



Fraunhofer Institut
Algorithmen und Wissen-
schaftliches Rechnen

2007

Jahresbericht



Mit Video-DVD zu
den SCAI-Produkten

Die umseitige Titelgrafik sowie die Grafik der
Kapitelanfänge basiert auf Zufalls-Algorithmen.



Die DVD fehlt? Bitte schauen Sie unter:
www.scai.fraunhofer.de/scai-filme.html



Weitere Informationen zur DVD finden Sie auf den Seiten 24 und 25.



Fraunhofer Institut
Algorithmen und Wissen-
schaftliches Rechnen

2007
Jahresbericht

Sehr geehrte Damen und Herren,

wenn Sie diesen Jahresbericht in den Händen halten, befinden wir uns im *Jahr der Mathematik* 2008. Die Bilanz des ersten Halbjahrs 2008 fällt für das Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI außerordentlich positiv aus. Besonders hervorzuheben ist der Besuch von Bundespräsident Horst Köhler, der sich am 29. Mai auf Schloss Birlinghoven über die Bedeutung der angewandten Mathematik für die Industrie informiert hat. Meine Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter präsentierten dem Bundespräsidenten aktuelle Beispiele ihrer Forschungsarbeiten. »Ich bin beeindruckt und fasziniert. Hier entsteht Zukunft – für uns alle«, schrieb der Bundespräsident uns ins Gästebuch. Das Fraunhofer SCAI ist das einzige mathematische Forschungsinstitut, das Horst Köhler im »Jahr der Mathematik« besucht, neben dem Arithmeum in Bonn.

Das Bild der Mathematik entsteht bereits im Schulalter. Dass mathematische Forschung, wenn sie attraktiv präsentiert wird, Begeisterung bei Schülerinnen und Schülern auslösen kann, zeigen uns die Ausstellungen und Veranstaltungen im »Jahr der Mathematik«. Die Exponate auf dem Wissenschaftsschiff »MS Wissenschaft«, das bis zum 4. September auf deutschen Wasserstraßen unterwegs war, weckten großes Interesse. Das Fraunhofer SCAI ist auf dem Schiff mit zwei Exponaten zur Hochwassersimulation und zur Packungsoptimierung vertreten. Die Faszination der Mathematik zu vermitteln, gelang auch der mathematischen Wissenschaftsshow »Manege der Innovationen«. Fraunhofer-Präsident Prof. Dr. Hans-Jörg Bullinger gab die Manege am 14. Juni auf Schloss Birlinghoven vor 600 Schülerinnen und Schülern frei. Auf der Bonner Wissenschaftsnacht am 4. Juli wurde die Show vor tausenden Zuschauerinnen und Zuschauern mit großem Erfolg erneut aufgeführt. Publikumsmagneten sind auch die zahlreichen Vorträge und Veranstaltungen des Fraunhofer SCAI, in denen wir zeigen, wie fundamental sich die Welt in den letzten 30 Jahren durch Rechner und Algorithmen verändert hat.

Wie wichtig Mathematik in unserer technisch geprägten Realität ist, sollte bereits in der Schule erfahrbar sein. Es ist daher unser besonderes Anliegen, dass mathematisch-algorithmisches Denken schon dort vermittelt wird. Das »algorithmische Dreieck« besteht hierbei aus dem Verständnis von Anwendungsproblem, mathematischem Modell und der Umsetzung auf dem Rechner. Einfache Programmiersprachen und die Verfügbarkeit von

Computern in der Schule sind daher die Grundlage, damit Schüler selbst Mathematik entdecken und am Rechner erleben können.

