



**20 Jahre  
Fraunhofer SCAI**

# Jahresbericht 2020 | 2021

---

Jahresbericht 2020 | 2021



# Inhalt

Vorwort .....	5
Profil .....	6
Zahlen und Fakten .....	7
Chancengleichheit und Diversität.....	8
SCAllights .....	9
Ausgewählte Softwarelösungen .....	12
Bioinformatik .....	14
Optimierung .....	16
Multiphysics .....	18
Schnelle Löser .....	20
High Performance Computing .....	22
Network Evaluation Technologies .....	24
Virtual Material Design .....	26
Numerische datenbasierte Vorhersage .....	28
Meshfree Multiscale Methods .....	30
Computational Finance .....	32
Die Fraunhofer-Gesellschaft .....	34
Vernetzung .....	35
20 Jahre Fraunhofer SCAI .....	36
Online-Rubriken .....	44
Impressum .....	45

# Vorwort



## Liebe Leser,

das Jahr 2020 wird als Beginn der Corona-Pandemie in Erinnerung bleiben und COVID-19 wird uns wohl noch einen langen Zeitraum begleiten. Die gesundheitlichen Auswirkungen und die wirtschaftlichen Folgelasten sind gravierend. Gleichwohl können wir feststellen: Fraunhofer SCAI ist bislang gut durch die Krise gekommen. Es gab nur wenige und ausnahmslos gutartig verlaufene Krankheitsfälle unter den Mitarbeitern. Weiterhin lagen unsere Wirtschaftserträge im vergangenen Jahr trotz der Auswirkungen der Pandemie bei über 45 Prozent. Die Erträge aus der Vermarktung von Software-Lizenzen überstiegen erstmalig den Wert von sechs Millionen Euro. Auch die Erträge aus Förderprojekten blieben auf hohem Niveau.

Dieses hervorragende Ergebnis ist dem großen Engagement der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter zu verdanken, die überwiegend aus dem Homeoffice den Geschäftsbetrieb geführt haben. Trotz schwieriger Rahmenbedingungen waren und sind wir ein zuverlässiger Partner für unsere Kunden und Partner aus Wirtschaft und Wissenschaft.

Mit neuen Forschungsarbeiten haben wir uns zudem im Kampf gegen COVID-19 engagiert. Im Geschäftsfeld Bioinformatik geht es im Projekt COPERIMOpus beispielsweise darum, das individuelle Risiko einer Corona-Erkrankung mit Hilfe von Methoden der Künstlichen Intelligenz abzuschätzen und personalisierte Therapien zu entwickeln. Dazu werden eigene, publizierte und von internationalen Partnern überlassene Daten genutzt.

Trotz der Krise freuen wir uns im Jahr 2021 über ein Jubiläum: Im Juli 2001 wurde SCAI Fraunhofer-Institut sowie Mitglied des Fraunhofer-Verbunds Informations- und Kommunikationstechnik, und wir können nun auf ein

20-jähriges erfolgreiches Wirken als einziges algorithmisch orientiertes Institut in der Fraunhofer-Gesellschaft zurückblicken. Seit dem Jahr 2011 liegen die Wirtschaftserträge von SCAI konstant über 40 Prozent – in den Jahren 2014, 2016, 2017 und 2018 sogar über 50 Prozent. Diese Erfolge sind uns zugleich Ansporn, unsere weltweit vermarkteten Softwarelösungen und unsere Angebote an die Industrie innovativ weiter zu entwickeln.

Wir danken unseren Kuratoren für ihre wertvollen Empfehlungen – ebenso unseren Kunden und Partnern für ihre Unterstützung und Zusammenarbeit.

Ihnen wünsche ich eine anregende Lektüre und auch weiterhin gute Gesundheit.

Prof. Dr. Michael Griebel



## Profil

### Institutsleitung

Prof. Dr. Michael Griebel  
Prof. Dr. Marc Alexander Schweitzer (Stellvertreter)

### Geschäftsfelder

Bioinformatik	Prof. Dr. Martin Hofmann-Apitius
Optimierung Multiphysics	Dr. Ralf Heckmann
Schnelle Löser	Klaus Wolf
High Performance Computing	Dr. Hans-Joachim Plum
Network Evaluation Technologies	Dr. Thomas Soddemann
Virtual Material Design	Dr. Bernhard Klaaßen
Numerische datenbasierte Vorhersage	Dr. Jan Hamaekers
Meshfree Multiscale Methods	Prof. Dr. Jochen Garcke
Computational Finance	Prof. Dr. Marc Alexander Schweitzer
	Dr. Daniel Oeltz

### Zentrale Bereiche

Planung und Controlling	Christiane Stoll
Marketing und Kommunikation	Michael Krapp
IT-Infrastruktur	André Gemünd

### Außenstelle Bonn

Dr. Jan Hamaekers

### Kuratorium

Dr. Bernhard Thomas, Vorsitzender, im.pulse, Köln  
Victoria Appelbe, Stadt Bonn  
Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz, TU München  
Prof. Dr. Babette Dellen, RheinAhrCampus Remagen, Hochschule Koblenz  
Prof. Dr. Reinhard Klein, Universität Bonn  
Prof. Dr. Petra Mutzel, Universität Bonn  
Prof. Dr. Petra Ritter, Charité – Universitätsmedizin, Berlin  
Prof. Dr. Michael Schäfer, TU Darmstadt  
Dr. Richard Trethewey, BASF SE, Ludwigshafen am Rhein

### Ausgründungen

BioSolveIT GmbH, Sankt Augustin  
scapos AG, Sankt Augustin  
SIDACT GmbH, Sankt Augustin  
adiutaByte GmbH, Sankt Augustin  
Causality Biomodels Ltd., Kalamassery, Cochin, Indien

## Zahlen und Fakten

### Externe Erträge

Fraunhofer SCAI hat im Geschäftsjahr 2020 Wirtschaftserträge in Höhe von rund 6,8 Millionen Euro erzielt und trotz der Corona-Pandemie die Erlöse der letzten beiden Jahre – jeweils knapp 6 Millionen Euro – übertroffen. Der überwiegende Teil dieser Einnahmen stammt aus der Lizenzierung der von SCAI entwickelten Softwarelösungen, vor allem PackAssistant, AutoNester, SAMG und MpCCI. Der Anteil der Wirtschaftserträge am Betriebshaushalt des Instituts lag bei 45,3 Prozent. Damit überstiegen die Wirtschaftserträge zum elften Mal in Folge die 40-Prozent-Marke.

Der Anteil aller externen Erträge am Betriebshaushalt betrug 72,7 Prozent. Den verbleibenden Betrag finanzieren Bund und Länder über die institutionelle Förderung.

### Aufwand

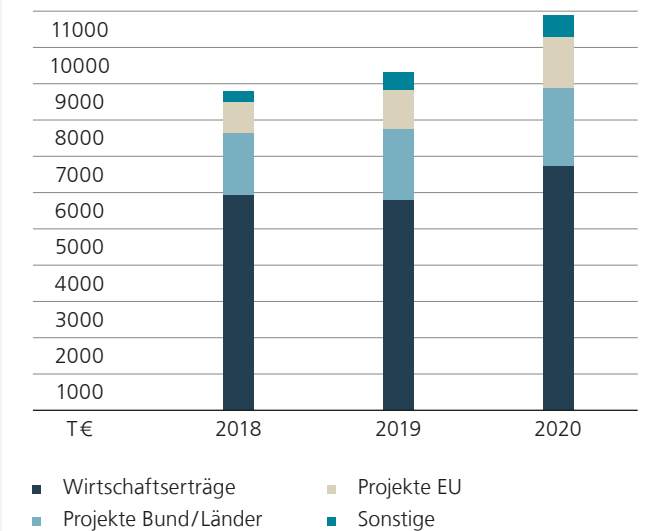
Der Betriebshaushalt des Instituts betrug im Jahr 2020 knapp 15 Millionen Euro und lag damit erheblich über den Werten der Jahre 2018 (10,9 Millionen Euro und 2019 (12,3 Millionen Euro).

Der Gesamthaushalt, in den auch Investitionen einfließen, stieg von 12,5 Millionen Euro im Jahr 2018 über knapp 13 Millionen Euro im Jahr 2019 auf rund 15,6 Millionen Euro.

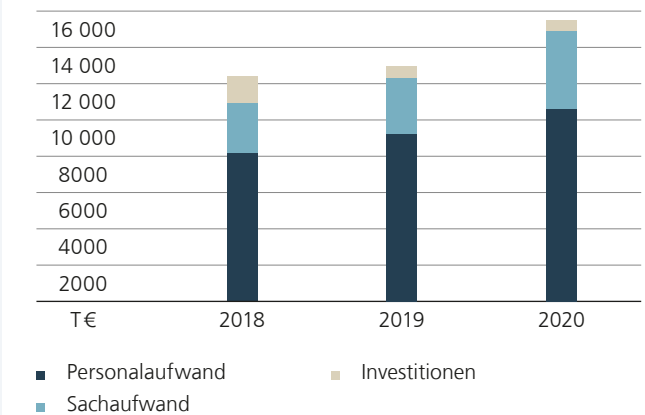
### Personal

Ausschlaggebend für den Anstieg des Haushalts in den vergangenen beiden Jahren ist die höhere Anzahl der bei SCAI tätigen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler. Zum Ende des Jahres 2020 hat SCAI insgesamt 183 Personen (2018: 161, 2019: 179) beschäftigt. Davon waren 21 Doktorandinnen und Doktoranden (2018: 21, 2019: 18) sowie 46 studentische Hilfskräfte und Auszubildende (2018: 46, 2019: 57).

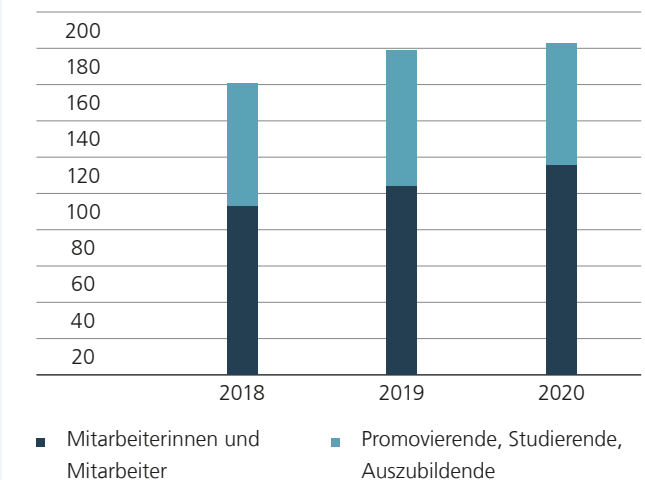
### Externe Erträge



### Aufwand



### Personal





# Chancengleichheit und Diversität

## Diversität ist eine wichtige Prämisse für die Zukunft von SCAI

Fraunhofer SCAI legt großen Wert auf Diversität in seiner Mitarbeiterschaft. Gemischte Teams punkten durch hohe Kreativität sowie eine höhere Problemlösefähigkeit. Ziel von Diversity-Management ist ein Arbeitsumfeld, an dem alle Mitarbeitenden gleichberechtigt teilhaben können. Die Chancengleichheit aller Mitarbeitenden unabhängig von ethnischer Herkunft, Religion und Weltanschauung, Geschlecht, sexueller Identität, Behinderung oder Alter ist wichtige Prämisse für das Selbstverständnis und die Zukunftsfähigkeit von SCAI. Dabei wird die Institutsleitung durch die von den Mitarbeiterinnen gewählten Beauftragten für Chancengleichheit (BfC) unterstützt. Der jährliche Bericht der BfC trägt dazu bei, Handlungsbedarf zu erkennen und Maßnahmen abzuleiten.



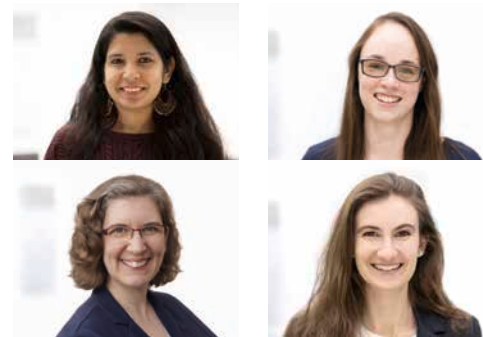
## Beruf und Privatleben flexibel vereinbaren



Das Institut fördert die Vereinbarkeit von Beruf, Familie und Privatleben unter anderem durch flexible Arbeitszeiten. Neben Angeboten der Notbetreuung für Kinder, Homecare/Eldercare und Lebenslagen-Coaching, die über den *pme Familienservice* angeboten werden, bietet Fraunhofer ein umfassendes Informations- und Weiterbildungsangebot. Weitere Bausteine am Fraunhofer-Institutszentrum Schloss Birlinghoven sind ganztägige Ferienbetreuung in den Sommerferien sowie vom Institut bereitgestellte Spiel- und Betreuungsmaterialien für Kinder, die mit ins Büro gebracht werden müssen. Workshops und Kurse zur Gesundheitsförderung und -erhaltung runden das Angebot ab.

## Fraunhofer Talenta: Frauen für die Karriere stärken

Fraunhofer SCAI unterstützt und nutzt die Möglichkeiten des Fraunhofer-internen Förder- und Entwicklungsprogramms »Talanta« für Wissenschaftlerinnen. Talenta stellt die individuelle Karriereentwicklung der Teilnehmerinnen in den Fokus und bereitet sie auf die Übernahme von Führungspositionen vor. In »Talanta speed-up«, einem Programm, das der Karrierebeschleunigung durch strukturelle Förderung und Qualifizierung dient, werden die Wissenschaftlerinnen Dr. Alpha Tom Kodamullil und Dr. Daniela Steffes-lai gefördert. SCAI-Teilnehmerinnen in »Talanta start«, das Berufsanfängerinnen Orientierung und besondere Möglichkeiten der Qualifizierung bietet, sind Sara Hahner und Tamara Raschka.



*Dr. Kodamullil (o. l.), Tamara Raschka (o. r.)  
Dr. Steffes-lai (u. l.), und Sara Hahner*

# SCAllights

## Babette Dellen verstärkt das Kuratorium

**Mai 2019** Prof. Dr. Babette Dellen ist neue Kuratorin von Fraunhofer SCAI. In der Sitzung des Kuratoriums überreichte Prof. Dr. Michael Griebel ihr die Ernennungsurkunde. Dellen ist Professorin für Mathematik in den Lebenswissenschaften im Fachbereich Mathematik und Technik am RheinAhrCampus Remagen der Hochschule Koblenz. Fraunhofer SCAI und die Hochschule Koblenz kooperieren im Bereich Maschinelles Lernen. Von gemeinsamem Interesse sind besonders Anwendungen und neue Möglichkeiten des Maschinellen Lernens in verschiedenen Domänen – etwa beim virtuellen Design neuer Materialien, im Engineering oder in Bioinformatik und Medizin.



*Das Team von adiutaByte (v.l.): Philipp Rinner,  
Dr. Dustin Feld, Vanessa Wolff, Eric Schrickler*

## Spin-off adiutaByte: Mit Mathe gegen den Pflegenotstand

**Juli 2019** Seit Juli 2019 ist die SCAI-Projektgruppe adiutaByte ein neues Spin-off-Unternehmen von SCAI. Als adiutaByte GmbH entwickelt und vermarktet sie Softwarelösungen für die tägliche Tourenplanung von Pflegediensten. Ein Preisgeld in Höhe von 10.000 Euro gewann adiutaByte für die Optimierung von Sperrmüllrouten in der Stadt Herne. Dazu entwickelte adiutaByte das System »Waste Hunter«. Online können Bürger damit angeben, was sie entsorgen möchten, etwa Sofas, Matratzen und Kühlschränke. Durch die bessere Planbarkeit kommt es zu 30 Prozent weniger Touren der Sperrmüllfahrzeuge, gleichzeitig können aber 42 Prozent mehr Aufträge pro Woche abgewickelt werden. Dies steigert die Effizienz und hilft der Umwelt.

## Nils Spring ist kammerbester Fachinformatiker der IHK Bonn

**November 2019** Nils Spring hat seine Abschlussprüfung als Fachinformatiker in der Fachrichtung Systemintegration mit der Note „sehr gut“ bestanden und ist der Prüfungsbeste des Jahrgangs 2019 im Bereich der Industrie- und Handelskammer Bonn/Rhein-Sieg. Gleichzeitig ehrte die IHK das Fraunhofer-Institut SCAI in Anerkennung seiner hervorragenden Ausbildungsleistungen für die Berufsabschlussprüfung 2019 im Ausbildungsberuf Fachinformatiker, Fachrichtung Systemintegration. Bei der Ehrung der besten Auszubildenden der Fraunhofer-Gesellschaft in München erhielt Spring eine Urkunde aus den Händen von Fraunhofer-Vorstand Prof. Dr. Alexander Kurz.



# SCAllights

## Künstliche Intelligenz für Medizin- und Biowissenschaften

**Dezember 2019** Prof. Dr. Holger Fröhlich leitet seit Dezember 2019 die neu gegründete Forschungsgruppe »KI und Data Science« im Geschäftsfeld *Bioinformatik*. Durch die Kombination von intelligenter Datenanalyse und domänenspezifischem Wissen sollen neue Erkenntnisse gewonnen werden, die auch die Behandlung von Patienten verbessern. Fröhlich forschte unter anderem am Deutschen Krebsforschungszentrum in Heidelberg und beim Unternehmen UCB-Pharma an Methoden des Maschinellen Lernens und der Künstlichen Intelligenz in Biologie und Medizin. 2010 folgte er einem Ruf auf eine Professur ans Bonn-Aachen International Center for Information Technology (b-it) der Universität Bonn. Dort leitet er die Gruppe *Biomedical Data Science*.



