-1031, 2001.
- Lengauer, T.: From Genomes to Drugs, Band 14 von VCH/Wiley Series on Methods and Principles, In: *Medicinal Chemistry*, 2001.
- Lengauer, T.; Sankoff, D.; Istrail, S.; Pevzner, P.; Waterman, M. S.: Proceedings of the Fifth Annual Conference on Research in Computational Molecular Biology, RECOMB, 2001.
- Lengauer, T.: Bioinformatik an der Schwelle zur postgenomischen Ära, In: *Was wissen wir, wenn wir das menschliche Genom kennen*, Honnefelder, L.; Propping, P., editors, Seiten 56-62, 2001.
- Li, Z.; Schwarz, F.: Rational Solutions of Riccati-like Partial Differential Equations, *Journal of Symbolic Computation* 31, pages 691-716, 2001.
- Marian, C. M. ; Gastreich, M.: Quantitative Structure-Property Relationships in Boron Nitrides: The 15N and 11B Chemical Shifts, *Solid State Nuclear Magnetic Resonance* 19, pages 29-44, 2001.
- Marian, C. M. ; Schlenz, H.; Kirfel, A.; Schulmeister, K.; Wartner, N.; Mader, W.; Raberg, W.; Wandelt, K. M; Oligschleger, C.; Bender, S.; Franke, R.; Hormes, J.; Hoffbauer, W.; Lansmann, V.; Jansen, M.; Zotov, N.; Putz, H.: Structure analyses of Basilikate glasses: A collaborative study, *Journal of Non-Crystalline Solids*, 2001. To appear.
- Mietzner, T.; Jakumeit, J.; Ravaioli, U.: Influence of Electron-Electron Interaction on Electron Distributions in Short Si-MOSFETs Analysed Using the Local Iterative Monte Carlo Technique, *VLSI Design* 13, 1-4, pages 175-178, 2001.
- Muegge, I.; Rarey, M.: Small Molecule Docking and Scoring, *Reviews in Computational Chemistry*, Lipkowitz, K. B.; Boyd, D. B., editors, Wiley-VCH. 17, pages 1-60, 2001.
- Oehsen von, N.; Zimmer, R.: Improving profile-profile alignments via log average scoring, In: *Workshop on Algorithms in Bioinformatics (WABI) 2001*. To appear.
- Oosterlee, C.W.: On multigrid for linear complementarity problems with application to American-style options, *Electronic Transactions on Numerical Analysis (ETNA)*, 2001. To appear.
- Peric, M.; Marian, C. M.; Peyerimhoff, S. D.: Ab initio study of the vibronic spectrum in the X2II electronic state of HCCS, *Journal of Chemical Physics* 114(14), pages 6086-6099, 2001.
- P. Post, K. Schilcher: K0 form factor at order p6 of chiral perturbation theory, *Nucl. Phys. B599*, pages 30-54, 2001.
- Quecke, G.; Ziegler, W.: Co-allocating Compute Resources in the Grid, *ERCIM News* 45, pages 24-25, 2001.
- Rarey, M.: Protein-Ligand Docking in Drug Design, *Bioinformatics*, T. Lengauer, Wiley-VCH. 1, pages 315-360, 2001.
- Rarey, M.; Stahl, M.: Similarity Searching in Large Combinatorial Chemistry Spaces, *Journal of Computer-Aided Molecular Design* 15, pages 497-520, 2001.
- Reinhardt, S.; Gastreich, M.; Marian, C. M.: Quantum chemical investigation of initial reactions between the molecular precursors TADB and ammonia I: Gas phase reactions, *The Journal of Physical Chemistry*, 2001. To appear.
- Reinhardt, S.; Marian, C. M.; Frank, I.: The Influence of Excess Ammonia on the Mechanism of the Reaction of Boron Trichloride with Ammonia - An Abinitio Molecular Dynamics Study, *Angewandte Chemie, International Edition* 40(19), pages 3683-3685, 2001.
- Reimann, S.; Bendisch, J.: On global site percolation on the correlated honeycomb lattice, *Physica A* 296, pages 391-404, 2001.
- Rixen, D.J. ; LeTallec, P.; Klawonn, A.: A Matrix Description for the Domain Decomposition Methods of the FETI family, September 2000, Proceedings of the First MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, pages 1636-1639 MIT, Cambridge, USA, June 12-14, 2001.
- Schäfer, M.; Lengauer, T.: Automated Layout Generation And Wiring Area Estimation for 3D Electronic Modules, *ASME Journal of Mechanical Design*, pages 330-336, 2001.