Preisgekrönte Forschung

Bei all den vielen Aktivitäten und dem enormen Medieninteresse an der Mathematik im laufenden Jahr, sollen die Erfolge und Ergebnisse für das Fraunhofer SCAI im Jahr 2007 nicht verblasen. Im Berichtszeitraum des vorliegenden Jahresberichts gelang es dem Institut bereits zum zweiten Mal, den Josef-von-Fraunhofer-Preis zu gewinnen. Nach der Verleihung des Preises an die Optimierungsgruppe um Dr. Ralf Heckmann im Jahr 2002 gewannen diesmal Rodrigo Iza-Teran, Prof. Dr. Rudolph Lorentz und Clemens-August Thole aus der Abteilung *Numerische Software* den renommierten Preis für ihre Entwicklung zur Kompression von Simulationsergebnissen. Die am Fraunhofer SCAI entstandenen Kompressionsalgorithmen sind besonders auf Daten der Crash-Simulation (patentierte FEMZIP-Kompression) und auf meteorologische Daten ausgelegt. FEMZIP haben die meisten Automobilhersteller weltweit bereits lizenziert.

Software erfolgreich am Markt

Der Erfolg von FEMZIP steht in der Tradition der Entwicklung hochspezialisierter, forschungsintensiver Softwareprodukte, die das Institut kennzeichnen. In allen Geschäftsfeldern ist es in den vergangenen Jahren gelungen, solche Softwareprodukte zu entwickeln und sehr erfolgreich zu vermarkten:

Optimierung: Hier sind vor allem die Produkte AutoNester (Optimaler Zuschnitt von Textilien und Leder) und PackAssistant (Packungsoptimierung von Containern) zu nennen.

Simulationsanwendungen und Numerische Software: Produkte MpCCI (Multidisziplinäre Simulation), SAMG (Lösung großer Gleichungssysteme) und FEMZIP (Kompression numerischer Daten).

Bioinformatik: chemoCR (automatische computer-gestützte Erkennung chemischer Strukturformeln in Texten) und ProMiner (Datenextraktion und Textmining).

Mit einem Ertrag von 2,6 Millionen Euro im Jahr 2007 leistete der Produktbereich den wichtigsten Beitrag zu Finanzierung des Instituts aus Wirt-

schaftserträgen. Weiter- und Neuentwicklungen innovativer Softwareprodukte werden auch die weitere Entwicklung des Instituts in den nächsten Jahren bestimmen. Zusätzlich soll das Angebot an Dienstleistungen in Forschung und Entwicklung rund um bestehende Produkte ausgebaut werden.

Zur weiteren Professionalisierung des Vertriebs der Softwareprodukte wird das Institut noch im Jahr 2008 eine Firma unter Beteiligung der Fraunhofer-Gesellschaft gründen. Bis zum Jahr 2012 sollen sich die Produkterträge durch die Firmengründung mehr als verdoppelt haben.

Projekte und Kooperationen

Eine zweite starke Säule der Finanzierung des Instituts sind neben dem Vertrieb von Softwareprodukten eine Vielzahl von Forschungsprojekten in nationalen und internationalen Programmen der Forschungsförderung. In den acht Projekten des 6. und 7. Forschungsrahmenprogramms der Europäischen Kommission sowie in 16 Projekten der Förderung durch die Bundesministerien für Bildung und Forschung sowie für Wirtschaft und Innovation konnte das Institut im Jahr 2007 ebenfalls rund 2,6 Millionen Euro erwirtschaften. Gegenstand der Projektarbeiten sind explorative Forschung und Entwicklung im Vorfeld von Produktentwicklung und Vermarktung – einen Schwerpunkt bilden Projekte zum Thema *Grid Computing*.

Mit anderen Instituten der Fraunhofer-Gesellschaft arbeitet SCAI in Förderprogrammen des Fraunhofer-Vorstands zusammen. Diese Projekte dienen der gemeinsamen Vorlauforschung der Fraunhofer-Institute und der Entwicklung gemeinsamer FuE-Angebote für die Wirtschaft. Aktuell werden vier solcher Projekte bearbeitet. Mit Instituten der Max-Planck-Gesellschaft bestehen zudem strategische Kooperationsprojekte, die der Vernetzung grundlagenorientierter Forschung und industrieller Anwendungsforschung dienen. Im Zuge dieser Kooperation baut SCAI bestehende Arbeitsgruppen thematisch aus und legt die Grundlage für neue industrierelevante Anwendungsfelder und Arbeitsgruppen. Ein Beispiel ist die erfolgreiche Zusammenarbeit mit dem Max-Planck-Institut für Mathematik in den Naturwissenschaften in Leipzig beim effizienten Lösen großer Gleichungssysteme.