## Neue Gesichter in Kuratorium und Institutsleitung



**Mai 2020** Herzlich begrüßte Institutsleiter Prof. Dr. Michael Griebel auf der Sitzung des Kuratoriums Prof. Dr. Petra Mutzel, die neu in dieses Gremium berufen wurde. Prof. Mutzel ist die wissenschaftliche Leiterin des *High Performance Computing and Analytics Lab* im *Digital Science Center* der Universität Bonn. Sie ist außerdem Inhaberin des Informatik-Lehrstuhls »Computational Analytics«. Neuer stellvertretender Institutsleiter von SCAI ist Prof. Dr. Marc Alexander Schweitzer. Er tritt die Nachfolge von Carl Vogt an, der in den Ruhestand eingetreten ist. Schweitzer leitet auch die Abteilung *Numerische Software* mit den Geschäftsfeldern *Schnelle Löser* und *Meshfree Multiscale Methods*.

## Daniel Oeltz leitet das Geschäftsfeld Computational Finance

**September 2020** Seit September 2020 ist Dr. Daniel Oeltz neuer Leiter des SCAI-Geschäftsfelds Computational Finance. Oeltz hat viele Jahre als Quantitativer Analyst im Handel zweier Banken und als Quantitativer Risikocontroller bei einem großen Asset-Manager gearbeitet. Anschließend war er acht Jahre lang als geschäftsführender Gesellschafter einer Beratungsfirma im Finanz- und Energiesektor tätig. Oeltz möchte Verfahren des Maschinellen Lernens und der Künstlichen Intelligenz zur Bewertung, Risikorechnung und Portfoliooptimierung im Finanz- und Energiesektor weiterentwickeln. Dabei stehen Fragestellungen zur Interpretierbarkeit, Robustheit und Flexibilität im Fokus der geplanten Forschungs- und Entwicklungsaktivitäten.



# SCAllights

## Virtuelle Messe zeigt Highlights der Fraunhofer-Forschung

**Oktober 2020** Mit einem Stand und einem Vortrag hat sich SCAI auf der virtuellen Fraunhofer-Hausmesse präsentiert, den »Fraunhofer Solution Days«. Ziel der Veranstaltung war es, mehr Kontakte zu Neukunden aufzubauen, um die Folgen abgesagter Messen zu kompensieren. SCAI zeigte zwei Exponate: die Entwicklung von Softwarestandards in Workflows des virtuellen Engineerings (Geschäftsfeld Multiphysics) und das interaktive Spiel HEAD (HEAr the Difference) aus dem Geschäftsfeld Numerische datenbasierte Vorhersage. Bei letzterem geht es darum, ob Mensch oder Algorithmus mittels Maschinellem Lernverfahren die Abnutzung eines Fräsgeräusches besser erkennen können: <https://head.scai.fraunhofer.de>



## Künstliche Intelligenz und Maschinelles Lernen für die Industrie



**April 2021** Auf der digitalen Hannover-Messe zeigte Fraunhofer SCAI Exponate aus den Bereichen Künstliche Intelligenz (KI) und Maschinelles Lernen. Im Projekt ManuBrain unterstützt SCAI Unternehmen beim Aufbau und Verständnis leistungsfähiger Datenanalyse-Infrastrukturen und hilft bei der Analyse und dem Verständnis domänenspezifischer KI-Modelle. Kernkompetenzen sind die Entwicklung von Methoden zur Anomalieerkennung und die gezielte Anpassung und Implementierung für industrielle Anwendungsfälle. Die präsentierte Software SimCompare dient der Erkennung von Auffälligkeiten in Deformationen, die in Finite-Elemente-Simulationsläufen für die Crashworthiness-Analyse auftreten.

## SCAI-Cyber-Café sorgt in Corona-Pandemie für Austausch

**2020/2021** Das SCAI-Café ist eine institutsinterne Vortragsreihe zur Vorstellung aktueller Forschungsarbeiten. Da sich die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter seit März 2020 infolge der Corona-Pandemie überwiegend im Homeoffice befinden und der persönliche Austausch eingeschränkt ist, wandelte sich die Vortragsreihe von einer Präsenz- zur Online-Veranstaltung – mit hoher Resonanz im Institut. Zu den Themen gehörten unter anderem SCAI-Forschungsprojekte zur Bekämpfung von Corona, Algorithmen für die Energiewende, Maschinelles Lernen für industrielle Anwendungen, selbstlernende und robuste Kopplungsmethoden, schnelle Algorithmen für die Finanzindustrie und Digitale Zwillinge in der Werkstoff- und Fertigungsindustrie.





# Ausgewählte Softwarelösungen



**Optimierte 3D-Verpackungsplanung**

PackAssistant ist die führende Software zur optimierten Verpackung baugleicher Bauteile in Containern. Mit PackAssistant kann die exakte 3D-Anordnung von Teilen mit komplexen Formen bereits in der Konstruktionsphase berechnet und dargestellt werden.  
[www.packassistant.de](http://www.packassistant.de)

**AUTO NESTER-T**

**Automatische Schnittbild-generierung**

Das Softwarepaket AutoNester-T optimiert die automatische Anordnung von Schnittbildern auf Stoffbahnen, Metall, Holz, Pappe oder Glas. Die Software verschachtelt die Teile optimal und minimiert so den Verschnitt.  
[www.scai.fraunhofer.de/autonester](http://www.scai.fraunhofer.de/autonester)

**AUTO PANEL SIZER**

**Optimierte Schnittpläne für Platten-aufteilsägen**

AutoPanelSizer ermittelt Schnittpläne für die Produktion rechteckiger Teile aus rechteckigem Grundmaterial und minimiert dabei Verschnitt, Produktionszeiten und Fertigungskosten. Es werden nur Schnittpläne erzeugt, die mit geradlinigen, durchgehenden (Guillotine-)Schnitten gefertigt werden können.  
[www.scai.fraunhofer.de/autopanelSizer](http://www.scai.fraunhofer.de/autopanelSizer)

**AUTO BAR SIZER**

**Optimierte Schnittpläne für den Zuschnitt von Stahlprofilen**

AutoBarSizer ermittelt optimierte Schnittpläne für den Zuschnitt von Stahlprofilen und anderem Stangenmaterial (Langgut) in kürzere Teile (Fixmaße). Die generierten Lösungen zeichnen sich durch einen hohen Material-nutzungsgrad (Ausnutzung, Ausbeute) aus, Schnittverluste werden minimiert.  
[www.scai.fraunhofer.de/autobarsizer](http://www.scai.fraunhofer.de/autobarsizer)



**Automatische Produktionsplanung**

CutPlanner ist ein Softwarepaket zur automatischen Produktionsplanung (»Cut Order Planning«) in der Textil verarbeitenden Industrie. CutPlanner erstellt im Auftrag eines Kunden einen Schnittplan für ein Bekleidungsstück, einschließlich verschiedener Größen, Stoffarten oder Farben.  
[www.scai.fraunhofer.de/cutplanner](http://www.scai.fraunhofer.de/cutplanner)



**Kopplung von Simulations-programmen**

MpCCI koppelt Simulationsprogramme und löst auf diesem Weg multidisziplinäre Probleme. MpCCI unterstützt die führenden industriellen Simulationswerkzeuge.  
[www.mpcci.de](http://www.mpcci.de)



**Berücksichtigung der Herstellung von Kfz-Bauteilen in Crash-Simulationen**

Der MpCCI Mapper verknüpft die Simulation des Herstellungsprozesses von Kfz-Bauteilen (Umformung, lokale Wärmebehandlung, Fugen) mit der Crash-Simulation und verbessert so die Aussagekraft von Crash-Berechnungen.  
[www.mpcci.de/mapper](http://www.mpcci.de/mapper)



**Dateninterpolation zwischen CFD- und FEM-Rechennetzen**

Der MpCCI FSIMapper übernimmt die Aufgabe der Dateninterpolation zwischen CFD- und FEM-Rechennetzen, auch für unterschiedliche Netzfeinheit und -ordnung.  
[www.mpcci.de/fsimapper](http://www.mpcci.de/fsimapper)



**Algebraische Mehrgitterverfahren**

SAMG ist ein Softwarepaket für die hocheffiziente numerische Lösung großer Gleichungssysteme. Solche Systeme kommen etwa in der Strömungs- und Strukturmechanik, der Ölreservoir- und Grundwassersimulation, der Prozess- und Gerätesimulation oder der Schaltungssimulation vor.  
[www.scai.fraunhofer.de/samg](http://www.scai.fraunhofer.de/samg)



**Simulation und Optimierung von Energietransport-netzen**

MYNTS ist ein multiphysikalischer Netzsimulator für die Analyse und Optimierung von Stromkreisen, Gas- und Energietransport und Wasserverteilung. Anwender können Teilnetze und einzelne spezielle Elemente programmieren.  
[www.scai.fraunhofer.de/mynts](http://www.scai.fraunhofer.de/mynts)



**Identifikation von Gen- und Proteinennamen**

Das Software-Tool ProMiner identifiziert und normalisiert die Namen von Genen und Proteinen in der wissenschaftlichen Literatur. Diese Identifikation basiert auf automatisch generierten Wörterbüchern. ProMiner kann mit voluminösen Lexika, komplexen Thesauri und großen expertengesteuerten Vokabularen umgehen.  
[www.scai.fraunhofer.de/prominer](http://www.scai.fraunhofer.de/prominer)



**Knowledge Discovery für die Life Sciences**

SCAIVIEW ist eine Knowledge-Discovery-Software für die Life Sciences. Sie erlaubt das schnelle Auffinden aggregierter Informationen aus großen Textmengen. Dazu integriert SCAIVIEW die Information von ProMiner und erlaubt eine semantische Suche.  
[www.scai.fraunhofer.de/scaiview](http://www.scai.fraunhofer.de/scaiview)



**Vergleich ähnlich diskretisierter Finite-Element-Modelle**

ModelCompare ist ein Plug-In für Pre- und Postprocessing-Werkzeuge der Finite-Element-Methode (FEM). ModelCompare vergleicht zwei ähnlich diskretisierte FE-Modelle und identifiziert ihre Unterschiede in Geometrie (Mesh), Material und Dicke.  
[www.scai.fraunhofer.de/modelcompare](http://www.scai.fraunhofer.de/modelcompare)



**Automatische Ereigniserkennung für Crash-Simulationen**

SimCompare ist ein Werkzeug zur Erkennung von Ereignissen wie Anomalien oder starken Variationen von Deformationen, die in den Ergebnissen ähnlicher Simulationsläufe für die Crashworthiness-Analyse mit Hilfe von FE-Modellen auftreten.  
[www.scai.fraunhofer.de/simcompare](http://www.scai.fraunhofer.de/simcompare)



**Numerische Simulation in der Moleküldynamik**

Tremolo-X ist ein massiv paralleles und hocheffizientes Softwarepaket zur numerischen Simulation in der Moleküldynamik. Es wurde erfolgreich in zahlreichen Anwendungsgebieten eingesetzt, etwa in Nanotechnologie, Materialwissenschaft, Biochemie oder Biophysik.  
[www.tremolo-x.com](http://www.tremolo-x.com)



**Simulationswerkzeug für komplexe Geometrien**

MESHFREE ist ein Software-Tool für Strömungs- und Kontinuumsmechanik, das gemeinsam mit dem Fraunhofer-Institut ITWM entwickelt wurde. MESHFREE eignet sich besonders gut zur Simulation beweglicher Geometrielemente, freier Oberflächen und großer Deformationen.  
[www.meshfree.eu](http://www.meshfree.eu)



Die Softwarepakete von Fraunhofer SCAI werden von der scapos AG vertrieben: [www.scapos.com](http://www.scapos.com)

# Bioinformatik

Der Kampf gegen SARS-CoV-2 bestimmte seit Frühjahr 2020 die Arbeit im Geschäftsfeld Bioinformatik maßgeblich. Das gesamte Know-how, das seit vielen Jahren für die Entwicklung wissensbasierter Modelle für neurodegenerative Erkrankungen eingesetzt wird, wurde jetzt für die Bekämpfung der Corona-Pandemie aktiviert.

Die Forschungsarbeiten im Geschäftsfeld *Bioinformatik* repräsentieren die gesamte datenbasierte Wertschöpfungskette translationaler biomedizinischer Forschung in Wissenschaft und Wirtschaft. Automatisierte Verfahren extrahieren biomedizinisches Wissen aus der Fachliteratur und stellen es in suchbarer, strukturierter Form bereit. Semantische Technologien helfen dabei, komplexes biologisches und medizinisches Wissen in umfangreichen Wissensgraphen darzustellen. Diese computerlesbaren Modelle bilden ganze medizinische Indikationsgebiete ab. Ein Beispiel dafür ist der Komplex neurodegenerativer Erkrankungen wie Alzheimer oder Parkinson. Die wissensbasierten Modelle dienen dann dazu, patientenbezogene Daten zu interpretieren, zu modellieren und individualisierte Vorhersagen zu treffen (Stichwort: Präzisionsmedizin).

Ein weiteres Forschungsthema sind datengetriebene Modelle in der Wirkstoffentwicklung. Hier kommen Big-Data-Architekturen und moderne Verfahren des Maschinellen Lernens und der Künstlichen Intelligenz (KI) zum Einsatz.

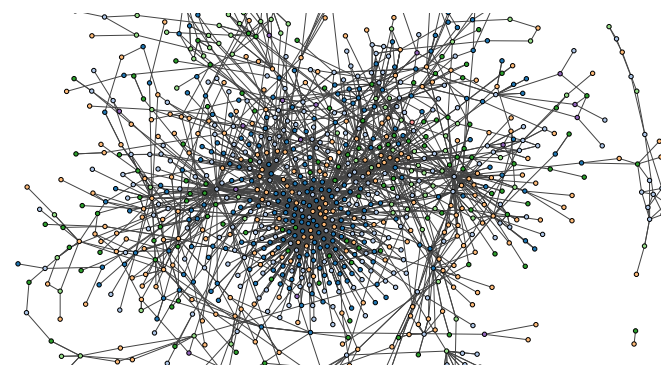
Besonders spannend wird es sowohl in der Wissenschaft als auch in der industriellen Anwendung, wenn daten- und wissensgetriebene Ansätze kombiniert werden (Stichwort: »hybrid AI«). Diese Arbeiten stoßen auf großes Interesse bei Pharma- und Biotechnologie-Unternehmen. Die Gesundheitsforschungsindustrie (von Biotech über Pharma bis zu eHealth) investiert massiv in das Thema »KI in der Biomedizin«.

Das Geschäftsfeld arbeitet eng mit Partnern aus der Industrie, einschließlich kleiner und mittlerer Unternehmen, zusammen, um deren Wettbewerbsfähigkeit durch den Transfer von Wissen und Technologie aus der akademischen Forschung in

die industrielle Anwendung zu verbessern. Die kooperativen Forschungs- und Entwicklungsprojekte bieten Lösungen für die pharmazeutische Industrie, die Biotech-Industrie und die Softwareindustrie der Biowissenschaften.

## Knowledge Space zu COVID-19 bietet Orientierung in der Datenflut wissenschaftlicher Publikationen

Im Frühjahr 2020 entstand mit dem Auftreten der Corona-Pandemie der Bedarf, möglichst rasch alle verfügbaren Informationen über diese neue Erkrankung zu sammeln, zu strukturieren und so für die Behandlung nutzen zu können. In einer großen Kraftanstrengung gelang es in wenigen Wochen, die Website »[covid19-knowledgespace.de](https://covid19-knowledgespace.de)« zu erstellen. Mit dieser Website bietet SCAI – gemeinsam mit den Fraunhofer-Instituten IAIS und ITMP, dem Informationszentrum Lebenswissenschaften ZBMED und weiteren Forschungspartnern – einen neuartigen Wissensraum mit Analysewerkzeugen und Informationen zu COVID-19. Zentrale Angebote sind der Biomedical Knowledge Miner



Schematische Darstellung eines Wissensgraphen zu COVID-19

»BiK>Mi«, die Knowledge-Discovery-Software »SCAIView«, ein Ursache-Wirkungsmodell zu SARS-CoV-2 und eine Terminologie zu COVID-19. Ziel dabei ist es, die schwierige und aufwendige Entwicklung von Wirkstoffen und Medikamenten zu beschleunigen.

## Projekt COPERIMOpus: individuelles Risiko einer Infektion besser einschätzen

Die am Projekt COPERIMOpus beteiligten Fraunhofer-Institute SCAI, ITMP, IAIS, IGD, MEVIS und IKTS wollen durch eine rationale, datengetriebene Modellierung individuelle Risikoeinschätzungen bei COVID-19 ermöglichen. Ziel ist es, Prognosen von Krankheitsverläufen zu verbessern und personalisierte Therapien anhand objektiver normierter Kriterien zu optimieren. Somit trägt das Projekt dazu bei, ein Leben mit der Pandemie zu ermöglichen und zur wirtschaftlichen und gesellschaftlichen Normalität zurückzukehren.

Für die mathematische Modellierung werden eigene, in Partnerschaften generierte oder von Dritten publizierte internationale Daten genutzt. Diese Datenbasis wird in ein lernendes KI-basiertes Ökosystem überführt, das eine personalisierte Risikoeinstufung vornimmt.