Schmidt, B.; Walter, H.; Schwingel, E.; Beerenwinkel, N.; Selbig, J.; Kaiser, R.; Hoffmann, D.; Shafer, R.; Keulen, W.; Been-Tiktak, A.M.; Boucher, C.A.B.; Korn, K.: Comparison of different interpretation systems for genotypic HIV-1 drug resistance data, *Antiviral Therapy* 6 (Supplement 1), 102, 2001.

Schwarz, F.: Solving Second-Order Differential Equations with Lie Symmetrie, *Acta Applicandae Mathematicae*, 60, pages 39-113, 2000.

Selbig, J.: Recent Progress in Protein Secondary Structure Prediction, In: Gromiha, M.; Selvaraj, S., editors, *Recent Research Developments in Protein Folding, Stability and Design*, Research Signpost, Trivandrum, INDIA, 2001. To appear.

Sprengel, F.: Can we use the known fast spherical Fourier transforms in numerical meteorology, GMD-Report, GMD - Forschungszentrum Informationstechnik GmbH, Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin, 2001. To appear.

Sprengel, F.: Comparing Time Marching Schemes for Numerical Meteorology, GMD-Report, GMD - Forschungszentrum Informationstechnik GmbH, Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin, 2001. To appear.

Springstubbe, S.: SIM2001-Trade Fair for Simulation and Visualisation: The virtual Product - from Automobile to Zeppelin, *ERCIM News*, pages 45-55, 2001.

Springstubbe, S.: HPC Applications and their Transfer into European Industries, In: *World Multiconference on Systemics, Cybernetics and Informatics*, volume III, pages 45-50, 2001.

Stahl, M.; Rarey, M. et al.: Screening of Drug Databases, *Bioinformatics*, Lengauer, T., Wiley-VCH, 2, pages 137-170, 2001.

Stahl, M.; Rarey, M.: A Detailed Analysis of Scoring Functions for Virtual Screening, *Journal of Medicinal Chemistry* 44, pages 1035-1042, 2001.

Stüben, K.: A Review of Algebraic Multigrid, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 128, pages 281-309, 2001.

Stüben, K.: An Introduction to Algebraic Multigrid. In: Trottenberg, U.; Oosterlee, C. W.; Schüller, A., editors, *Multigrid*, pages 413-532, 2001.

Tatchen, J.; Waletzke, M.; Marian, C. M.; Grimme, S.: The Photophysics of Pyranthione: A Theoretical Investigation Focussing on Spin-Forbidden Transitions, *Chemical Physics*, 264, pages 245-254, 2001.

Thole, C.A.; Achilles, M.; Bendisch, J.; Kolp, O.; Liqun, Mei; Trotha von, H.: Ein Weg zu stabilen Fahrzeugmodellen für die Crash-Simulation, *Proceedings of the CrashMat 2001 Conference*, S. Hiermaier, Fraunhofer Ernst Mach Institut, Freiburg, 2001.

Thole, C.A.; Trottenberg, U.: AUTOBENCH, Integrierte Entwicklungsumgebung für virtuelle Automobil Prototypen, GMD-Forschungszentrum Informationstechnik, Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin, 2001. To appear.