Strategische Hochschulpartnerschaften

Die Anbindung des Instituts SCAI an die Universität zu Köln hat sich über meinen aktiven Lehrstuhl sehr positiv entwickelt. Dies drückt sich unter anderem in der Zahl der an diesem Lehrstuhl – allein seit 2006 – entstandenen 20 Diplomarbeiten aus. In der Außenstelle des SCAI an der Universität sind derzeit 15 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter sowie Studierende der Abteilung *Numerische Software* tätig. Der Pavillon der Außenstelle wurde in den Jahren 2006 und 2007 mit Mitteln des Landes Nordrhein-Westfalen erweitert. Eine besonders enge Kooperation besteht mit der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Caren Tischendorf, die ebenfalls im SCAI-Pavillon angesiedelt ist.

Durch das Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT) in Bonn besteht eine enge Verbindung der SCAI-Abteilung Bioinformatik unter Leitung von Prof. Dr. Martin Hofmann-Apitius zur Universität Bonn, die in den nächsten Jahren noch erheblich verstärkt werden soll.

Ich wünsche Ihnen eine spannende Lektüre, viel Spaß und zahlreiche neue Erkenntnisse im »Jahr der Mathematik«.

Ihr

Ulrich Trottenberg
Leiter des Fraunhofer-Instituts für Algorithmen und
Wissenschaftliches Rechnen SCAI

DIFF-CRASHIP
Arborescence
CutPlanner
MioCC
SOAI-Mapper
PackAssistant

Vorlauftforschung
SIMDAT@neurist
ESPRESSO-Computing
RCE

Fraunhofer Gesellschaft
Strategische Partnerschaften
Fraunhofer IUK-Verbund
Bonn-Aachen International Center for Information Technology

Inhaltsverzeichnis

Vorwort	4
Das Institut im Profil	10
Das Institut in Zahlen	12
SCAllights	14
Fraunhofer SCAI – Partner der Wirtschaft	24

Produkte

AutoNester	Automatische Verschachtelung und Verschnittoptimierung	26
PackAssistant	Software zur automatischen Befüllung von Behältern mit komplexen Bauteilen	28
CutPlanner	Produktionsplanung in der Textilindustrie	30
MpCCI	Der Industriestandard zur Kopplung kommerzieller Simulationscodes	32
SCAIMapper	Datenübertragung von Umform- auf Crash-Modelle	36
SAMG	Eine Softwarebibliothek zur skalierbaren Lösung großer linearer Gleichungssysteme	38
FEMZIP/GRIBZIP	Standard für die Kompression numerischer Simulationsergebnisse	42
DIFF-Crash	Visuell unterstützte Stabilitätsanalyse von Simulationsergebnissen	44
DesParO	Interaktive Umgebung zur Optimierung von Design-Parametern	46
ProMiner	Erkennung biomedizinischer Fachbegriffe in wissenschaftlichen Texten	48
chemoCR	Von der Zeichnung bis zur Reaktionsdatenbank: Wissensextraktion aus der chemischen Literatur	50