COPERIMOpus soll Teil des von der Charité koordinierten »Nationalen Forschungsnetzwerks der Universitätsmedizin zu COVID-19« werden, mit dem Ziel, Leitlinien für Behandlungsstrategien auch für kommende Pandemien zu entwickeln. Es wäre das erste Beispiel für ein umfassendes, multidisziplinäres und integratives Risikomodell.

## Projekt DIGIPD: für eine bessere personalisierte Behandlung der Parkinson-Krankheit

Das von SCAI koordinierte europäische Verbundprojekt DIGIPD untersucht, inwiefern mit Hilfe digitaler Techniken (Sensorik, Spracherkennung, Erkennung der Gesichtsmimik) eine präzisere und individualisierte Diagnose und Prognose der Parkinson-Erkrankung möglich ist. Die Ergebnisse von DIGIPD könnten von Ärzten zur Anpassung der Behandlung genutzt werden. Darüber hinaus können Pharmaunternehmen Patienten, deren Parkinson-Erkrankung einen ähnlichen Verlauf nimmt, zu Gruppen zusammenfassen und so die Chancen erhöhen, dass klinische Studien zur Entwicklung neuer und besserer Medikamente beitragen.

Da für die Arbeiten in DIGIPD KI-Methoden unter Verwendung persönlicher Daten zum Einsatz kommen, beinhaltet das Projekt auch eine Analyse der rechtlichen Situation. Patientinnen und Patienten werden über strukturierte Interviews mit einbezogen.

DIGIPD hat eine Laufzeit von drei Jahren und startet im Mai 2021. Das Projekt wird im Rahmen des europäischen ERA-Netzes zur personalisierten Medizin, ERA PerMed, gefördert. Die Förderung des deutschen Anteils am Projekt erfolgt durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung. DIGIPD wird mit rund 1,6 Millionen Euro gefördert.

### Kontakt

Prof. Dr. Martin Hofmann-Apitius  
Telefon +49 2241 14-4103  
[martin.hofmann-apitius@scai.fraunhofer.de](mailto:martin.hofmann-apitius@scai.fraunhofer.de)  
[www.scai.fraunhofer.de/bio](http://www.scai.fraunhofer.de/bio)



# Optimierung

Die Lösung komplexer Optimierungsprobleme ist eine ständige Herausforderung in der industriellen Praxis. Methoden der mathematischen Optimierung und der diskreten Simulation helfen, Material oder Transport- und Lagerkapazitäten effizienter zu nutzen. Sie kommen auch zum Einsatz, um Produktionsanlagen mit höchster Effizienz zu betreiben und so Kosten zu sparen und Umweltbelastungen zu reduzieren.

Fraunhofer SCAI entwickelt anspruchsvolle Softwarelösungen für Optimierungsprobleme, die täglich in Industrie und Handel sowie beim Transport auftreten:

- **Packungsprobleme:** Bauteileanordnung, Containerbeladung
- **Zuschnittprobleme:** Textilien, Leder, Bleche, Holz, Glas, Composites, Schaumstoff, Profile/Stangenware,
- **Logistik:** Transportoptimierung, Tourenplanung, Standortwahl
- **Produktion:** Maschinenbelegung, Arbeitspläne, Materialverbrauch
- **Planung:** Flächen- und Raumnutzung

## Optimale Befüllung von Behältern

Eine optimale Behälterbefüllung spart Zeit und Geld, wenn es um Transporte und Lagerkapazitäten geht. Deshalb tüfteln erfahrene Verpackungsplaner mitunter lange beim Verpacken von Bauteilen mit komplexen Geometrien – und erzielen dennoch häufig keine optimalen Lösungen. Die Software **PackAssistant** berechnet die ideale Befüllung von (Lager- oder Transport-) Behältern mit baugleichen Teilen in wenigen Minuten. PackAssistant unterstützt das Verpacken mit festen oder flexiblen Zwischenlagen, mit Fächern oder in Stapeln sowie die Simulation von Schüttgütern. Die Software wird weltweit von zahlreichen Herstellern und Zulieferern, insbesondere in der Automobilindustrie, eingesetzt.

## Optimierte Schnittbilder und Schnittpläne

**AutoNester** ist ein Softwarepaket zur automatischen Erstellung von Schnittbildern auf Stoffen, Blech, Holz oder

anderen Materialien. Die Software findet weite Anwendung in der Bekleidungs- und Polstermöbelindustrie. AutoNester ist in der Lage, eine beliebige Menge von Teilen in sehr kurzer Zeit optimal zu verschachteln, den Materialverschnitt zu minimieren und dabei verschiedene Vorgaben zu beachten. Die von AutoNester erreichte Materialausnutzung ist vergleichbar mit der erfahrener Experten. Die AutoNester-Software ist als Bibliothek (DLL) organisiert und kann als Entwicklungswerkzeug verwendet werden kann. Softwareentwickler können AutoNester in ihre Software (etwa CAD-Systeme) integrieren. Eine Version für die automatische Erstellung von Schnittbildern auf Lederhäuten ist ebenfalls verfügbar.

**AutoPanelSizer** ermittelt optimierte Schnittpläne für die Produktion rechteckiger Teile aus rechteckigem Grundmaterial und minimiert dabei Verschnitt, Produktionszeiten und Fertigungskosten. Es werden nur Schnittpläne erzeugt, die sich mit geradlinigen, durchgehenden (Guillotine-)Schnitten fertigen lassen. Bei verketteten Anlagen wird auch die Anzahl der vorhandenen Sägeebenen berücksichtigt. Dabei adressiert die Software gängige Sägetechnologien vor allem der Holz-, aber auch der Glas-, Metall- und Kunststoffindustrie.

**AutoBarSizer** generiert optimierte Layouts für das Schneiden von Stahlprofilen (zum Beispiel Metallträger) und anderem Stangenmaterial in kürzere Teile. Die erzeugten Lösungen minimieren Schnittverluste. Dabei werden konfigurierbare Nebenbedingungen eingehalten. Verschiedene Parameter erlauben dem Planer, einen Kompromiss zwischen Materialausnutzung und dem organisatorischen Mehraufwand durch die Erzeugung wiederverwendbarer Reste zu finden. Auf Gehrung geschnittene Teile optimiert AutoBarSizer durch eine Verschachtelung (Verzahnung) der Teile. AutoBarSizer kommt bei der Planung in Walzwerken, bei Stahlherstellern,

in der Holz verarbeitenden Industrie sowie bei Herstellern und Verarbeitern von Leisten aller Art zum Einsatz. Die Berechnungen für eine Schnittplan üblicher Größe dauern nur wenige Sekunden bis maximal einige Minuten.

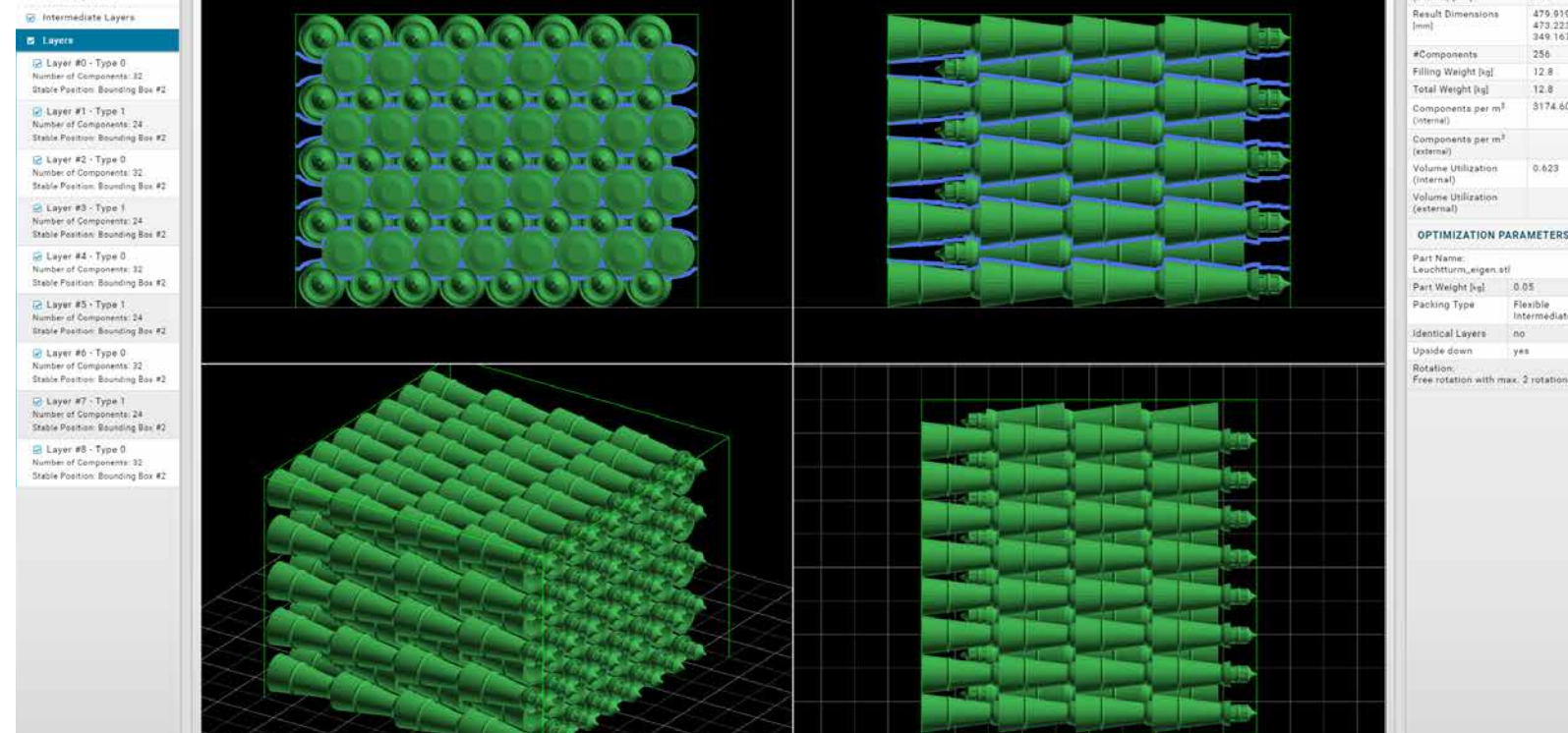
## Produktionsplanung in der Textilindustrie

**CutPlanner** ist ein Softwarepaket zur automatischen Produktionsplanung in der textilverarbeitenden Industrie. Ausgehend von einer Kundenbestellung für ein Kleidungsstück in verschiedenen Größen und aus verschiedenen Stoffen erstellt es einen »Cut Plan«, eine Zusammenstellung von Größen auf Schnittbildern. Für jedes dieser Schnittbilder wird die zur Erfüllung der geforderten Bestellmenge notwendige Lagenzahl berechnet. Ziel von CutPlanner ist die Minimierung der gesamten Kosten für den verwendeten Stoff (Material) und die Produktion.

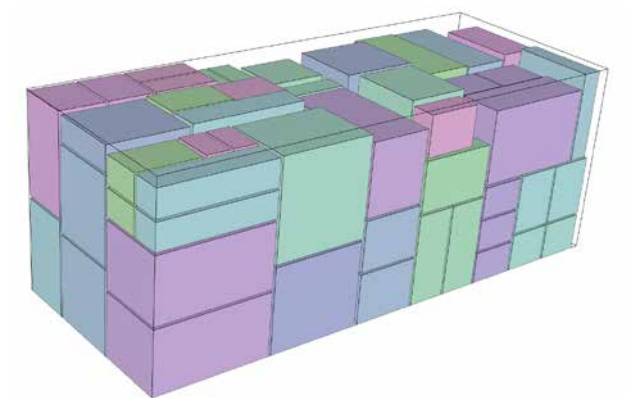
## Optimale Anordnung quaderförmiger Teile

**CuboNester** ist das jüngste Produkt des Geschäftsfelds. Wie PackAssistant optimiert CuboNester Anordnungen in 3D, ist dabei aber spezialisiert auf den Fall quaderförmiger oder annähernd quaderförmiger Teile. Dabei kann es eine Vielzahl verschiedener Teile in einer Anordnung kombinieren. CuboNester ordnet also Boxen in einer oder mehreren größeren Boxen optimiert an. CuboNester gibt es in den Varianten CuboNester-P fürs Packen und CuboNester-C fürs Schneiden.

CuboNester-P kann zum Beispiel bei der Paketplanung für zerlegte Möbel oder beim Packen von heterogen befüllten



Die aktuelle Version von PackAssistant kann automatisch stabile Lagen finden, bei denen Teile innerhalb einer Lage ineinander geschoben werden können.



Zuschnitt eines Schaumstoffblocks in verschiedene Typen kleinerer Blöcke

Versandkartons im Online-Einzelhandel eingesetzt werden. Dabei orientiert man sich an einem konfigurierbaren Regelwerk, das die erlaubten Pakete beschreibt.

CuboNester-C adressiert den Zuschnitt von Metall- oder Schaumstoffblöcken. Es werden nur Schnittpläne erzeugt, die sich mit geradlinigen, durchgehenden (Guillotine-)Schnitten fertigen lassen. Im Lager vorhandene oder bei der Produktion neu entstehende wiederverwendbare Reste können in die Optimierung einbezogen werden. Fehlstellen im Material können erfasst und bei der Produktion umgangen werden.

## Kontakt

Dr. Ralf Heckmann  
 Telefon +49 2241 14-4105  
 ralf.heckmann@  
 scai.fraunhofer.de  
 www.scai.fraunhofer.de/opt

# Multiphysics

Aeroelastizität in der Flugzeugkonstruktion, Verformungen und thermische Belastungen in Turbomaschinen, Wärmemanagement im Automobil, In-vitro-Toxikologie und komplexe Fertigungsabläufe – all diese Anwendungen haben eines gemeinsam: Sie nutzen numerische Simulationen, bei denen mehrere physikalisch-technische Disziplinen zusammenspielen.

Der Begriff Multiphysics bezeichnet Simulationsanwendungen, die verschiedene physikalische Disziplinen kombinieren, etwa Fluid-Struktur-Interaktion oder auch die Kombination von Simulationen für einzelne Fertigungsschritte mit der anschließenden Bewertung des erzeugten Produktes. Je nach Anwendung kann die Interaktion der einzelnen Simulationsdisziplinen durch bidirektionale Simulationskopplungen oder durch einen dateibasierten Ergebnisaustausch realisiert werden.

Ein Schwerpunkt im Geschäftsfeld *Multiphysics* ist die Entwicklung von Methoden und Softwarelösungen für Aufgabenstellungen, bei denen Effekte aus mehreren physikalischen Disziplinen berücksichtigt werden müssen. Kern dieser Entwicklungen sind das MpCCI CouplingEnvironment und die MpCCI Mapping-Lösungen. Dieses Softwareportfolio bietet eine herstellerunabhängige Lösung für die Simulationskopplung und den dateibasierten Datentransfer und unterstützt kommerzielle Codes und Forschungscode aus vielen Anwendungsdisziplinen. MpCCI verfügt über eine offene Schnittstelle zu Anwendungsprogrammen (API), die zur Anbindung interner oder neuer kommerzieller Codes verwendet werden kann.

SCAI arbeitet mit zahlreichen Anbietern kommerzieller Simulationsprogramme und Entwicklern universitärer Forschungscode zusammen. Bei der Weiterentwicklung von MpCCI kooperiert das Institut mit den weltweit führenden Softwareanbietern.

Zu den Aufgaben im Geschäftsfeld *Multiphysics* zählt die ständige Erweiterung und Verbesserung der MpCCI-Schnittstellen-Software und die Entwicklung von Kopplungslösungen für neue Multiphysics-Anwendungsfelder. Hierzu

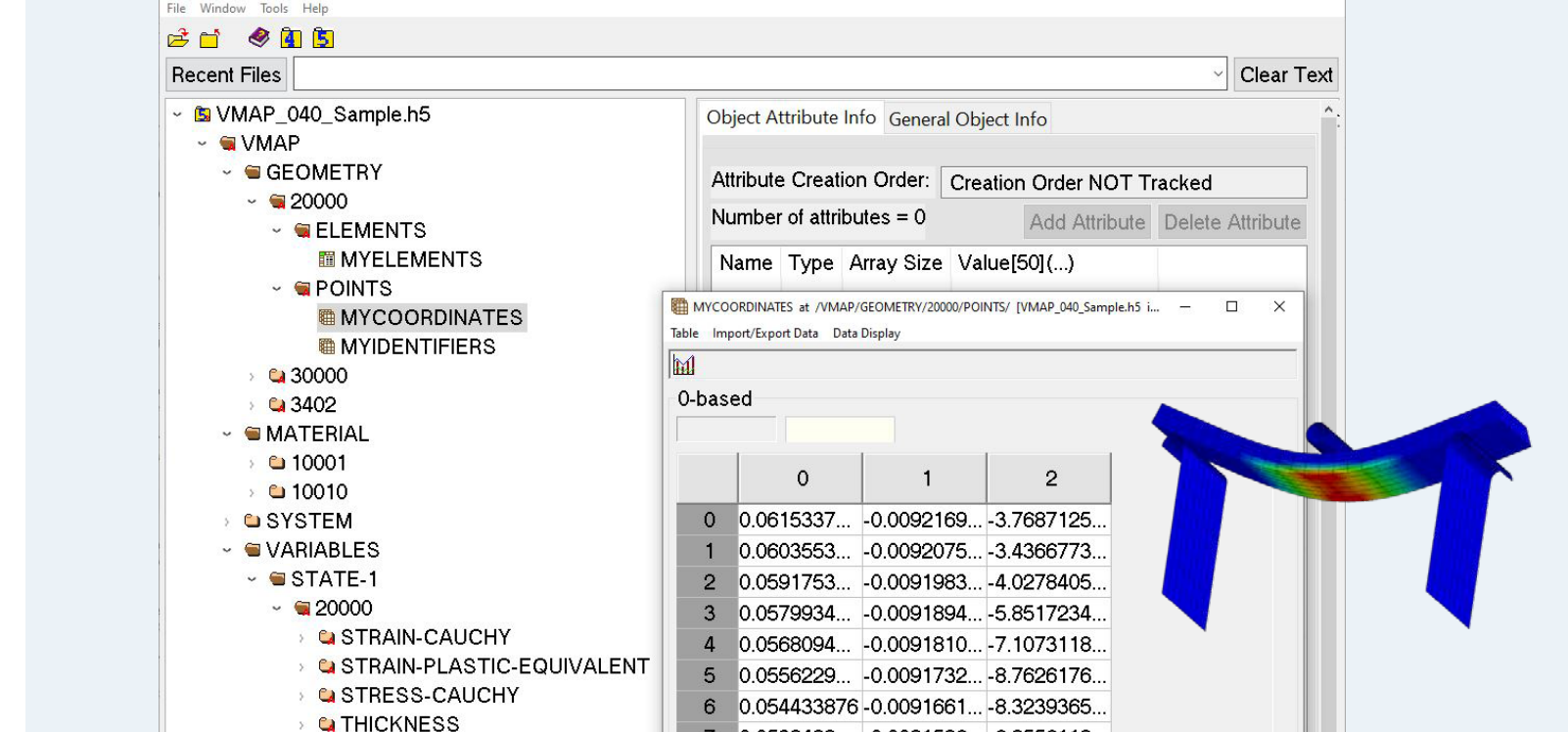
gehören unter anderem die Entwicklung und Nutzung von Hochleistungskeramiken in Gasturbinen (Verbundprojekt BonoKeram, gefördert durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie) oder die Entwicklung eines innovativen Prüfsystems zur Untersuchung der toxischen Effekte luftgetragener Nanomaterialien im Verbundprojekt NanoINHAL, gefördert durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF).