Toselli, A.; Klawonn, A.: A FETI domain decomposition method for EdgeElement Approximations in Two Dimensions with Discontinuous Coefficients, *SIAM J. Numer. Anal.*, Vol. 39, No. 3, pages 932-956, 2001.

Trottenberg, U.; Oosterlee, C.W.; Schüller, A.: *Multigrid*. Academic Press, London, 2001.

Trottenberg, U.; Linden, J.; Thole, C.A.: Simulation und virtuelles Engineering, In: *Sommerlatte*, T., *Angewandte Systemforschung - ein interdisziplinärer Ansatz*, S. 280-292. To appear.

Walter, H.; Korn, K.; Moschik, B.; Paatz, C.; Beerenwinkel, N.; Selbig, J.; Kaiser, R.; Hoffmann, D.; Schmidt, B.: Cross-resistance to amprenavir in patients pretreated with protease inhibitors - comparison of a conventional mutation analysis and a bioinformatics-supported approach, *Antiviral Therapy* 6 (Supplement 1), 2001.

Wesseling, P.; Oosterlee, C. W.: Geometric multigrid with applications to computational fluid dynamics, *Journal of Computational and Applied Mathematics* 128, pages 311-334, 2001.

Wienands, R.; Oosterlee, C. W.: On three-grid Fourier analysis for multigrid, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 23, pages 651-671, 2001.

Wolf, K.: Mesh based parallel Code Coupling Interface, 2nd MpCCI User Forum, Feb 2001, Schloss Birlinghoven, Wolf, K.; Steckel, B., editors, *GMD Report 132*, ISSN 1435-2702.
Ziegler, W.; Streit, A.: Early Experiences with the EGrid Testbed, In: *CCGRID 2001*, IEEE Symposium on Cluster Computing and the Grid, pages 130-139, 2001.

Zien, A.; Aigner, T.; Zimmer, R.; Lengauer, T.: Centralization: A biologically sensible method for the normalization of gene expression data, In: *Proceedings of the 9th International Conference on Intelligent Systems for Molecular Biology (ISMB 2001)*, 2001. To appear.

Graduierungsarbeiten

Diplomarbeiten

Frisch, J.: Anwendungen eines Mehrgitterverfahrens auf partielle Differentialgleichungen für asiatische Optionen unter Verwendung einer modernen Zeitdiskretisierung, Universität zu Köln, Diplom, 2001.

Lilienthal, M.: Optimierungsmethoden zur multiplen flexiblen Ligandüberlagerung, Universität Bonn, Diplom, 2001.

Dissertationen

Baehr, H. C.: Stability of Continuous cyclic cohomology and Operator ideals on Hilbert space, Universität Münster, Dissertation, 2001.
Claußen, H.: Effizientes Protein-Ligand-Docking mit flexiblen Proteinstrukturen, Universität Bonn, Dissertation, 2001.

Gastreich, M.: Werkzeuge zur Modellierung von Siliciumbornitrid-Keramiken: Entwicklung von Mehrkörperpotenzialen und Berechnungen zur NMR-chemischen Verschiebung, Universität Bonn, Dissertation, 2001.

Lang, M.: Distributed Relaxation Multigrid Applied to Incompressible Equations in Computational Fluid Dynamics, Weizmann Institute of Science, Dissertation, 2001.

Lügering, M.: Ganzzahlig lineare Programmierung bei der globalen Verdrahtung integrierter Schaltkreise, Universität Bonn, Dissertation, 2001.

Reschke, H.-G.: Analysis und Numerik von singulären Lösungen der Minimalfächengleichung, Dissertation, Universität zu Köln, Dissertation, 2001.

Wienands, R.: Extended Local Fourier Analysis for Multigrid: Optimal Smoothing, Coarse Grid Correction, and Preconditioning, Universität zu Köln, Dissertation, 2001.