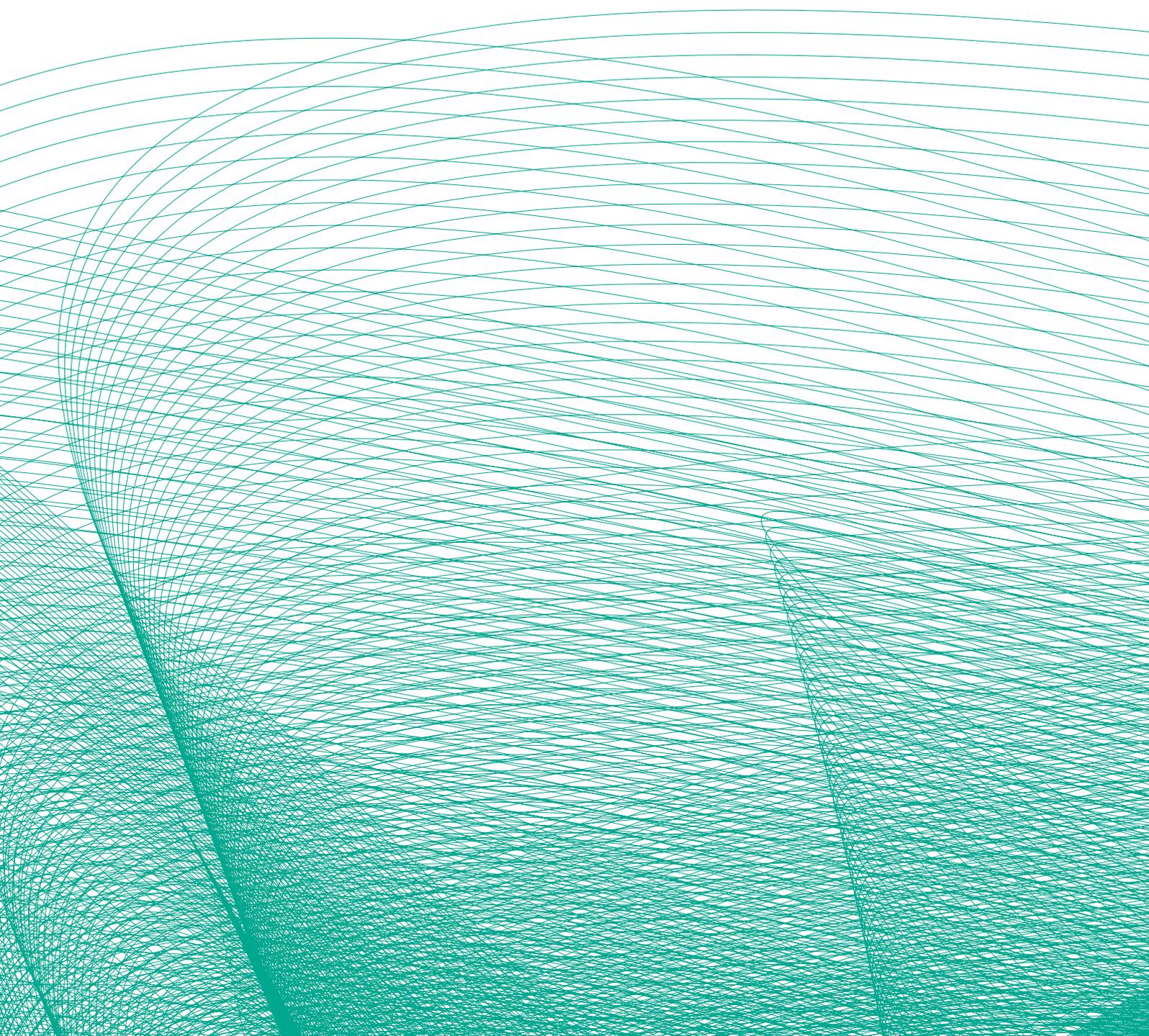
Projekte

Grid Computing	Einführung	54
Praxisprojekte	D-GRID-Initiative, InGrid, PartnerGrid, ProGRID, BEinGRID, CoreGRID	56
SIMDAT	Data Mining und Grid Computing für industrielle Anwendungen	58
@neurist	Grid Computing als Basis für die personalisierte Medizin	60
RCE	Reconfigurable Computing Environment	62
Vorlaufforschung	Projekte der Vorlaufforschung am Fraunhofer SCAI	64
LIP	Plattform für maschinelles Lernen	65
Hlibpro	Effiziente Lösung hierarchischer Matrizen	66
ESPreso++	ESPreso++ treibt die Simulation von Polymeren in der Industrie an	68
CAROD	Computer Aided Robust Design	69