Arbeiten mit methodisch-algorithmischen Schwerpunkten betreffen die Entwicklung selbstlernender und robuster Kopplungsverfahren für den Einsatz in Fertigungsprozessen oder die Nutzung des Potenzials digitaler Zwillinge am Beispiel der großserienfähigen Hybrid-Spritzgusstechnologie (Projekt DigitalITPC). Genutzt werden zudem hybride Modellierungsansätze, die neben numerischen Verfahren auch datenbasierte Methoden einsetzen, und domänen-orientierte Ontologien zur Organisation von Informationen aus unterschiedlichen Datenquellen im Umfeld des Material- und Fertigungs-Engineerings.

## Anwendungen

Multiphysics-Probleme treten in vielen Anwendungen auf:

- Aeroelastizität und Maschinenbau (Aerodynamik bei Rennfahrzeugen, aeroelastische Effekte in der Luftfahrt, Verformung von Turbinenschaufeln)
- Fahrzeug- und Maschinendynamik (extreme Belastungen einzelner Komponenten, dynamisches Verhalten flexibler Bauteile unter Strömungsbelastung, etwa bei Ventilkappen oder Schläuchen)
- Thermische Spannungsanalyse in Fahrzeugen, Motoren oder Turbinen (Einfluss von Heißströmungen auf Bauteile)



VMAP-Dateien sind hierarchisch strukturiert. Das Beispiel zeigt einen virtuellen Biegeversuch eines Bauteils.

- Wärmemanagement im Automobilbau (Kombination von numerischer Strömungsmechanik mit effizienten Strahlungsmodellen, Gesamtfahrzeugmodelle)
- Elektrische Anlagen (dynamische Lasten und Vibrationen in Elektromotoren)
- Integrierte Prozessketten (komplexe Fertigungsprozesse für Karosseriekomponenten, Computer Aided Engineering)

## VMAP-Standard für CAE-Daten beschleunigt Workflows des virtuellen Engineering

Bisher haben fehlende Softwarestandards in virtuellen Engineering-Workflows und inkompatible Schnittstellen für den Transfer virtueller Daten nicht nur zusätzliche Kosten und aufwendige manuelle Anpassungen verursacht, sondern auch zu unflexiblen IT-Lösungen, Informationsverlusten und erheblichen Verzögerungen im gesamten Konstruktionsprozess geführt. Die Standardisierung von Material- und Datenschnittstellen im CAE ist daher für alle Industrie-segmente unerlässlich, in denen Simulationsprozesse zentral für die Produkt- und Prozessauslegung sind.

Abhilfe verspricht hier VMAP, ein neuer, herstellernerutraler Standard für die Speicherung von CAE-Daten. VMAP

verbessert die Interoperabilität von Softwarepaketen in Workflows des virtuellen Engineering. Entwickelt wurde VMAP im gleichnamigen europäischen Verbundprojekt (Laufzeit von August 2017 bis Oktober 2020). Der deutsche Teil des Projekts wurde durch das BMBF über das Cluster ITEA 3 der europäischen Forschungsinitiative EUREKA gefördert. Zu den Ergebnissen des Projekts zählen neben dem neuen Standard auch zahlreiche Fallstudien, etwa für das Spritzgießen von Kunststoffen oder für die Herstellung von Verbundwerkstoffen für Leichtbaufahrzeuge. Weitere Anwendungsfälle betreffen mehrstufige Fertigungsprozesse für Bauteile aus Hybridmaterial oder den integrativen Simulations- und Optimierungsworkflow für blasgeformte Kunststoffteile. Dabei wird auch die Berechnung von Eigenspannungen und Geometrieänderungen aufgrund von Schrumpfung und Verformung des Materials berücksichtigt.

Aufgrund der positiven Resonanz aus Industrie und Forschung wollen die Projektpartner im Frühjahr 2021 den VMAP Standards Community e.V. gründen. Interessierte Firmen können diesem Verein beitreten (siehe hierzu auch [www.vmap.eu.com](http://www.vmap.eu.com)). Ziel des Vereins ist es, den VMAP-Standard weiter zu verbreiten und ihn bei Bedarf weiter zu entwickeln.



## Kontakt

Dipl.-Inf. Klaus Wolf  
 Telefon +49 2241 14-4058  
[klaus.wolf@scai.fraunhofer.de](mailto:klaus.wolf@scai.fraunhofer.de)  
[www.scai.fraunhofer.de/mp](http://www.scai.fraunhofer.de/mp)



# Schnelle Löser

Steigende Rechnerkapazitäten erlauben immer komplexere Computersimulationen und verbessern so die Qualität innovativer Produkte. Simulation reduziert Entwicklungszeit, ersetzt Experimente und ermöglicht die Konstruktion besserer Prototypen bei geringeren Kosten. Die wachsenden Anforderungen an die Simulationsgenauigkeit führen zu erheblichen Steigerungen der Rechenzeiten.

Die Lösung großer linearer Gleichungssysteme mit vielen Millionen oder sogar Milliarden von Unbekannten ist der bei weitem zeitaufwendigste Teil für viele rechenzeitaufwendige Computersimulationen in unterschiedlichen Industrie-bereichen. Das Geschäftsfeld *Schnelle Löser* entwickelt hocheffiziente numerische Methoden zur optimalen und skalierbaren Lösung derartiger Gleichungssysteme.

Die SCAI-Bibliothek SAMG (Algebraic Multigrid Methods for Systems) enthält Algorithmen für die effiziente Lösung großer Gleichungssysteme. SAMG verwendet hierarchische Mehrgitterverfahren, die numerisch skalierbar sind. Das bedeutet, je größer die Gleichungssysteme sind, desto größer ist die Beschleunigung, die SAMG im Vergleich zu klassischen Lösungsverfahren erreicht. Diese Skalierbarkeit von SAMG führt in der industriellen Praxis zu deutlich kürzeren Berechnungszeiten und ermöglicht sehr komplexe Simulationen.

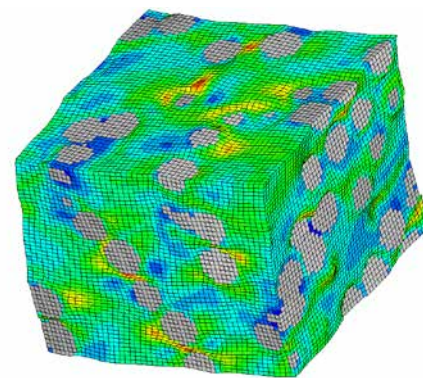
SAMG ist eine lizenzierte Softwarelösung für Kunden aus Industrie und Wissenschaft. Das Softwarepaket beinhaltet alle praxisrelevanten Mehrgitteransätze in optimierter Form. Effiziente Versionen für unterschiedliche Parallelrechnerarchitekturen sind erhältlich.

Zu den industriellen Einsatzfeldern von SAMG gehören Ölreservoirsimulation, Strömungs- und Strukturmechanik, Gießereitechnik, Grundwassersimulation (für die die spezielle Version SAMG-MODFLOW entwickelt wurde), hydrothermische Simulation, Prozesssimulation in der Halbleiterphysik und Schaltungssimulation.

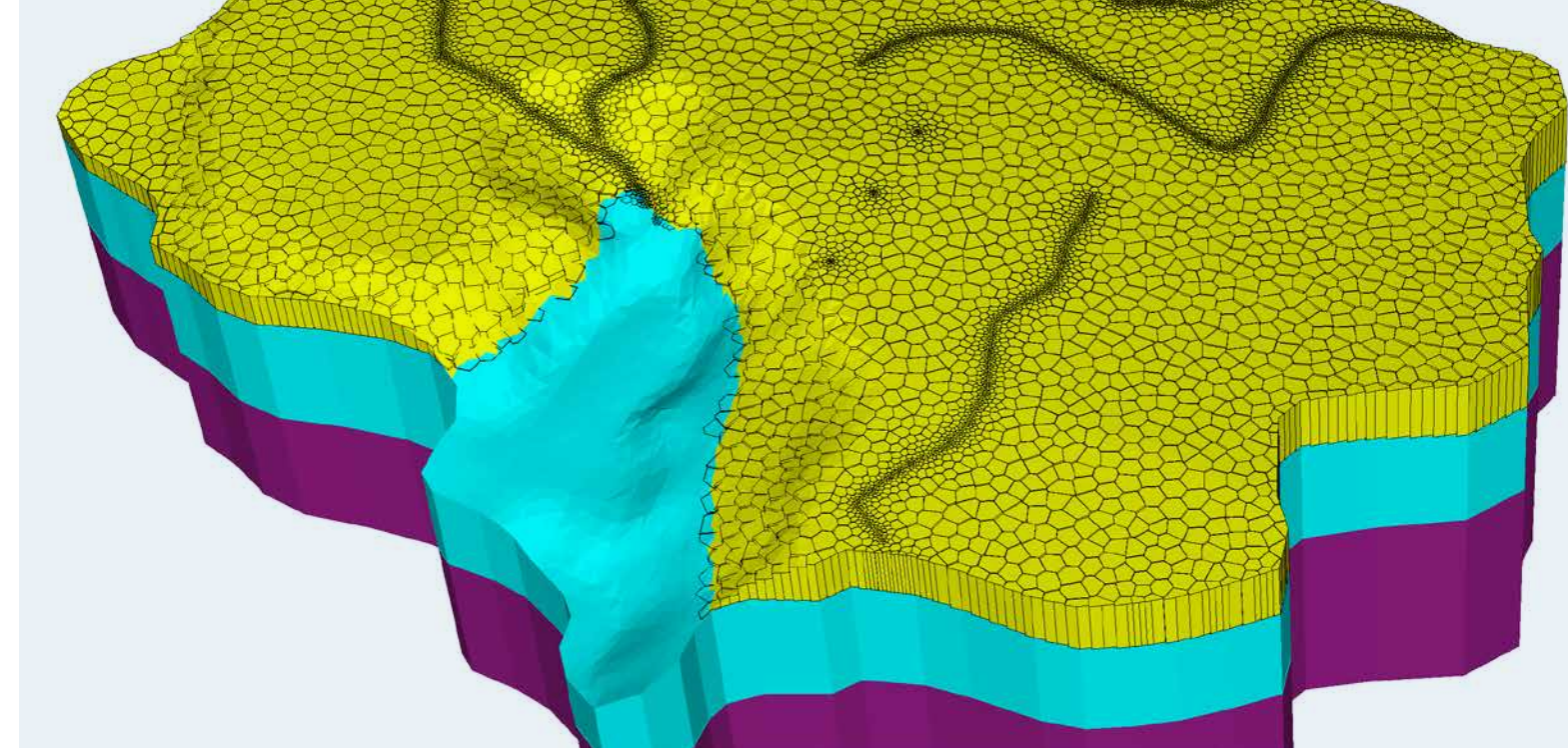
SAMG wird nach Kundenanforderungen ständig weiterentwickelt. Die Eigenschaften neuer Klassen von

Gleichungssystemen, die sich mit SAMG lösen lassen, werden unabhängig von der reinen Größe der Gleichungssysteme mathematisch immer komplizierter. Die numerische Forschung zur Erweiterung von SAMG ist daher ein kontinuierlicher Prozess. SCAI arbeitet hier mit weltweit führenden Experten (Marian Brezina, John Ruge, Klaus Stüben) zusammen. Aktuelle Projekte betreffen

- die Erweiterung von SAMG im Hinblick auf Gleichungssysteme mit rein algebraischen Nebenbedingungen,
- die Entwicklung spezieller problemangepasster Simulationswerkzeuge, die als Plugin-Erweiterungen für Standard-Simulationspakete geeignet sind (im Fokus steht hier die Erweiterung von Open-Source-Simulationspaketen in der mechanischen Verfahrenstechnik und Elektrotechnik in enger Verzahnung mit einer entsprechenden Löserchnittstelle für SAMG – hier sind Erweiterungen von OpenFOAM und CSC/Elmer in Arbeit),



*Materialdesign: Volumen-Element eines Reifens in der Simulation (SAMG-ELASTICITY und SAMG-CONSTRAINTS)*



*Diskretisierung eines geologischen Reservoirs (SAMG-OIL, SAMG-MODFLOW)*

- die Nutzung evolutionärer Lernverfahren für effiziente Batteriealterungs-Simulationen (in Kooperation mit dem Fraunhofer-Institut für Energiewirtschaft und Energiesystemtechnik IEE). Hier kommen Methoden des Maschinellen Lernens in der Steuerung des Verfahrens zur Lösung linearer Gleichungssysteme zum Einsatz. Dies ermöglicht die Nutzung effizienter Lösungsverfahren, ohne Einbußen in puncto Robustheit hinnehmen zu müssen. Die damit verbundenen Effizienzsteigerungen beschleunigen nicht nur bisherige Simulationen erheblich, sie ermöglichen auch eine wesentliche Verbesserung der Modellgenauigkeit.

## Einsatzfelder von SAMG

Ölreservoirsimulationen sind prinzipiell für die Anwendung algebraischer Mehrgitterverfahren gut geeignet. Allerdings sind vorbereitende Schritte und gezielte Anpassungen der AMG-Strategie in diesem Anwendungsfeld erforderlich, um algebraische Mehrgittermethoden erfolgreich einsetzen zu können.

Von besonderem Interesse für die Automobilindustrie ist eine spezielle Version des OpenFOAM-Softwarepakets für numerische Strömungsmechanik, in das SAMG integriert wurde. Ein wichtiger Aspekt dabei ist die parallele Skalierbarkeit von SAMG: Kunden können nun routinemäßig mit Konfigurationen von bis zu 8000 Prozessen rechnen.

Eine weitere für die Automobilindustrie interessante SAMG-Anwendung ist die Berechnung der Wärmeentwicklung im Innenraum von Autos bei Sonneneinstrahlung.

Zu den spezifischen Anwendungsbereichen, für die SAMG bestimmte Zusatzfunktionen und spezielle Schnittstellen bietet, gehören:

- Ölreservoirsimulation und Geomechanik (SAMG-OIL)
- Modellierung von Grundwasser (SAMG-MODFLOW)
- Elastizität (SAMG-ELASTICITY)
- Probleme mit Nebenbedingungen (SAMG-CONSTRAINTS)
- Big-Data-Anwendungen (SAMG-EIGEN)
- Gitterfreie Simulationen (MESHFREE)
- Hochparallele Strömungssimulation (SAMG-MPP)

## Optimale Unterstützung und Beratung von Kunden

Das SAMG-Team berät Kunden aus Industrie und Wissenschaft und führt auch Performance-Analysen für numerische Lösungsverfahren durch. Kunden erhalten Unterstützung bei der optimalen Integration von SAMG in ihre Anwendungen und bei der Wahl der optimalen, auf die jeweilige Anwendung zugeschnittenen Parametereinstellungen für SAMG.

### Kontakt

Dr. Hans-Joachim Plum  
Telefon +49 2241 14-4034  
hans-joachim.plum@  
scai.fraunhofer.de  
www.scai.fraunhofer.de/samg



# High Performance Computing

High Performance Computing (HPC) ist ein Wegbereiter für die enormen Erfolge des Maschinellen Lernens und der Analyse großer Datenmengen. HPC ist interdisziplinär, mit starken Bezügen zu Mathematik, Informatik, Naturwissenschaften, Technik und Wirtschaft. Bestandteil von HPC ist auch das Quantencomputing, bei dem auf Quantentechnologie basierende Rechner die Lösung äußerst komplexer Probleme möglich machen sollen.