Habilitationen

Duvenbeck, C.: Charakterisierung überschneidungsfreier Anordnungen polyedrischer Objekte unter Berücksichtigung von Translation und Rotation, Universität Bonn, Habilitation, Juni 2001.

Elbern, H.: Inversion of a complex chemistry transport model, Universität zu Köln, Habilitation, Oktober, 2001.

Jakumeit, J.: Neue Verfahren zur Simulation des Elektronentransports in Silizium-Feldeffekttransistoren, Universität zu Köln, Habilitation, Oktober, 2001.

Klawonn, A.: Domain Decomposition Methods: Theoretical and Algorithmic Contributions with Applications in Continuum Mechanics, Universität zu Köln, Habilitation, Juni 2001.

Rarey, M.: Algorithmen für den computergestützten Wirkstoffentwurf, Universität Bonn, Habilitation, 2001.

Firmengründungen

07/2001 BioSolveIT GmbH, Sankt Augustin.
www.biosolveit.de

01/2001 Fasotec GmbH, Brühl.
www.fasotec.com

Vorträge

Bendisch, J.: Investigation of car stability in crash simulations, ATTCE 2001, Oktober, Barcelona, Spain.

Claußen, H.; Rarey, M.: Molecular Docking with FlexX, FlexE. Bologna Winter School In Silico Biomolecular Recognition, Bologna, Italien.
Eggeling, E.: An optimization algorithm for the meteorological data assimilation problem, International Symposium on Computational & Applied PDEs, Zhang Jiajie, China, Juli 2001.

Eggeling, E.: An optimization algorithm for the meteorological data assimilation problem, Kolloquiumsvortrag des Graduiertenkollegs "Scientific Computing" der Universität Köln, Juli 2001.

Füllenbach, T.: Algebraic Multigrid for Systems of Partial Differential Equations, Graduiertenkolleg Scientific Computing, Köln, Mai 2001.

Füllenbach, T.: Algebraic Multigrid for Selected PDE Systems, ELPAR2001 Conference, Gaeta, Italien, August 2001.

Füllenbach, T.: Point-based AMG for Semiconductor Device Simulation, Avant! Inc., Fremont, USA, November 2001.

Jakumeit, J.: Nachrichtenübertragung mit optischen Solitonen, Universität Köln, Mai 2001.

Jakumeit, J.: Local Iterative Monte Carlo investigation of the influence of electron-electron scattering on short channel Si-MOSFETs, International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices, SISPAD 2001 Athen, September 2001.

Jakumeit, J.: Simulation of electron-electron scattering in semiconductor devices by the local iterative Monte Carlo technique, Conference on Computational Physics, Aachen, September 2001.

Jakumeit, J.: Elektromog: Die physikalische Wirkung elektromagnetischer Strahlung auf den Menschen, Universität Köln, Oktober 2001.

Joppich, W.: Performance Prediction for Parallel Local Weather Forecast Models, International Conference in Computational Science 2001, San Francisco, 2001.

Joppich, W.: Beiträge des Wissenschaftlichen Rechnens zur Halbleiterbauelementesimulation. FhG, IIS-b, Erlangen, 2001.

Oosterlee, C.W.: introduction to pde models for option pricing in financial mathematics, University of Urbana Champaign, Illinois, USA, März 2001.

Oosterlee, C.W.: On multigrid for linear complementarity problems arising in financial mathematics, Copper Mountain conference on multigrid methods, April 2001.

Oosterlee, C.W.: On a genetic search for multigrid components in a Fourier analysis setting, Oberwolfach meeting: fast iterative solvers for pde problems, Mai 2001.

Oosterlee, C.W.: On multigrid for linear complementarity problems with application to American options, Financial Applications for High Performance Computing 12th NEC Research Symposium, Bonn, Mai 2001.

Oosterlee, C.W.: On multigrid for singularly perturbed pde problems, Livermore's symposium on multilevel methods, Livermore, California, Juni 2001.