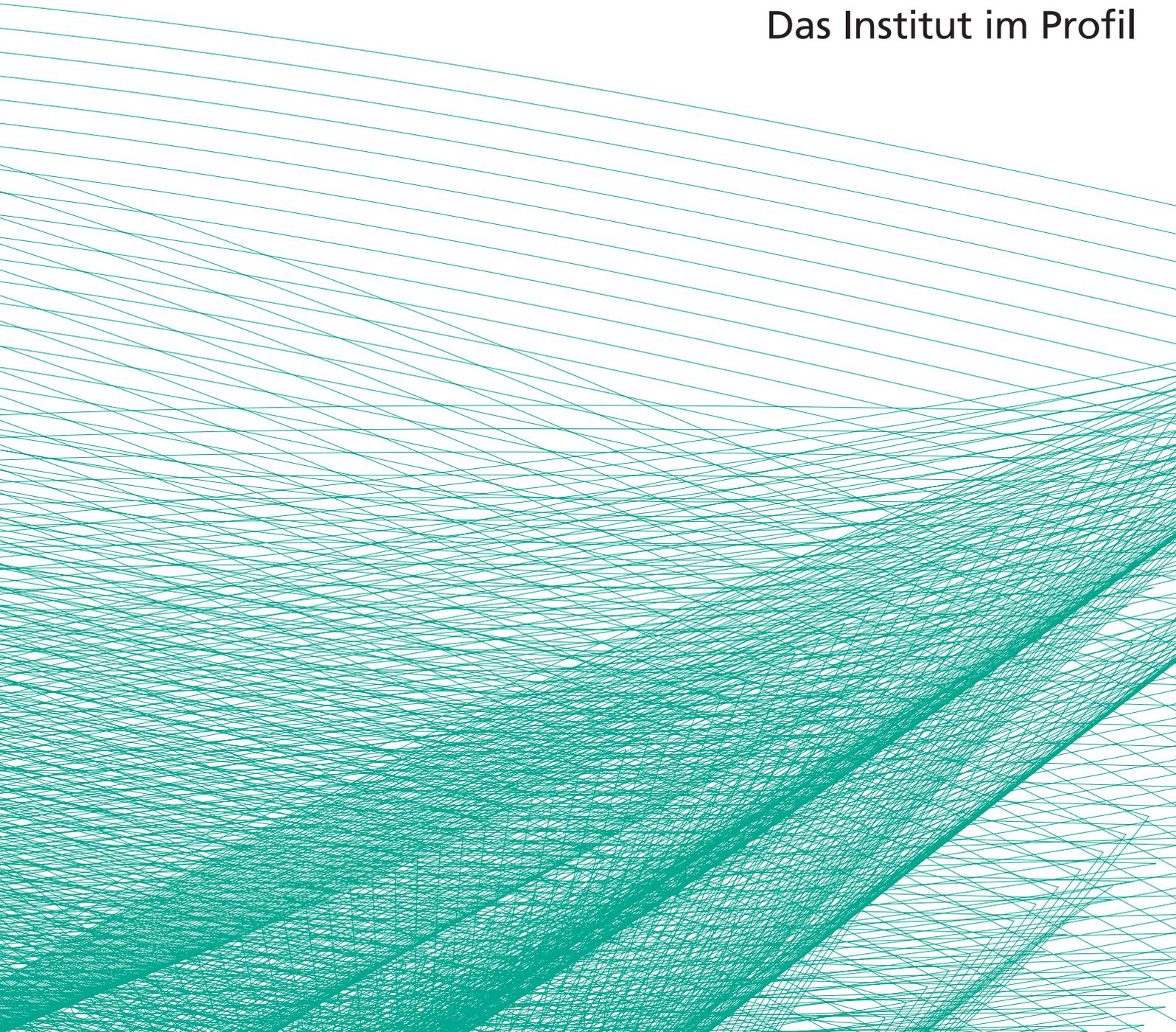
Hochschulkooperationen und Vernetzung in der Fraunhofer-Gesellschaft