Im Geschäftsfeld *High Performance Computing* entwickelt SCAI Lösungen, um rechenintensive Algorithmen schnell und effizient auf unterschiedlicher Hardware lauffähig zu machen. Das Spektrum der Zielarchitekturen reicht von eingebetteten Systemen über Multicore-PCs, Hochleistungs-Workstations mit Hardwarebeschleunigern und Grafikprozessoren bis hin zu traditionellen Upscaling-Supercomputern und den noch neuen Quantencomputern. Im Geschäftsfeld spielt zudem die Lösung von Optimierungsaufgaben in Logistik- und Produktionsprozessen in Echtzeit eine ständig wachsende Rolle.

Beim klassischen HPC gibt es zwei gegensätzliche Aspekte: die optimale Ausnutzung der Eigenschaften von Rechnerarchitekturen und die Minimierung der Menge an Code, der an die Hardwareigenschaften angepasst werden muss. Der Ansatz von SCAI besteht darin, die technischen Aspekte der Implementierung von der optimalen Anpassung an eine bestimmte Hardwarearchitektur zu trennen. Daher nutzt SCAI eigene Domänensprachenansätze und Compiler-Frameworks.

Dieser Ansatz eignet sich für Anwendungen in vielen Bereichen, etwa intelligente Maschinensteuerung, Satellitendatenanalyse oder komplexe Simulationsprogramme. Hier unterstützt SCAI Partner und Kunden bei der Optimierung von Anwendungen für aktuelle Hardwarearchitekturen. Ein Ziel dabei ist es, sicherzustellen, dass alle Softwareentwicklungen für einen nahtlosen Übergang auf zukünftige Hardwarearchitekturen vorbereitet sind.

Fraunhofer SCAI verfügt über eine leistungsfähige Rechnerinfrastruktur. Zum Angebot gehören auch HPC-Testsysteme, die Kunden zu Entwicklungszwecken einsetzen können.

## Quantencomputing

Quantencomputing hat das Potenzial, bestimmte Probleme, deren Lösung derzeit noch riesige Rechenzeiten benötigt, sehr schnell zu lösen. Hierzu gehören viele Klassen von Problemen aus der kombinatorischen Optimierung. Allerdings übersteigen die Anforderungen marktwirtschaftlich relevanter Aufgaben heute noch die Kapazitäten verfügbarer Quantenrechner. Optimistische Einschätzungen gehen jedoch davon aus, dass in wenigen Jahren der Einsatz von Quantenrechnern für diese Probleme zum Alltag gehören wird. Unternehmen, die sich nicht mit diesem Thema beschäftigen und Marktentwicklungen außer Acht lassen, laufen Gefahr, den Anschluss zu verlieren.

Dieses Zukunftsthema birgt für viele Branchen ein hohes Potenzial. SCAI ist daher in mehreren Forschungsinitiativen engagiert, etwa als Partner in der *Prioritäten Strategischen Initiative Quantentechnologie* der Fraunhofer-Gesellschaft und im *Fraunhofer-Kompetenzzentrum Quantencomputing*



Quantencomputer benötigen neue Algorithmen.

*Baden-Württemberg.* Der Schwerpunkt liegt auf der Entwicklung neuartiger Algorithmen für Quantencomputer. Dabei arbeitet SCAI mit den Fraunhofer-Instituten IAF, ILT, IAIS, ITWM und FOKUS zusammen. Hier sucht SCAI auch nach Lösungen auf der Basis von Field Programmable Gate Arrays (FPGA) und passenden Algorithmen. Dies bietet die Möglichkeit einer Brückentechnologie zwischen klassischem und quantenbasiertem Computing. Schon jetzt zeichnet sich ab, dass die noch in Entwicklung befindliche quanteninspirierte Technologie das Potenzial haben wird, mittelfristig Technologien des adiabatischen Quantenrechnens beziehungsweise des Quanten-Annealing in Bezug auf Performance und Energieeinsatz zu übertreffen. Innerhalb von SCAI arbeiten die Geschäftsfelder *High Performance Computing*, *Virtual Material Design*, *Numerische datenbasierte Vorhersage* und *Optimierung* gemeinsam an diesem Zukunftsthema.

## Optimierung von Logistik und Produktionsprozessen

Die dynamische Optimierung von Logistik- und Produktionsprozessen in Echtzeit steht ganz oben auf der Wunschliste vieler Firmen, die sich dadurch eine deutliche Kostenreduktion bei gleichzeitiger Verbesserung von Maschinenauslastung, Verteilung der Arbeitslast und kürzeren Lieferzeiten versprechen. Schon am Beispiel eines einfachen Warenlagers lässt sich zeigen, welche Optimierungsmaßnahmen wie ineinandergreifen und wie komplexe Prozesse schon für kleine Unternehmen handhabbar werden. Obwohl es für die Lageroptimierung einige Standardsoftwarepakete gibt, zeigen wissenschaftliche Untersuchungen, dass die individuellen Abläufe und das Layout des jeweiligen Lagers berücksichtigt werden müssen, um gute Ergebnisse zu erhalten.

Im Verbundprojekt ERTRaWOS entsteht eine integrierte Lösung für Warenlager im Nahrungsmittelbereich. Dabei fließen viele zu beachtende Nebenbedingungen in die Optimierungslösung mit ein. Diese Lösung entsteht mittels Nutzung einer neu geschaffenen Optimierungsplattform. Diese ist die Grundlage für maßgeschneiderte echtzeitfähige Optimierungslösungen in vielen Bereichen der Logistik, der Produktionsplanung (etwa dem Scheduling von Maschinenbelegungen) und dem Management von Lieferketten. Alle diese Lösungen lassen sich häufig in eine bestehende Infrastruktur wie ein Warehouse Management System und andere Werkzeuge integrieren. ERTRaWOS wird vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie gefördert.

Mit der in ERTRaWOS entwickelten Optimization Engine lassen sich unter anderem sogenannte Job-Shop-Scheduling-Probleme lösen. Im Gegensatz zu bisherigen Ansätzen ist sie nicht auf harte Nebenbedingungen beschränkt, sondern sie eignet sich auch für Kombinationen harter und weicher Nebenbedingungen, die in vielen Modellen industrieller Prozesse vorliegen: Beispiele sind chemische Anlagen und industrielle Anlagen zur Nahrungsmittelherstellung.

## Kontakt

Dr. Thomas Soddemann  
Telefon +49 2241 14-4076  
thomas.soddemann@  
scai.fraunhofer.de  
www.scai.fraunhofer.de/hpc



# Network Evaluation Technologies

Für die Nutzung erneuerbarer Energien sind effiziente und leistungsfähige Transportnetze für Gas, Strom und Wasser von großer Bedeutung. Smart Grids werden immer wichtiger, ebenso wie zukünftige Wasserstoff-Transportnetze. Die intelligente Vernetzung und Steuerung von Stromerzeugern, Speichern, Verbrauchern und Netzressourcen ist eine der großen wirtschaftlichen und ökologischen Herausforderungen.



Die im Geschäftsfeld *Network Evaluation Technologies* entwickelten Methoden und Softwarepakete eignen sich zur Modellierung, zur Simulation sowie zur Analyse und Optimierung von Netzwerken zum Transport von Gas, Wasser, Elektrizität, Fernwärme und Öl. Ihr Einsatzgebiet umfasst auch die Analyse von Messdaten zur Überwachung und Steuerung von Energienetzen und die Auslegung von Kühlkreisläufen in Rechenzentren und Bürogebäuden.

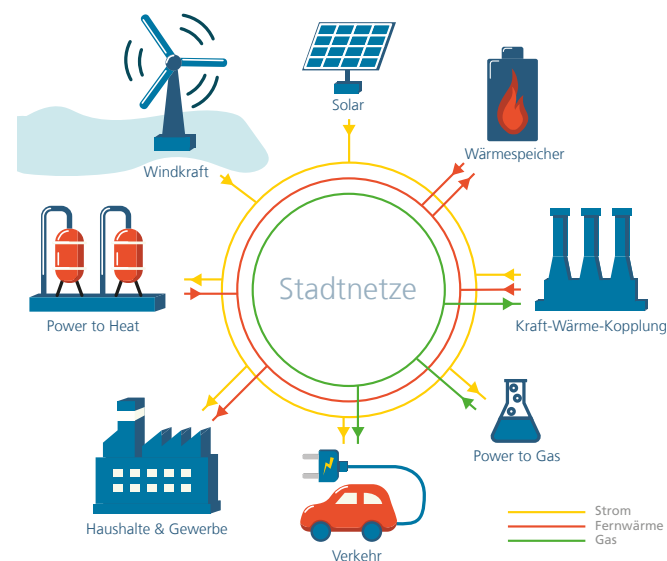
SCAI entwickelt und implementiert dazu Methoden aus numerischer Mathematik, Data Mining und Maschinellem Lernen. Das Geschäftsfeld nutzt zudem proprietäre patentierte Methoden zur statistischen Analyse und robusten Optimierung parameterabhängiger Ketten von (Simulations-)Prozessen.

## Software MYNTS modelliert Energienetze

Die Analyse und Optimierung ihrer Netze ist ein wesentlicher Wettbewerbsfaktor für Energieversorger und Großverbraucher. Zu diesem Zweck hat SCAI das Softwarepaket MYNTS (MultiPhysical NeTwork Simulator) entwickelt. Mit MYNTS können komplexe Netze geplant und ihr Verhalten im Betrieb vorhergesagt, analysiert und optimiert werden. Die Software modelliert Transportnetze für Energieträger oder Wasser. Die Simulation zeigt, wie sich Änderungen bestimmter Faktoren auf das Netz auswirken. Mit MYNTS lässt sich zum Beispiel berechnen, wie Temperaturschwankungen die Durchflussraten verändern und wie sich der Ausfall von Teilnetzen auf die anderen Netzkomponenten auswirkt. Das macht Energieumwandlung und Netzausbau für Netzbetreiber flexibler, spart Energie und Geld und erhöht zudem die Sicherheit. MYNTS ist auch für Netze, die Wasserstoff transportieren, geeignet.

Interessant ist die Software auch im Hinblick auf Smart Grids. Um den Herausforderungen einer Energieversorgung zu begegnen, die weitgehend von natürlichen Ressourcen abhängt, können lokale Lösungen wichtige Beiträge leisten. Ein verbessertes Zeitmanagement und Zeiteinsparungen, insbesondere für energieintensive Unternehmen, können Verbrauchsspitzen reduzieren und den Strom- und Gasverbrauch mit der Versorgung in Einklang bringen. Dies erhöht jedoch die Komplexität, die Kosten und die Anfälligkeit.

MYNTS wird derzeit für Netzentwicklungs- und Planungsaufgaben in Industrieunternehmen eingesetzt, unter anderem bei der größten deutschen Gastransportgesellschaft, der Open Grid Europe mit Sitz in Essen.



Sektorkopplungen in städtischen Netzen (schematisch)

## Durchbruch für die Gasnetz-Simulation

Bei der Planung von Fernleitungs- und Verteilnetzen für den Transport von Erdgas (oder zukünftig Wasserstoff) ist zu untersuchen, ob überhaupt eine Lösung für die geplanten Einspeisungen in das Netz und die erwarteten Entnahmen aus dem Netz existiert. In der Praxis werden für die Netzplanung Computerprogramme eingesetzt, die auf entsprechenden Lösungsverfahren beruhen. Besonders problematisch dabei ist, dass die bisher verwendeten Ansätze nicht immer eine Lösung des Problems finden, und es gibt auch keine Information darüber, ob überhaupt eine Lösung des Problems existiert.

SCAI hat ein Verfahren entwickelt, das diese Schwierigkeiten behebt. Dazu wird ein in der Mikroelektronik verwendeter Ansatz genutzt. In der Mikroelektronik und bei Energienetzen untersucht man netzartige Strukturen, die von einem Medium durchflossen werden. Physikalisch besteht entsprechend eine Analogie von elektrischer Spannung und Gasdruck. Während jedoch eine Spannung positive und negative Werte annehmen kann, macht ein negativer Wert für den Druck in Energienetzen keinen Sinn. Dieser Unterschied lässt sich in folgender Weise interpretieren: Wenn ein Lösungsverfahren im Gas-Kontext als Ergebnis an einem Netzknoten einen negativen Druck errechnet, kann dies so gedeutet werden, dass diese Lösung zwar mathematisch existiert, aber physikalisch nicht sinnvoll ist. Gibt es für das untersuchte Problem nachweisbar keine weiteren Lösungen, so ist gezeigt, dass das gegebene Problem keine physikalische Lösung besitzt.

Die Antwort »Für das untersuchte Problem existiert keine physikalisch sinnvolle Lösung« ist offensichtlich wesentlich aussagekräftiger als die bisherige Antwort »Ich finde keine Lösung« der Programme.

Dieser Ansatz ist neu in der Gasnetzsimulation und bietet einen großen Vorteil gegenüber anderen am Markt erhältlichen Softwarelösungen. In MYNTS ist dieser Ansatz bereits integriert und an realen Netzbeispielen getestet worden.

## Softwarebibliothek für deutsche Energienetze

Das Projekt MathEnergy, in dem Partner aus Wissenschaft und Industrie mitwirkten, stellte sich den Herausforderungen der Energiewende durch die Entwicklung neuer mathematischer Ansätze. Um Auslastung und Ausbau der Energienetze zu planen, muss man Angebot und Nachfrage anpassen und Flexibilität unter den Energieträgern nutzen. Dazu wurden netzübergreifende Modelle und modellbasierte Monitoring-, Controlling- und Evaluierungskonzepte entwickelt.

Ein Ergebnis von MathEnergy ist eine Softwarebibliothek für hierarchische komplexe Netzmodelle, die stochastisch variierende Eingangsdaten und Workflows für die integrierte Simulation und Analyse netzübergreifender Szenarien der Energieversorgung mit Strom und Gas unterstützt. Diese Software leistet einen wichtigen Beitrag für die Verbesserung der gesamten Energienetz-Infrastruktur in Deutschland.

MathEnergy wurde durch das Bundesministerium für Wirtschaft, Mittelstand und Energie (BMWi) gefördert. Das Projekt wurde im Oktober 2016 gestartet und endete im Januar 2021.

## Kontakt

Dr. Bernhard Klaaßen  
Telefon +49 2241 14-4070  
bernhard.klaassen@  
scai.fraunhofer.de  
www.scai.fraunhofer.de/net



# Virtual Material Design

Neue Materialien mit maßgeschneiderten Eigenschaften werden in vielen Anwendungsfeldern immer wichtiger. Mathematische Methoden sowie die Kombination natur- und ingenieurwissenschaftlicher Erkenntnisse mit modernen datengetriebenen Ansätzen machen es möglich, derartige Materialien schnell und effizient zu entwickeln. Dabei spielen Ansätze des Maschinellen Lernens eine wichtige Rolle.

Das Ziel im Geschäftsfeld *Virtual Material Design* ist es, den Computer als virtuelles Labor zu nutzen, um neue Materialien und Moleküle zu generieren und zu untersuchen. Mit diesem Ansatz lassen sich die Entwicklungskosten für neue Materialien erheblich senken und Herstellungsprozesse optimieren.

## Softwarepakete Tremolo-X und HCFFT

**Tremolo-X** ist ein massiv paralleles Softwarepaket für effiziente Molekulardynamik-Simulationen. Die von SCAI entwickelte Software ist auch das numerische Back-End des Simulations-Toolkits QuantumATK, das von der Firma Synopsys vermarktet wird. Tremolo-X unterstützt nahezu alle konventionellen Wechselwirkungspotenziale zur Modellierung von Materialien sowie Core-Shell und reaktive Potenzialmodelle. Die Software enthält auch Wechselwirkungspotenziale, die auf Methoden des Maschinellen Lernens (ML) basieren, sowie Werkzeuge, um sowohl diese als auch konventionelle Potenziale effizient zu trainieren.

Ein neues Softwarepaket des Geschäftsfelds ist **HCFFT** (Hyperbolic Cross Fast Fourier Transform). Dieses Paket ermöglicht zahlreiche Transformationen hochdimensionaler multivariater Funktionen. Es basiert auf einer schnellen Fourier-Transformation für beliebige hyperbolische Kreuz- und Dünngitterräume (hyperbolic cross and sparse grid spaces).

## Bessere Batterien für grünen Strom

Organische Redox-Flow-Batterien (RFBs) gelten als vielversprechender Ansatz für die Speicherung temporärer Überschüsse bei der Erzeugung von Energie aus erneuerbaren

Energiequellen. Das Verbundprojekt SONAR zielt darauf ab, den Entwicklungsprozess von RFBs in seiner Gesamtheit digital zu erfassen, das Screening zur Identifizierung geeigneter Stoffe zu beschleunigen und das Design eines Batteriesystems an konkrete Gegebenheiten anzupassen. Hierzu entwickeln die Projektpartner Werkzeuge und Arbeitsabläufe für die Untersuchung elektroaktiver Materialien und kombinieren Simulationsmethoden auf mehreren physikalischen Skalen. Dabei fließen Faktoren wie Kosten, Lebensdauer und Leistung mit ein, um auch konkurrierende Energiespeichertechniken umfassend miteinander vergleichen zu können. SONAR wird von der Europäischen Kommission im Rahmen von Horizon 2020 gefördert und läuft von Januar 2020 bis Dezember 2023.