Oosterlee, C.W.: On multigrid for linear complementarity problems with application to American options, Lawrence Livermore National Laboratory (LLNL), Juni 2001.

Oosterlee, C.W.: On fast solution and accurate discretization for pde problems in option pricing, The European conference on Numerical Mathematics and Advanced Applications, ENUMATH 2001, Ischia Porto, Italien, Juli 2001.

Oosterlee, C.W.: On fast solution and accurate discretization for pde problems in option pricing, Universitaet Zaragoza, Spanien, November 2001.

Rarey, M.: Similarity Searching in Large Combinatorial Chemistry Spaces; 2nd Sheffield Conference on Chemoinformatics: Computational Tools for Lead Discovery, Sheffield, UK.

Rarey, M.: Virtual Screening: Computer-Aided Search for new Leads, CEBIT-Life Science Event, Silicon Graphics Stand, Hannover.

Rarey, M.: Recent Algorithmic Approaches to Virtual Screening, Model(l)ing 2001, Erlangen.

Rarey, M.: Visualisierung: Ein Schlüsselement in der Entwicklung von neuen Chemoinformatik-Methoden, GDCh Jahrestagung 2001, Beilstein Symposium.

Steckel, B.: Fluid-structure interaction using MpCCI, a tool for parallel multidisciplinary simulation, ParCFD 2001, Egmond aan Zee, Mai 2001.

Steckel, B.: MpCCI: A Tool for Coupling CFD with Other Disziplines, WUA-CFD, Freiburg, Juni 2001.

Steckel, B.: Forschungsaktivitäten des SCAI und Möglichkeiten der Zusammenarbeit mit dem IZFP, Kolloquium, IZFP Saarbrücken, Oktober 2001.

Stüben, K.: Fast Computation of Groundwater Flows, Imperial College, London (UK), März 2001.

- Stüben, K.: AMG for CFD Simulation, Daimler-Chrysler AG, Sindelfingen, März 2001.
- Stüben, K.: Algebraic Multigrid, JAERI, Tokyo, Japan, Mai 2001.
- Stüben, K.: Fast Solution in Oil Reservoir Simulation, StreamSim Technologies Inc., San Francisco, USA, Juni 2001.
- Stüben, K.: Status of AMG development in an industrial environment, Scalable Linear Solvers Workshop, Lawrence Livermore National Labs, Livermore, USA, Juni 2001.
- Stüben, K.: AMG for Semiconductor Process and Device Simulation, Avant! Inc., Fremont, USA, Juni 2001.
- Stüben, K.: AMG for Oil Reservoir Simulation, Chevron Corporation, San Ramon, USA, Juni 2001.
- Stüben, K.: Fast CFD Solution by Algebraic Multigrid, National Center for High-Performance Computing, Taipei, Taiwan, August 2001.
- Stüben, K.: Algebraic Multigrid and Industrial Applications, Katholieke Universiteit Leuven, Belgien, Dezember 2001.
- Stüben, K.: Solution of Industrial Applications by AMG, RIST, Tokyo, Japan, Dezember 2001.
- Thole, C. A.: Parallel stability simulation of historical buildings, Workshop CNR-GMD, Pisa, April 2001.
- Thole, C. A.: Accuracy and precision of distributed memory crash simulation, CRASH-MAT Freiburg, April 2001.
- Thole, C. A.: AUTOBENCH: Zusammenfassung der Projektergebnisse, AUTOBENCH Abschlußpräsentation, BMW AG, München, Juni 2001.
- Thole, C. A.: Accuracy and precision of distributed memory crash simulation, Supercomputing 2002, Master works series, Mannheim, November 2001.
- Thole, C. A.: A parallel hierarchical iterative solver for finite element applications, SSS 2001, Tokyo, Dezember 2001.
- Trottenberg, U.: Simulationstechnologie in der Automobilindustrie, CeBIT, Hannover, März 2001.
- Trottenberg, U.: Bedarf und Nutzung von Höchstleistungsrechnern aus Sicht der Fraunhofer-Gesellschaft, Wissenschaftsrat Köln, Mai 2001.
- Trottenberg, U.: Trends in Multidisciplinary Simulation, CCSE JAERI/GMD Workshop, Tokyo, Japan, Mai 2001.
- Trottenberg, U.: Trends in Numerical Simulation, Simulation and Visualisation Conference, Freiburg, Mai 2001.
- Trottenberg, U.: AUTOBENCH – Überblick über die Ergebnisse, AUTOBENCH – Abschlußpräsentation, BMW AG, München, Juni 2001.
- Trottenberg, U.: Fast Numerical Simulation and Virtual Engineering. 8th National CFA Conference, I-Tan, Taiwan, August 2001.
- Trottenberg, U.: Fast Numerical Simulation and Virtual Engineering – European Projects and Trends, RIST, Tokyo, September 2001.
- Trottenberg, U.: The Fraunhofer ICI Group – Mission and Goals, ERCIM Board of Directors Meeting, Knossos, Griechenland, Oktober 2001.
- Trottenberg, U.: Die Fraunhofer IuK-Gruppe im Überblick, Unterausschuß Wissenschaft und Forschung des Rats der Stadt Bonn, November 2001.
- Trottenberg, U.: Fast Solvers for Large Scale Simulation, SSS 2001 (Scalable Solver Software), RIST and the University of Tokyo, Tokyo, Dezember 2001.
- Wienands, R.: Local Fourier k-grid (k=1,2,3) analysis for Navier-Stokes-type systems, 10th Copper Mountain Conference on Multigrid Methods, Copper Mountain, Colorado, USA, April 2001.
- Wienands, R.: Extended local Fourier analysis for multigrid, Seminarreihe über numerische Simulation, Abteilung für Computerwissenschaften der Katholischen Universität Leuven, Leuven, Belgien, Juni 2001.
- Wienands, R.: Erweiterungen der lokalen Fourieranalyse von Mehrgitterverfahren, Universität Köln, Juli 2001.
- Wienands, R.: Erweiterungen der lokalen Fourieranalyse von Mehrgitterverfahren, Lehrstuhl für Systemsimulation der Universität Erlangen-Nürnberg, Erlangen, Juli 2001.
- Wolf, K.: MpCCI for Climate Coupling, Das Gemeinschaftsmodell für die Deutsche Klimaforschung, Workshop, Bremerhaven, Januar 2001.
- Wolf, K.: Coupling of Metal Forming and Crash Simulation, Crash-Simulation von umgeformten Karosserieteilen FAT-Arbeitskreis 27, Frankfurt, Februar 2001.
- Wolf, K.: MpCCI for Model Coupling, Model Coupling and Related Numerical Issues, Workshop, Potsdam, Mai 2001.
- Wolf, K.: CORBA-based Integration of Simulation Workflows, Advanced Environments and Tools for High Performance Computing, ESF-Workshop, Castelvecchio Pascoli, Juni 2001.
- Wolf, K.: MpCCI – A General Coupling Library for Multidisciplinary Simulation, Scalable Solver Software, Multiscale Coupling and Computational Earth Science, Workshop, Tokyo, Dezember 2001.
- Wolf, K.: Distributed and Multidisciplinary Simulations in Grids, Autonomic Computing, IBM Workshop, Böblingen, Dezember 2001.

Lehrveranstaltungen

Elbern, H.: Oberseminar Regionale Effekte der Emission von Luftschadstoffen und ihre Simulation (mit Ebel, A.), Universität zu Köln, WS 2000/2001.

Elbern, H.: Schadstoffsimulation, Schadstoffprognose in der unteren Troposphäre, Universität zu Köln, WS 2000/2001.

Elbern, H.: Oberseminar Probleme der Luftreinhaltung (mit Ebel, A.), Universität zu Köln, SS 2001.