## ML-Methoden verbessern Polyurethan-Lacke

Im Verbundprojekt MaGriDo geht es darum, ML-Methoden zu entwickeln, die weniger Daten benötigen oder Vorhersagen treffen können, die konsistent zu vorhandenem Wissen



Laboraufbau einer organischen Redox-Flow-Batterie



sind. Dazu werden tiefe neuronale Netze für industrielle Anwendungen so weiter entwickelt, dass existierendes Domänenwissen in die Architektur der Netzwerke einfließt.

Anwendungsbeispiele sind Polymere und Gläser. Durch Variationen der bei der Herstellung eingesetzten Grundstoffe lassen sich etwa die Eigenschaften von Polyurethan-Lacken (Härte, Kratzfestigkeit oder Glanz) einstellen. Für die Entwicklung eines neuen Lacks mit speziellen Eigenschaften sind jedoch aufwendige Experimente notwendig. MaGriDo soll diese Experimente weitgehend überflüssig machen und so den Entwicklungsprozess beschleunigen. SCAI sichert im Projekt die Software-Engineering-Aspekte, die ingenieurmäßige Anbindung und die spätere Verwertung der Projektergebnisse.

MaGriDo wird im Programm »Mathematik für Innovationen« vom Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert und läuft von April 2020 bis März 2023.

## »Diamonds are research's best friends«

VMD hat im Jahr 2020 ein Projekt abgeschlossen, in dem es darum ging, Rohdiamanten so zuzuschneiden, dass die erhaltenen Zuschnitte nach dem Schleifen einen möglichst hohen Wert haben. Bei der Lösung dieses Problems sind zahlreiche Nebenbedingungen zu berücksichtigen:

- Die Preise geschliffener Diamanten wachsen mit zunehmender Größe eher exponentiell als linear und weisen bei ganzen Karatzahlen hohe Sprünge auf.
- Der Materialverlust beim Schliff von Diamanten ist unterschiedlich und kann je nach Schnitt zwischen 10 und 50 Prozent des Edelsteins betragen.

- Die Preise hängen nicht nur vom Gewicht, sondern auch von der Form des geschliffenen Diamanten ab.
- Eine Herausforderung stellen Verunreinigungen dar. Je größer und zahlreicher die Einschlüsse in einem Diamanten sind, desto niedriger sind seine Qualität und sein Preis.
- In vielen Fällen steigt der erzielbare Wert, wenn man nicht nur einen, sondern zwei, drei oder vier Diamanten aus einem Rohdiamanten schneidet.

Mathematisch ist dies ein kombinatorisches Problem (wie viele Diamanten mit welchen Facettenschliffen sollen geschnitten werden), bei dem für jede sinnvolle Kombination ein hochdimensionales Optimierungsproblem zu lösen ist. Die von SCAI entwickelte Lösung kombiniert Dünngitterideen und genetische Algorithmen. Dünne Gitter eignen sich, um hochdimensionale Probleme effizient zu lösen. Genetische Algorithmen imitieren die Anpassung von Lebewesen im Rahmen der Evolution. Will man genetische Algorithmen zur Lösung von Optimierungsaufgaben nutzen, besteht die Kunst darin, sie in geeigneter Form an die speziellen Herausforderungen des Problems anzupassen.

Im Gegensatz zu herkömmlichen Lösungen liefert die SCAI-Software auch dann gute Antworten, wenn die Rohdiamanten Einschlüsse enthalten – und dies ist eher die Regel als die Ausnahme. Ferner berücksichtigt die Software auch Kombinationen von zwei oder mehr Diamanten.

## Kontakt

Dr. Jan Hamaekers  
Telefon +49 2241 14-4230  
jan.hamaekers@  
scai.fraunhofer.de  
www.scai.fraunhofer.de/vmd

# Numerische datenbasierte Vorhersage

**Datengestützte Ansätze werden immer wichtiger. Vielversprechend ist das Zusammenspiel effizienter Datenanalyse-Algorithmen, großer Datenmengen von Sensoren und/oder numerischen Simulationen zur Einbringung von Domänenwissen. Mit Verfahren des Maschinellen Lernens lassen sich aus Daten gezielt Erkenntnisse gewinnen, die die Entscheidungsfindung oder die Automatisierung der Prozesssteuerung unterstützen.**

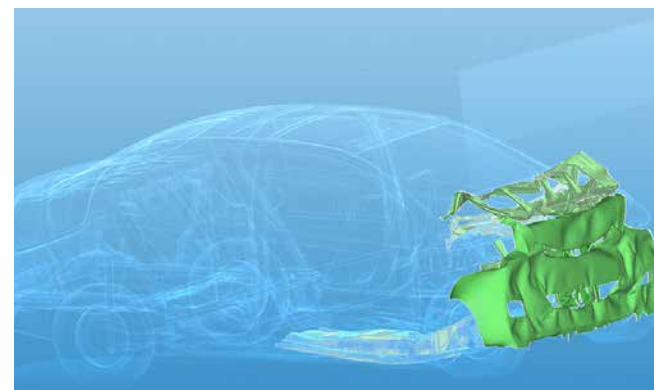
Die Arbeiten im Geschäftsfeld *Numerische datenbasierte Vorhersage* konzentrieren sich auf den Umgang mit komplexen Daten aus physikalisch-technischen Anwendungen, insbesondere um den Herausforderungen von Industrie 4.0 gerecht zu werden. Das Geschäftsfeld kombiniert Mathematik, Maschinelles Lernen und Ingenieurwissen, um robuste, skalierbare und domänenangepasste Datenanalysekonzepte und -methoden zu entwickeln. Anwendungen finden sich etwa in der virtuellen Produktentwicklung mittels Computer Aided Engineering, in der Zustandsüberwachung einschließlich prädiktiver Wartung (Projekt MADESI) oder in der Realisierung digitaler Zwillinge (Projekt EVOLOPRO).

Ein Schwerpunkt der Forschung und Entwicklung besteht darin, Ingenieurwissen in das Maschinelle Lernen (ML) zu integrieren und zu nutzen. Weitere Themen sind die effiziente Verarbeitung und Analyse großer komplexer Datensätze, zum Beispiel Zeitreihen oder numerische Simulationsergebnisse, die Quantifizierung von Unsicherheiten sowie Beiträge zum Transferlernen. Darüber hinaus bietet SCAI seinen Kunden Softwarewerkzeuge für den robusten Entwurf.

## Softwarepakete SimCompare und ModelCompare

Die im Geschäftsfeld neu entwickelte Software **SimCompare** hilft bei der Analyse von Crash-Simulationen. SimCompare erkennt besondere Ereignisse, vor allem Abweichungen wie Anomalien oder außergewöhnliche Variationen von Deformationen. Dazu untersucht das Programm die Ergebnisse ähnlicher Finite-Elemente-(FE-)Simulationenläufe für die Analyse des Crash-Verhaltens. SimCompare kombiniert Mathematik und ML, um Ingenieurwissen in die Datenanalyse zu integrieren.

**ModelCompare** ist ein Plug-in für das Pre- und Post-Processing bei FE-Methoden. Es ermöglicht einen einfachen und direkten Vergleich zweier ähnlich diskretisierter FE-Modelle und berechnet Unterschiede der Modelle hinsichtlich Geometrie, Materialeigenschaften oder Dicke. Die Software identifiziert die Unterschiede auf der Grundlage der durch das FE-Gitter beschriebenen Geometrie. Sie verwendet spezielle Abbildungstechniken, die zu extrem kurzen Laufzeiten führen. ModelCompare trägt so dazu bei, den virtuellen Produktentwicklungsprozess zu vereinfachen.



Teile mit den größten Abweichungen in zwei FE-Simulationen (Beispiel: Open-Source-FE-Modell des Toyota Yaris)

## Projekt ViPrIA – virtuelle Produktentwicklung mittels intelligenter Assistenzsysteme

Ziel des Verbundprojektes ViPrIA ist die Entwicklung intelligenter, auf Künstlicher Intelligenz (KI) und ML-Ansätzen basierender Assistenzsysteme zur Unterstützung von Ingenieuren bei der virtuellen Produktentwicklung.



In der industriellen Praxis modellieren Ingenieure neue Produkte häufig mit FE-Methoden. Im Fall von Crash-Tests im Automobilbereich spiegeln sich in den Eingabedaten eines FE-Modells Informationen über verschiedene Design-Konfigurationen des Produkts wider, darunter Materialeigenschaften, Geometrie, Verbindungskomponenten oder Betriebsbereiche. Des Weiteren werden verschiedene Lastfälle untersucht, etwa Frontal-, Heck- oder Seiten-Crash.

Die Ergebnisse von ViPrIA sollen Berechnungsingenieure in der Fahrzeugentwicklung in zwei wesentlichen Stufen des Entwicklungsprozesses unterstützen:

- Ein intelligentes Assistenzsystem unterstützt Ingenieure bereits beim Aufsetzen einer neuen numerischen Simulation, etwa durch Hinweise auf sinnvolle Modifikationen und Ergebnisprognosen.
- Automatisierte Analysen von Simulationsergebnissen liefern eine direkte Rückmeldung zu jedem Simulationsergebnis, sofern dieses ein nicht erwartetes Verhalten aufweist.

ViPrIA läuft von Oktober 2019 bis September 2022. Das Projekt wird vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) gefördert.

## ManuBrain – universell einsetzbare, skalierbare KI-Plattform für industrielle Anwendungen

Nur wenige mittelständische Unternehmen nutzen bislang KI-Verfahren zur Analyse von Sensordaten in Produktionsanlagen. Im Verbundprojekt »ManuBrain« entsteht daher eine universelle, skalierbare und offene Plattform für

KI-Anwendungen im Mittelstand, die hilft, das Potenzial der Datenanalyse für industrielle Anwendungen zu erschließen.

SCAI bringt langjährige Erfahrung in der Datenanalyse und im Maschinellen Lernen in das Projekt ein. Eine wichtige Rolle spielt das sogenannte »Informed Machine Learning«. Dabei nutzt man in der Datenanalyse auch Anwendungswissen, beispielsweise in Form physikalischer Annahmen. So lässt sich untersuchen, welchen Einfluss äußere Bedingungen wie die Temperatur auf die Eigenschaften eines Produktes haben. Kombiniert man gesammelte Daten, Erfahrungswissen des Maschinenbetreibers und physikalisch-technisches Wissen, so kann man Produkte und Abläufe optimieren. Einen weiteren Schwerpunkt der Forschungsarbeiten bilden Verfahren des Transferlernens. Sie helfen, ML-Modelle, die für einen Maschinentyp funktionieren, auf verwandte Maschinentypen zu übertragen.

ManuBrain ist Teil des Leitmarkt Wettbewerbs IKT.NRW. Das Land Nordrhein-Westfalen und der Europäische Fonds für Regionale Entwicklung fördern das Vorhaben über drei Jahre mit insgesamt 1,8 Millionen Euro. Das Projekt läuft von Januar 2020 bis Dezember 2022.

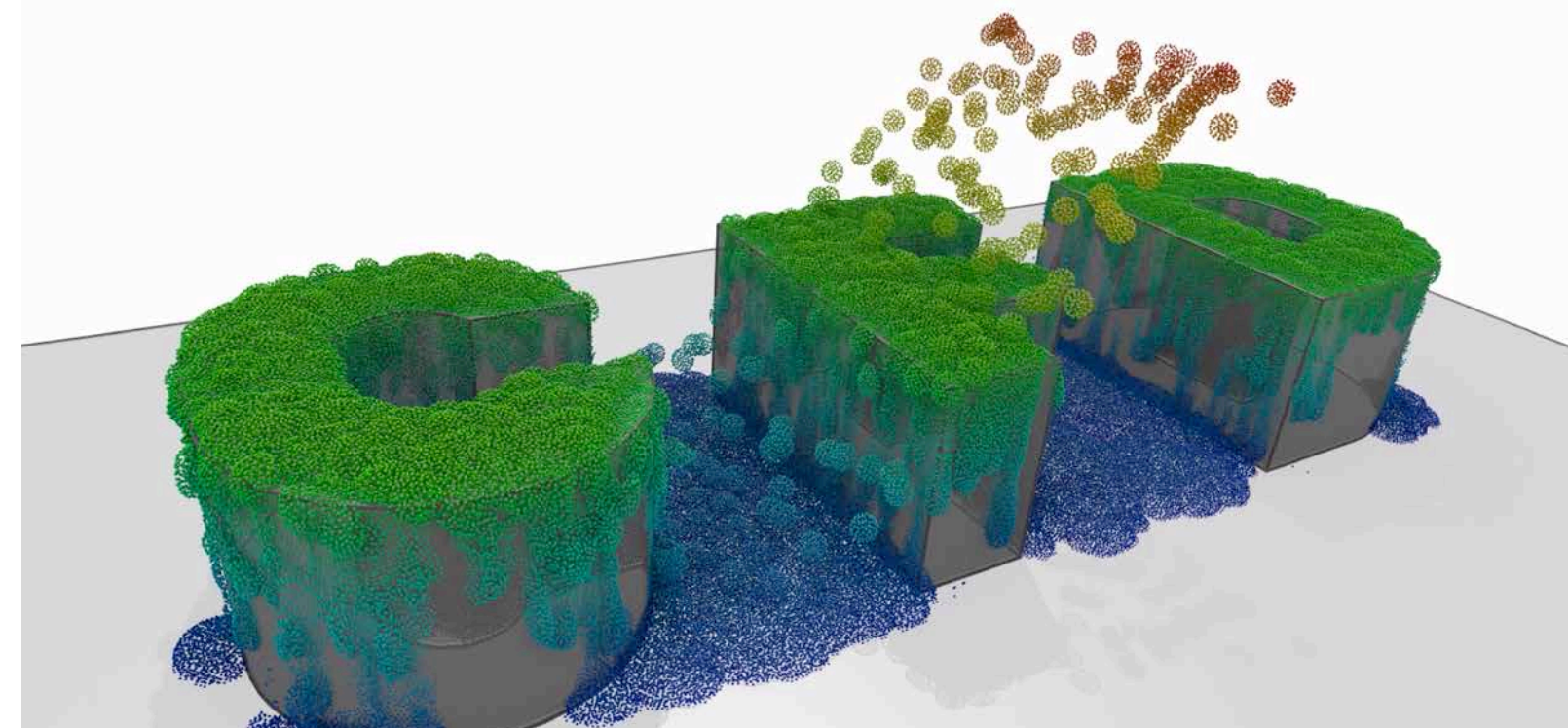
## Kontakt

Prof. Dr. Jochen Garcke  
Telefon +49 2241 14-4015  
jochen.garcke@  
scai.fraunhofer.de  
www.scai.fraunhofer.de/ndv



# Meshfree Multiscale Methods

Die Vorhersage des Materialversagens und des Bruchverhaltens großer Bauteile spielt in vielen Industriezweigen eine entscheidende Rolle. Beispiele sind die Prognosen über Verschleiß oder Lebensdauer von Staudämmen, Eisenbahnreifen oder Flugzeugen. Für derartige Anwendungen sind gitterfreie Methoden besonders gut geeignet. Sie können zudem den Design-Zyklus vereinfachen und beschleunigen.



Das Geschäftsfeld *Meshfree Multiscale Methods* entwickelt effiziente Multiskalen-Algorithmen, zum Beispiel die Verallgemeinerung der Methode der Finiten Elemente (FE) oder partikelbasierte Multiskalen-Verfahren. Gitterfreie Methoden eignen sich besonders zur Lösung von Problemen, bei denen große Änderungen in der Geometrie und Änderungen der Topologie auftreten – zum Beispiel große Verformungen oder freie Oberflächen. In analoger Weise bieten gitterfreie Methoden Vorteile bei Design Aufgaben. Da für gitterfreie Methoden keine konsistente globale Netzgenerierung notwendig ist, sind sie bei derartigen Anwendungen klassischen gitterbasierten Methoden überlegen.

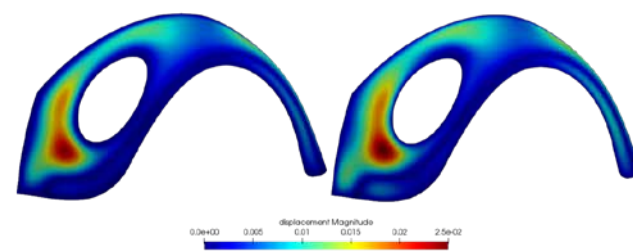
Im Bereich der verallgemeinerten FE-Methoden umfassen die Themen des Geschäftsfelds die Entwicklung und Implementierung effizienter Software für den Entwurf optimaler problemangepasster Basisfunktionen und deren Integration in kommerzielle FE-Pakete. Ein Schwerpunkt der Arbeiten ist die Entwicklung der Partition of Unity-Methode (PUM) – einer netzfreien Verallgemeinerung der FE-Methode. Sie unterstützt die direkte Verwendung problemabhängiger Anreicherungsfunktionen. Diese anwendungsspezifischen Basisfunktionen können analytisch, aber auch in Form numerischer oder experimenteller Daten vorgegeben werden. Insgesamt ermöglicht dieser Ansatz eine wesentlich bessere Approximation mit weniger Freiheitsgraden.

## PUMA – schnelle Entwicklung angereicherter Simulationsanwendungen

Das PUMA-Software-Toolkit ermöglicht Ingenieuren die schnelle Implementierung von Simulationsanwendungen mit verallgemeinerten FE-Techniken, die auf der PUM

basieren. Im Vergleich zu klassischen FE-Methoden kann eine PUM spezielle Kenntnisse des Nutzers über das zu lösende Problem, domänenspezifische Informationen und physikbasierte Basisfunktionen unmittelbar nutzen, um die Approximationseigenschaften des Modells zu verbessern und den Rechenaufwand zu reduzieren. PUMA ermöglicht somit insbesondere die schnelle Evaluierung neuartiger Modelle. Weitere Vorteile von PUMA sind:

- PUMA nutzt auf einfache Weise problemspezifische Kenntnisse des Benutzers, domänenspezifische Informationen und physikbasierte Basisfunktionen.
- PUMA ermöglicht eine schnelle Evaluierung neuartiger Modelle.
- PUMA eignet sich besonders für bruchmechanische Probleme.