Joppich, W.: Mathematik I, mit Übungen, Fachhochschule Rhein-Sieg, Sankt Augustin, WS 2000/2001.

Joppich, W.: Mathematik II, mit Übungen, Lehrauftrag Fachhochschule Rhein-Sieg, Sankt Augustin, SS 2001.

Joppich, W.: Mathematik III, Lehrauftrag Fachhochschule Rhein-Sieg, Sankt Augustin, WS 2001/2002.

Joppich, W.: Softwarewerkzeuge der Mathematik, Lehrauftrag Fachhochschule Rhein-Sieg, Sankt Augustin, WS 2001/2002.

Karabek U.: Grundlagen des Programmierens, FH Koblenz, WS 2000/2001; SS 2001; WS 2000/2001.

Klawonn, A.: Numerische Methoden in der Strukturmechanik, Universität zu Köln, WS 2000/2001.

Klawonn, A.: Numerik partieller Differentialgleichungen, mit Übungen, Universität zu Köln, SS 2001.

Klawonn, A.: Seminar zur Numerik gekoppelter Probleme, Universität zu Köln, WS 2001/2002.
Lengauer, T.: Bioinformatik, Uni Bonn, WS 2000/2001.

Lob, M.: Mathematik I und II, FH Bonn-Rhein-Sieg, WS 2000/2001.

Lorentz R.: Mehrgitterverfahren, Universität Duisburg WS 2000/2001.

Lorentz, R.: Wavelets, Universität Duisburg, SS 2001.

Marian, C.: Symmetrie in der Chemie, ausgewählte Kapitel, Universität Düsseldorf, SS 2001.
Marian, C.: Gruppentheorie und ihre Anwendung in der Chemie, Universität Düsseldorf, WS 2000/2001.

Osterlee, C.W.: Wissenschaftliches Rechnen, Universität zu Köln, SS 2001.

Schwamborn, H.: Informatik, FH Bonn-Rhein-Sieg, SS 2001.

Sprengel, F.: Computergraphik 1, FH Hannover, SS 2001.

Sprengel, F.: Informatik für Maschinenbauer, FH Bonn-Rhein-Sieg, SS 2001.

Trottenberg, U.: Funktionalanalysis (gemeinsam mit T. Küpper), Universität zu Köln, WS 2000/2001.

Trottenberg, U.: Seminar über Adaptive Mehrgitterverfahren, Universität zu Köln, SS 2001.

Trottenberg, U.: Mehrgittermethoden, Universität zu Köln, WS 2001/2002.

Trottenberg, U.: Forschungsseminar Wissenschaftliches Rechnen, Universität zu Köln WS 2000/2001, SS 2001, WS 2001/2002.

Zimmer, R.: Algorithmen und statistische Verfahren der strukturierten Genomanalyse, Universität Bonn, WS 2000/2001.

Mitgliedschaften, Gremien

Görg, B.

- Obmann Arbeitsgremium "Entwicklung, Dokumentation und Bewertung informationsverarbeitender Systeme" im DIN

Hotzel, E.

- Reviewer für Mathematical Reviews

Krapp, M.

- ERCIM-Newsletter, Editorial Board
- Deutscher Journalisten Verband
- Technisch-Literarische Gesellschaft (TELI)
- Internet Society

Linden, J.

- Beirat des Bundeswettbewerbs Informatik
- Unterausschuss Wissenschaft und Forschung der Stadt Bonn

Joppich, W.

- Beirat Bundeswettbewerb Informatik stv. Vorsitzender
- Mitglied IEEE Electronical Devices Society
- Mitglied IEEE Computer Society

Stüben, K.

- Scalable Linear Solvers Workshop 2001, Lawrence Livermore National Laboratories, organizing committee

Trottenberg, U.

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

Ziegler, W.

- Global Grid Forum
- German Grid Group (DFN)
- ERCIM Task Force on Grids