Kirchhoff-Schalen-Modell eines Kotflügels in PUMA

Durch die Verwendung einer mehrschichtigen Architektur verbirgt PUMA die interne Methodik- und Implementierungs-komplexität vor dem Benutzer. Das sogenannte PaUnT-Modul

enthält den rechnerischen Kern des Frameworks und bietet Plattformunabhängigkeit, Recheneffizienz und die Möglichkeit zur Interaktion mit wissenschaftlichen Drittbibliotheken. PUMA bietet eine Python-Schnittstelle, die einen einfachen Zugriff auf die übergeordneten Funktionen von PaUnT ermöglicht.

Auf der Anwendungsebene implementiert der Benutzer die Simulationsanwendung mit Hilfe dieser Schnittstelle. Sie erlaubt es, die Methode vollständig zu steuern, ohne dass der Benutzer alle Details der PUM oder ihrer Implementierung innerhalb des Rechenkerns von PUMA kennen muss.

## MESHFREE – Simulationswerkzeug für komplexe Geometrien und Physik

In gängigen Simulations-Workflows ist der Vorverarbeitungsschritt der Gittergenerierung und -anpassung zeitaufwendig und führt zu hohen Kosten in der Produktentwicklung. Zu diesem Zweck haben SCAI und das Fraunhofer-Institut ITWM das Softwarepaket MESHFREE entwickelt. MESHFREE dient zur gitterfreien Simulation strömungs- und kontinuumsmechanischer Probleme. Mit diesem Softwarepaket ist es beispielsweise möglich, Beschichtungs-, Extrusions-, Umform-, Homogenisierungs-, Injektions-, Knet-, Press- oder Rührvorgänge zu simulieren. Solche Prozesse sind etwa in der Lebensmitteltechnologie wichtig.

MESHFREE diskretisiert den Simulationsbereich durch eine flexible Punktwolke und eignet sich daher besonders für Simulationen mit freien Oberflächen oder bewegten Geometrien. Der Benutzer kann die Geometrieinformationen direkt aus gängigen CAD-Werkzeugen exportieren und für die Simulation mit MESHFREE verwenden.

Die Software verwendet ein allgemeines Materialmodell, das heißt, ein universelles Modell für Flüssigkeiten und Festkörper. Dies erlaubt es, komplexes Materialverhalten mit derselben numerischen Methodik zu modellieren und zu behandeln, unabhängig davon, ob das Medium flüssig oder fest ist. Die Angabe der Materialeigenschaften wie Viskosität oder Elastizität in Form eines Schermoduls ist ausreichend, um das Verhalten des Mediums zu berechnen.

Da MESHFREE keine Berechnungsnetze benötigt, ist die Software sehr flexibel in der Organisation der Berechnungspunkte: Netzgenerierung und zeitaufwendige Anpassungen der Netztopologie bei hochdynamischen Prozessen – wie Strömungen mit freien Oberflächen oder schnell bewegten Geometrieelementen – entfallen.

Die Software kombiniert die Finite-Point-Set-Methode (entwickelt vom Fraunhofer-Institut ITWM) zur numerischen Behandlung der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie mit effizienten algebraischen Mehrgittermethoden (entwickelt von Fraunhofer SCAI) zur Lösung der entstehenden großen linearen Gleichungssysteme.

## Kontakt

Prof. Dr. Marc Alexander  
Schweitzer  
Telefon +49 2241 14-4004  
marc.alexander.schweitzer@  
scai.fraunhofer.de  
www.scai.fraunhofer.de/mmm



# Computational Finance

Computational Finance ist ein interdisziplinärer Zweig des wissenschaftlichen Rechnens. Das Hauptziel besteht darin, die Risiken von Finanzprodukten so genau wie möglich zu bestimmen. Hierzu gehört die Ermittlung eines fairen Preises für Wertpapiere, Aktien und Anleihen (Pricing) sowie die Entwicklung von Absicherungsstrategien (Hedging).

Typische Anwendungsfelder sind Investitionsentscheidungen und die strategische Unternehmensplanung sowie das Bilanzstrukturmanagement (Asset-Liability-Management), bei dem es darum geht, die erwartete Rendite einer Bank oder einer Versicherung unter Unsicherheit zu optimieren. Aktuelle Herausforderungen sind immer komplexere Finanzprodukte oder Marktmodelle mit Unsicherheitsquellen wie etwa das Pricing von Optionen auf dem Strommarkt, weil die Menge des produzierten Ökostroms (und damit auch der Strompreis) aufgrund des sich ständig ändernden Wetters stark schwankt.

Im Geschäftsfeld *Computational Finance* entwickelt SCAI effiziente und robuste numerische Algorithmen und implementiert diese auf parallelen Hochleistungsrechnern. Zu den Schwerpunkten der Forschung und Entwicklung gehören

- effiziente und problemadaptierte Quadraturmethoden für hochdimensionale Probleme wie Quasi- und Multilevel-Monte-Carlo- oder Dünngittermethoden,
- performante Verfahren zur Lösung partieller Differentialgleichungen,
- Methoden des Maschinellen Lernens (Deep Learning, Tensor-Methoden, verallgemeinerte Support-Vektor-Maschinen, Transfer-Lernen, Verstärkungslernen, Reduktion der nichtlinearen Dimensionalität) sowie deren Interpretierbarkeit.

Diese Techniken ermöglichen Berechnungen mit hoher Genauigkeit und deutlich kürzeren Rechenzeiten als bei klassischen Verfahren. Ziel dabei ist es, eine schnellere und qualitativ bessere Analyse von Finanzdaten für Vorhersagen und damit für fundierte Investitionsentscheidungen zu entwickeln. Anwendungsbereiche für

Methoden des Maschinellen Lernens sind zum Beispiel Investitionsvorhersagen, Risikomanagement und algorithmischer Handel. Die Arbeiten des Geschäftsfelds konzentrieren sich auf drei Bereiche.

## Maschinelles Lernen für Banken und Versicherungen

Maschinelles Lernen spielt heute eine wichtige Rolle bei der Optimierung von Finanzdienstleistungen. Maschinelle Lernverfahren basieren in der Regel auf stochastischen Methoden, bei denen ein Algorithmus aus vielen verschiedenen repräsentativen Datensätzen lernt. Die Finanzdienstleistungsbranche verfügt oft über sehr große Datensätze, etwa über Finanztransaktionen, Kunden, Unternehmen und Aktienmärkten. Mit Techniken des Maschinellen Lernens lassen sich diese großen Datenmengen besonders gut analysieren und für die Ableitung von Vorhersagen und Empfehlungen nutzen. Lernalgorithmen entwickeln aus den Beispieldaten ein komplexes Modell. Dieses Modell kann dann auf andere, ähnliche Daten angewendet werden, um wertvolle und zuverlässige Vorhersagen zu erhalten.

## Integration neuer Datenquellen

Maschinelles Lernen spielt auch bei der Entwicklung von Handelsstrategien eine immer wichtigere Rolle. Neben klassischen makroökonomischen Indikatoren und Korrelationen mit anderen Anlageklassen werden zunehmend neue Datentypen, etwa Stimmungsindikatoren auf der Basis von Social-Media-Beiträgen, in das Modelltraining

einbezogen. Die Zahl der betrachteten Datenquellen nimmt dadurch ständig zu. Ihre Analyse ist jedoch wichtig, um neue Entwicklungen auf dem Markt früher als andere zu erkennen.

Die Daten in Finanzanwendungen sind in der Regel hochdimensional. Eine Möglichkeit, mit dem daraus resultierenden sogenannten Fluch der Dimension umzugehen, besteht darin, die Daten entsprechend vorzufiltern, etwa in Kombination mit Methoden der Dimensionsreduktion. Ziel dabei ist es, das Verhältnis zwischen dem eigentlichen Signal und dem inhärenten Rauschen in den Daten zu verbessern, um die Anfälligkeit für eine Überanpassung zu verringern. Hierzu entwickelt SCAI neue Methoden und Ansätze, auch im Auftrag von Partnern aus dem Finanzsektor.

## Maschinelles Lernen unterstützt nachhaltige und ethische Investitionen

Immer mehr Anleger wollen ihr Geld in Unternehmen investieren, die ökologische, soziale und

Corporate-Governance-Kriterien (ESG) erfüllen. Dabei hilft das Maschinelle Lernen, die Leistung und Nachhaltigkeit weltweit börsennotierter Unternehmen nach derartigen ESG-definierten Kriterien zu bewerten. Berücksichtigt werden dann nur leistungsstarke Aktien von Unternehmen, die bestimmte Standards bezüglich ihres Umwelt- und Sozialverhaltens sowie einer verantwortungsvollen Unternehmensführung vorweisen können.

Gemeinsam mit *Arabesque Asset Management Ltd.* entwickelt Fraunhofer SCAI innovative mathematische Methoden für Maschinelle Lernverfahren, mit denen sich komplexe ESG-konforme Aktien und ein darauf beruhendes leistungsfähiges Portfolio bestimmen lassen. Darüber hinaus erlauben die Verfahren Vorhersagen über das zukünftige Potenzial der jeweiligen Aktien und Assets. Die Ergebnisse liefern präzise Anlageempfehlungen für institutionelle Investoren.



## Kontakt

Dr. Daniel Oeltz  
Telefon +49 2241 14-4224  
daniel.oeltz@  
scai.fraunhofer.de  
www.scai.fraunhofer.de/cf



# Die Fraunhofer-Gesellschaft

Die Fraunhofer-Gesellschaft mit Sitz in Deutschland ist die weltweit führende Organisation für anwendungsorientierte Forschung. Mit ihrer Fokussierung auf zukunftsrelevante Schlüsseltechnologien sowie auf die Verwertung der Ergebnisse in Wirtschaft und Industrie spielt sie eine zentrale Rolle im Innovationsprozess und wirkt mit an der Gestaltung unserer Gesellschaft und unserer Zukunft.



Interdisziplinäre Forschungsteams der Fraunhofer-Gesellschaft setzen gemeinsam mit Vertragspartnern aus Wirtschaft und öffentlicher Hand originäre Ideen in Innovationen um, koordinieren und realisieren systemrelevante, forschungspolitische Schlüsselprojekte und stärken mit wertorientierter Wertschöpfung die deutsche und europäische Wirtschaft. Internationale Kooperationen mit exzellenten Forschungspartnern und Unternehmen weltweit sorgen für einen direkten Austausch mit den einflussreichsten Wissenschafts- und Wirtschaftsräumen.

Die Wirkung der angewandten Forschung geht weit über den direkten Nutzen für die Auftraggeber hinaus: Fraunhofer-Institute stärken die Leistungsfähigkeit der Unternehmen, verbessern die Akzeptanz moderner Technik in der Gesellschaft und sorgen für die Aus- und Weiterbildung des dringend benötigten wissenschaftlich-technischen Nachwuchses.

Hochmotivierte Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter auf dem Stand der aktuellen Spitzenforschung stellen für uns als Wissenschaftsorganisation den wichtigsten Erfolgsfaktor dar. Fraunhofer bietet daher die Möglichkeit zum selbstständigen, gestaltenden und zugleich zielorientierten Arbeiten und somit zur fachlichen und persönlichen Entwicklung, die zu anspruchsvollen Positionen in den Instituten, an Hochschulen, in Wirtschaft und Gesellschaft befähigt. Studierenden eröffnen sich aufgrund der praxisnahen Ausbildung und des frühzeitigen Kontakts mit Auftraggebern hervorragende Einstiegs- und Entwicklungschancen in Unternehmen.

Namensgeber der als gemeinnützig anerkannten Fraunhofer-Gesellschaft ist der Münchner Gelehrte Joseph von Fraunhofer (1787–1826). Er war als Forscher, Erfinder und Unternehmer gleichermaßen erfolgreich.

Die 1949 gegründete Organisation betreibt in Deutschland derzeit 75 Institute und Forschungseinrichtungen. Rund 29 000 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, überwiegend mit natur- oder ingenieurwissenschaftlicher Ausbildung, erarbeiten das jährliche Forschungsvolumen von 2,8 Milliarden Euro. Davon fallen 2,4 Milliarden Euro auf den Leistungsbereich Vertragsforschung. Rund zwei Drittel davon erwirtschaftet Fraunhofer mit Aufträgen aus der Industrie und mit öffentlich finanzierten Forschungsprojekten. Rund ein Drittel steuern Bund und Länder als Grundfinanzierung bei, damit die Institute schon heute Problemlösungen entwickeln können, die in einigen Jahren für Wirtschaft und Gesellschaft entscheidend wichtig werden.

**75**  
Fraunhofer-  
Institute

## Vernetzung

### Institut für Numerische Simulation (INS) an der Universität Bonn

Das INS ist ein mathematisches Forschungsinstitut an der Universität Bonn mit den Schwerpunkten Wissenschaftliches Rechnen sowie Numerische Analysis und Numerische Simulation. Das Institut entwickelt Werkzeuge zur numerischen Simulation in Natur- und Ingenieurwissenschaften, Geowissenschaften, Medizin, Life Sciences sowie Wirtschaft und Finanzindustrie.

Am INS ist unter der Leitung von Dr. Jan Hamaekers ein Teil des SCAI-Geschäftsfelds *Virtual Material Design* angesiedelt. Prof. Dr. Michael Griebel, Institutsleiter SCAI, Prof. Dr. Jochen Garcke, Leiter des SCAI-Geschäftsfelds *Numerische datenbasierte Vorhersage*, und Prof. Dr. Marc Alexander Schweitzer, Leiter des SCAI-Geschäftsfelds *Meshfree Multiscale Methods*, leiten jeweils auch Arbeitsgruppen am INS.

### Bonn-Aachen International Center for Information Technology (b-it)

Das b-it ist eine gemeinsame Einrichtung der Universität Bonn, der Rheinisch-Westfälischen

Technischen Hochschule Aachen, der Hochschule Bonn-Rhein Sieg und der Fraunhofer-Gesellschaft. Das SCAI-Geschäftsfeld *Bioinformatik* unter der Leitung von Prof. Dr. Martin Hofmann-Apitius beteiligt sich in dieser Kooperation am internationalen Master-Studiengang *Life Science Informatics*. Hofmann-Apitius und Prof. Dr. Holger Fröhlich, Gruppenleiter *KI und Data Science*, leiten jeweils auch Arbeitsgruppen am b-it.

### Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, Sankt Augustin

Die Kooperation mit der Hochschule Bonn-Rhein-Sieg ist vielfältig, umfasst mehrere Themen und bindet auch Studierende in die wissenschaftliche Arbeit von SCAI ein.

### Hochschule Koblenz, RheinAhrCampus, Remagen

Die Kooperation mit dem RheinAhrCampus der Fachhochschule Koblenz konzentriert sich auf neue Methoden und Anwendungen des Maschinellen Lernens.

### SCAI ist in mehreren Fraunhofer-Verbänden und Netzwerken aktiv:

- Fraunhofer-Verbund IuK-Technologie
- Fraunhofer-Allianz Big Data und Künstliche Intelligenz
- Forschungszentrum Maschinelles Lernen im Fraunhofer-Cluster of Excellence *Cognitive Internet Technologies*
- Fraunhofer-Netzwerk Simulation
- Fraunhofer-Kompetenznetzwerk Quantencomputing



# 20 Jahre Fraunhofer SCAI – 2001 bis 2005: Von Prototypen zu professionellen Softwarelösungen

## SCAI als Institut der GMD

Das Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI besteht seit 1992. Es ist hervorgegangen aus dem damaligen Institut für Methodische Grundlagen der GMD – Forschungszentrum Informationstechnik GmbH (vormals Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung).



2001

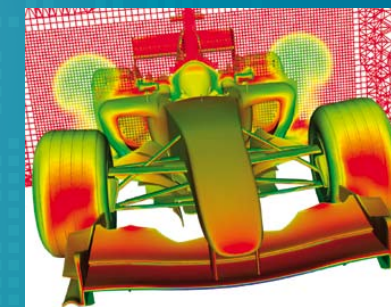
## Die Vermarktung professioneller Softwarelösungen beginnt

Bei GMD-SCAI waren rund 60 Prozent der Beschäftigten durch öffentliche Förderprojekte finanziert. Nun gilt es, die aus der Industrie stammenden Erträge mittelfristig von Null auf 40 Prozent des Institutsbudgets zu heben. SCAI beginnt mit der Entwicklung und Vermarktung professioneller Softwarelösungen für die Industrie.



## SAMG findet weltweit Kunden

Zur effizienten Lösung großer Gleichungssysteme benötigt man zwingend »skalierbare« Löser, das heißt Löser, deren Rechenaufwand mit der Problemgröße nur linear ansteigt. Die von Dr. Klaus Stüben entwickelte Software SAMG kommt in Strömungs- und Strukturmechanik, Reservoirsimulation (Öl und Grundwasser) sowie beim Gießen und Formen von Kunststoffen und Metallen zum Einsatz.



2003

2000

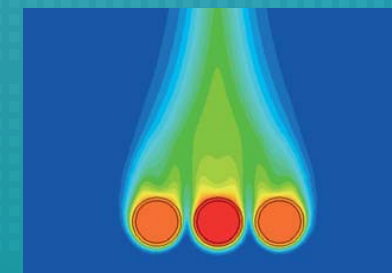


## Fraunhofer-Gesellschaft und GMD fusionieren

Das Jahr 2001 markiert einen Einschnitt im Leben des Instituts. Nach vielen Monaten einer turbulenten Diskussion um die Zusammenführung von GMD und Fraunhofer-Gesellschaft wird der formale Akt der Fusion abgeschlossen. Seit Juli 2001 ist SCAI ein Fraunhofer-Institut und gehört zum Fraunhofer-Verbund IuK-Technologie.

2002

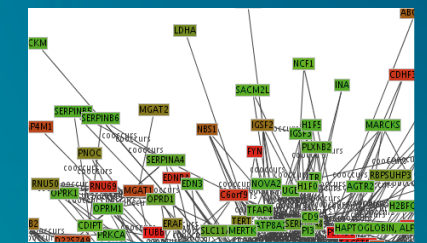
Dr. Ralf Heckmann, Dr. Onno Garms und Mike Schäfer erhalten im Oktober 2002 einen der mit 10.000 Euro dotierten Fraunhofer-Preise für ihre Arbeiten im Bereich der Optimierung. Die Software AutoNester ist bereits am Markt etabliert, die Vermarktung von PackAssistant läuft an.



## MpCCI 2.0 – Industriestandard für gekoppelte Simulationen

Gestiegene Anforderungen an die Realitätstreue von Simulationen und komplexere technische Fragen erfordern es, Simulationen miteinander zu koppeln. Nur so gelingt es, die Wechselwirkungen technischer und physikalischer Effekte realitätsgenau in mathematisch-numerischen Modellen abzubilden.

2004



## Textmining wird immer wichtiger

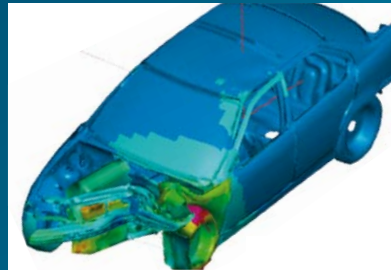
In den Life Sciences ist es aufgrund der enormen Menge an Literatur längst unmöglich, alle relevanten Veröffentlichungen zu verfolgen und zu berücksichtigen. Daher ist der Bedarf nach automatischen Verfahren zur Analyse großer Textmengen, dem Textmining, seit jeher groß und nimmt weiter zu. Es entstehen die Softwarelösungen ProMiner, ChemoCR und SCAIVIEW.



# 20 Jahre Fraunhofer SCAI – 2005 bis 2010: Etablierung als Fraunhofer-Institut

## SCAI formuliert seine Mission

Die Mission des Instituts ist die Entwicklung und Bereitstellung innovativer Methoden im Bereich des wissenschaftlichen Rechnens und der numerischen Simulation und deren Umsetzung in die industrielle Praxis. SCAI kombiniert mathematisch-numerisches und informatisches Wissen – jeweils mit dem Schwerpunkt in der Algorithmik.



2006

## Forscher gewinnen erneut Fraunhofer-Preis für SCAI

Für ihre Software zur Kompression von Simulationsergebnissen erhalten Dr. Rodrigo Iza-Teran, Prof. Dr. Rudolph Lorentz und Clemens-August Thole den mit 20 000 Euro dotierten Joseph-von-Fraunhofer-Preis. Die Jury überzeugen die hervorragenden mathematischen Methoden und der große Erfolg der Kompressionsverfahren bei den Anwendern.



2008

## Fraunhofer SCAI geht neue Wege im Vertrieb von Software

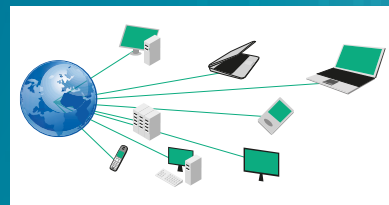
Zur Verstärkung des Vertriebs gründet Fraunhofer SCAI die scapos AG. Das Spin-off mit Sitz am Institut bietet seine Dienstleistungen auch anderen Fraunhofer-Instituten und Forschungsorganisationen an.



2010

2005

Die SCAI-Software DIFF-CRASH vergleicht Analysen mehrerer Crash-Test-Simulationen durch Auswertung geometrischer Informationen. Ingenieurinnen und Ingenieure erhalten konkrete Hinweise auf die Stabilität eines Modells.



## Datamining und Grid Computing für industrielle Anwendungen

SCAI entwickelt grundlegende Techniken für das Grid Computing. Zu den Anwendungsfeldern gehören die Verbesserung der Sicherheit von Automobilen, die schnellere und zielgerichtete Entdeckung innovativer pharmazeutischer Wirkstoffe sowie die Verbesserung von Klima- und Wetteranalysen und -prognosen.

2007



## Jahr der Mathematik – Bundespräsident besucht SCAI

Bundespräsident Horst Köhler informiert sich über die Bedeutung der Angewandten Mathematik. Er trägt sich mit den Worten »Ich bin beeindruckt und fasziniert. Hier entsteht Zukunft – für uns alle« in das Gästebuch des Instituts ein.

2009



## Michael Griebel wird Institutsleiter

Prof. Dr. Marion Schick, Vorstandsmitglied der Fraunhofer-Gesellschaft, überreicht Prof. Dr. Michael Griebel seine Berufungsurkunde zum Institutsleiter von Fraunhofer SCAI. Griebel führt das Institut zunächst gemeinsam mit Prof. Dr. Ulrich Trottenberg. Mit Griebel, der zugleich Direktor des Instituts für Numerische Simulation an der Universität Bonn ist, wird die Kooperation zwischen SCAI und der Universität gestärkt. Das neue Geschäftsfeld *Virtual Material Design* wird gegründet.



# 20 Jahre Fraunhofer SCAI – 2010 bis 2015: Aufbau neuer Themen und Geschäftsfelder

## SCAI gewinnt Innovationspreis für Klima und Umwelt

Für ihre Software zur optimierten Ausnutzung von Material und Raum in ressourcenintensiven Branchen erhalten die Forscher der Abteilung Optimierung den mit 25.000 Euro dotierten Innovationspreis für Klima und Umwelt (IKU). Die Auszeichnung wird vom Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit und dem Bundesverband der Deutschen Industrie e.V. vergeben.



2011

## Festkolloquium zum Abschied von Ulrich Trottenberg

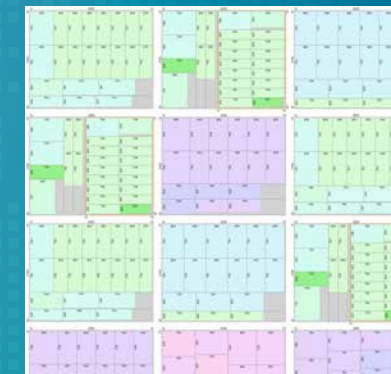
Prof. Dr. Ulrich Trottenberg wird mit einem Festkolloquium in den Ruhestand verabschiedet. Seine Strategie, die Industrieerträge durch die Entwicklung und Vermarktung innovativer Softwarelösungen zu erwirtschaften, war erfolgreich. Im Jahr 2012 erzielt SCAI unter den Instituten des Verbunds Informations- und Kommunikationstechnik mit 49,1 Prozent des Betriebshaushalts die höchsten Wirtschaftsertragsanteile.



2013

## AutoPanelSizer minimiert Materialverschnitt

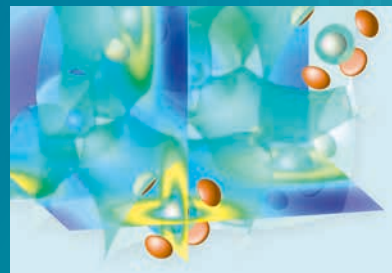
In der Holz-, aber auch der Glas-, Metall- und Kunststoffindustrie ist die Minimierung von Verschnitt von großer Bedeutung. Daher hat das Geschäftsfeld Optimierung eine neue Softwarelösung entwickelt, die eine erheblich bessere Materialausnutzung möglich macht. AutoPanelSizer erstellt in kurzer Zeit Schnittpläne und trägt so zur Reduzierung von Materialverschnitt und zur Einsparung von Ressourcen bei.



2015

2010

Über den IKU-Preis freuen sich (von links): Stefan Rank, Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, Johannes Zühlke, Lydia Franck, Dr. Onno Garms und Dr. Ralf Heckmann



## Neue Geschäftsfelder erweitern das Anwendungsportfolio

Nachdem SCAI sein Geschäftsfeldportfolio bereits um *Virtual Material Design* (2010) erweitert hatte, werden die Geschäftsfelder *High Performance Analytics* (heute: *Network Evaluation Technologies*), *Numerische datenbasierte Vorhersage* und *Computational Finance* aufgebaut. 2013 kommen noch *High Performance Computing* und *Meshfree Multiscale Methods* dazu.

2012

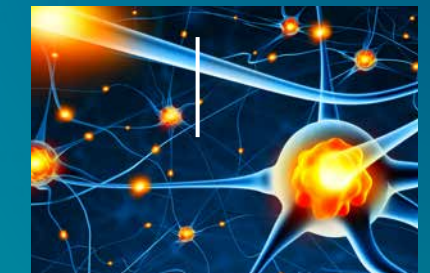
Prof. Dr. Alexander Kurz (im Bild links), Vorstand der Fraunhofer-Gesellschaft, überreicht Prof. Dr. Ulrich Trottenberg für seine großen Verdienste die Fraunhofer-Medaille.



## Einar Smith veröffentlicht Biografie über Carl Adam Petri

SCAI-Forscher Dr. Einar Smith würdigt Prof. Dr. Carl Adam Petri als einen der bekanntesten deutschen Informatiker mit einer Biografie. Die nach Petri benannten »Petri-Netze« bezeichnen eine Methode zur Beschreibung »nebenläufiger« Prozesse. Petri, 2010 verstorben, war Leiter des GMD-Instituts, aus dem später SCAI hervorging. Petri erhielt zahlreiche Auszeichnungen, darunter 1997 den Siemens-Ring von Bundespräsident Roman Herzog auf Schloss Birlinghoven.

2014



## Molekulare Ursachen von Alzheimer im Blick

SCAI bündelt sein Know-how, um neue Erkenntnisse für eine bessere Behandlung neurodegenerativer Erkrankungen wie Alzheimer oder Parkinson zu gewinnen. Mit AETIONOMY hat SCAI ein Projekt konzipiert, das einen Big-Data-Ansatz auf die Demenzforschung anwendet, um möglichst frühe Krankheitsmechanismen ausfindig zu machen und klinisch zu validieren.



# 20 Jahre Fraunhofer SCAI – 2015 bis 2020: Weichenstellungen für die Zukunft

## Maschinelles Lernen als neues Paradigma in der Forschung

Beim Maschinellen Lernen (ML) sind Daten die treibende Kraft. Erst heute reichen die Rechnerleistungen aus, um die riesigen Datenmengen schnell genug zu bearbeiten. ML und Künstliche Intelligenz revolutionieren zahlreiche Anwendungen. SCAI konzentriert sich auf Methoden, bei denen Expertenwissen in den ML-Prozess einfließt.

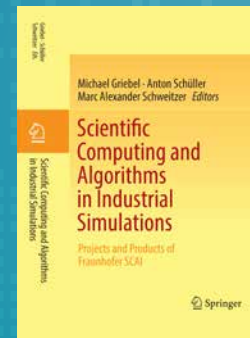


Zur Auszeichnung von Dr. Klaus Stüben (zweiter von rechts) gratulieren:  
Prof. Dr. Ulrich Trottenberg,  
Prof. Dr. Michael Griebel und  
Prof. Dr. Marc Alexander Schweitzer  
(von links).

2016

## Mathematische Algorithmen werden zu Softwarelösungen

Das Springer-Buch »Scientific Computing and Algorithms in Industrial Simulations – Projects and Products of Fraunhofer SCAI« beschreibt die SCAI-spezifische Vorgehensweise, neue mathematische Algorithmen in Softwareprodukte zu gießen und in industriellen Anwendungen einzusetzen.



2018

## Textmining für die Alzheimer-Forschung

Dr. Alpha Tom Kodamullil erhält den renommierten Hugo-Geiger-Preis des Bayerischen Staatsministeriums für Wirtschaft, Landesentwicklung und Energie. Ihr innovativer Ansatz zur Analyse der Ursachen der Alzheimer-Krankheit trägt zur Entwicklung neuer Diagnoseverfahren und Medikamente bei. Ihre Doktorarbeit liefert neue Einblicke in die Zusammenhänge zwischen verschiedenen Prozessen im menschlichen Körper.



2020

2015



## Turbo für Gleichungssysteme entwickelt sich zum Welterfolg

Der Mathematiker Dr. Klaus Stüben erhält für seine wissenschaftlichen Verdienste um die Entwicklung der algebraischen Mehrgitterverfahren (AMG) den Fraunhofer-Taler. Er erkannte Anfang der 1980er Jahre als einer der ersten die Bedeutung von AMG für die Lösung großer Gleichungssysteme. Ihm gelang es, AMG für zahlreiche industrielle Probleme nutzbar zu machen.

2017



## Juliane Fluck und Tanja Clees erhalten Rufe auf Professuren

Dr. Juliane Fluck (links), stellvertretende Leiterin des Geschäftsfelds *Bioinformatik*, wird zur Professorin für »Intelligent Information Retrieval and Pattern Recognition« an der Universität Bonn berufen.  
Dr. Tanja Clees, Leiterin des Geschäftsfelds *High Performance Analytics*, folgt einem Ruf auf eine Professur an der Hochschule Bonn Rhein-Sieg. Dort setzt sie ihre Forschung zur Optimierung von Energienetzen fort.

2019

2023

## Strategieprozess: SCAI ist gut gerüstet für die Zukunft

Der Strategieprozesses »SCAI 2023« zeigt, dass das Institut in wissenschaftlicher und wirtschaftlicher Hinsicht gut aufgestellt ist. Das personelle Wachstum um rund 30 Prozent in den letzten drei Jahren ermöglicht es dem Institut, zahlreiche Themen voranzutreiben, die über viel Potenzial verfügen. Hierzu gehören Künstliche Intelligenz und Maschinelles Lernen, Modellierung neurodegenerativer Erkrankungen, Simulation von Energienetzen, Quantencomputing und die Lösung komplizierter Optimierungsaufgaben.



# Online-Rubriken

---

## Publikationen und Mediathek

[www.scai.fraunhofer.de/de/mediathek.html](http://www.scai.fraunhofer.de/de/mediathek.html)

## Graduierungsarbeiten

[www.scai.fraunhofer.de/de/mediathek/abschlussarbeiten.html](http://www.scai.fraunhofer.de/de/mediathek/abschlussarbeiten.html)

## Anfahrt

[www.scai.fraunhofer.de/de/kontakt.html](http://www.scai.fraunhofer.de/de/kontakt.html)

## Lehre

[www.scai.fraunhofer.de/de/ueber-uns/lehre.html](http://www.scai.fraunhofer.de/de/ueber-uns/lehre.html)

## Veranstaltungen

[www.scai.fraunhofer.de/de/veranstaltungen.html](http://www.scai.fraunhofer.de/de/veranstaltungen.html)

# Impressum

---

## Kontakt

Fraunhofer Institut für Algorithmen  
und Wissenschaftliches Rechnen SCAI  
Schloss Birlinghoven 1  
53757 Sankt Augustin

Telefon +49 2241 14-4300

Fax +49 2241 14-2460

[info@scai.fraunhofer.de](mailto:info@scai.fraunhofer.de)

[www.scai.fraunhofer.de](http://www.scai.fraunhofer.de)

## Institutsleiter

Prof. Dr. Michael Griebel  
Telefon +49 2241 14-4300  
[michael.griebel@scai.fraunhofer.de](mailto:michael.griebel@scai.fraunhofer.de)

## Redakteure

Diplom-Journalist Michael Krapp, Dr. Anton Schüller

## Gestaltung und Produktion

Carina Steinborn

© 2021

Fraunhofer Institut für Algorithmen  
und Wissenschaftliches Rechnen SCAI, Sankt Augustin

Die Vervielfältigung jeglichen Materials unterliegt der  
redaktionellen Genehmigung.

## Bildnachweise

S. 8 (oben): filadendron – istock.com  
S. 8 (Mitte): bernardbodo – stock.adobe.com  
S. 9 (Mitte): adiutaByte GmbH  
S. 9 (unten): Fraunhofer IAIS  
S. 10 (oben, Mitte): privat  
S. 15: rawpixel.com/Freepik  
S. 22: Bartek Wróblewski – stock.adobe.com  
S. 23: 安琦 王 – stock.adobe.com  
S. 25: Thomas Sztanek – stock.adobe.com  
S. 26: Fraunhofer ICT  
S. 27: Björn Wylezich – stock.adobe.com  
S. 29: Christian Camus – stock.adobe.com  
S. 31: Fraunhofer ITWM, Fraunhofer SCAI  
S. 33 (oben): ipopba – stock.adobe.com  
S. 33 (unten): sewcream – stock.adobe.com  
S. 35: Ralph Thesen  
S. 37 (2004): Sauber-Petronas und Fluent  
S. 41 (2015): adimas – stock.adobe.com  
S. 42 (2015): lassedesignen – stock.adobe.com/Fraunhofer SCAI  
S. 43 (2018, rechts): privat  
S. 43 (2019): Marc Mueller/dedinag/Fraunhofer

Alle anderen Fotos: © Fraunhofer SCAI

# Notizen