Anbindung des Fraunhofer SCAI an Universitäten	72
Forschungspartnerschaften	73
Fraunhofer-Verbund IuK, Fraunhofer-Allianz Grid Computing, Themenverbände Verkehr und Numerische Simulation	74
Die Fraunhofer-Gesellschaft	75

Ausgewählte Publikationen	78
Vorträge im SCAI-Kolloquium Wissenschaftliches Rechnen	82
Graduierungsarbeiten	83
Lehrtätigkeiten	84
Mitarbeit in Gremien	85
Informationen zur Anreise	86
Adressen	87
Impressum	87



Das Institut im Profil



Das Institut im Profil

Das Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI ist Partner der Wirtschaft für Computersimulation und Optimierung sowie für Informationsextraktion aus großen Datenbeständen. Das Institut modelliert und optimiert industrielle Anwendungen, entwickelt Software und Services für Produktentwurf, Prozessentwicklung und Produktion, und bietet Berechnungen auf Hochleistungscomputern. Ziele dabei sind kürzere Entwicklungszeiten, kostengünstigere Experimente sowie optimierte Verfahrensabläufe.

Verbindungen zur universitären Forschung bestehen unter anderen über den Lehrstuhl des Institutsleiters Prof. Dr. Ulrich Trottenberg an der Universität zu Köln. Er leitet zugleich das Institut für Simulations- und Softwaretechnik am Deutschen Zentrum für Luft und Raumfahrt (DLR).

Geschäftsfelder

Simulationsanwendungen

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

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

Einen Schwerpunkt bilden gekoppelte Simulationen, etwa die gleichzeitige Berechnung von Strömungsvorgängen und daraus resultierende Belastungen von Strukturen. Weitere Beispiele sind die Belastung von Bauteilen beim Aufheizen oder Abkühlen oder die Wechselwirkung elektromagnetischer Felder mit Strukturen. Ein weiterer Schwerpunkt ist die Entwicklung von Methoden

und Software im Hochleistungsrechnen, im verteilten Rechnen und im Computational Chemical Engineering.

Numerische Software

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

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

Bioinformatik

Die Abteilung Bioinformatik am Fraunhofer-Institut SCAI erforscht und entwickelt neue Lösungen in drei Bereichen der angewandten, biomedizinischen Informatik

- Informationsextraktion / Semantische Textanalyse
- Angewandte Chemoinformatik
- Datengrid / Grid-Infrastruktur

Zu den Partnern und Kunden der Abteilung gehören sowohl die forschende Pharmaindustrie, als auch Unternehmen der Biotechnologie und Software-Häuser der Life-Science-Informatik. SCAI positioniert sich dabei an der Schnittstelle zwischen akademischer und industrieller Forschung. Als Vertreter angewandter Forschung beteiligt sich das Institut auf akademischer Seite an der Ausbildung von Studierenden des Studiengangs »Life Science Informatics« am Bonn-Aachen International Centre for Information Technology (B-IT), gleichzeitig bestehen Partnerschaften zu einer Vielzahl öffentlich geförderter, nationaler und europäischer Forschungsprogramme.

Optimierung

Optimierungsaufgaben stellen sich in der industriellen Praxis in vielfältiger Form. Beim ressourcensparenden Einsatz von Personal und Material, bei der Auslastung von Produktionsanlagen oder bei der Planung von Transportwegen und Zulieferung – Methoden der mathematischen Optimierung und der diskreten Simulation helfen, unternehmerische Entscheidungen zu treffen, Prozesse zu verbessern und Kosten zu sparen. Typische Anwendungsfelder sind:

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

SCAI bietet Software für Optimierungsanwendungen an (etwa für zwei- und dreidimensionale Packungs- und Anordnungsprobleme). Im Industrieauftrag entstehen maßgeschneiderte Lösungen für komplexe Fragen. Dadurch können wir die höchstmögliche Kosten- und Zeitersparnis für den Kunden in seinem speziellen Produktions- und Arbeitsumfeld sicherstellen. Die Software-Unterstützung bei der Lösung oft zeitaufwändiger Routineprobleme sorgt darüber hinaus für eine Entlastung und Motivation der Mitarbeiter.

Kuratorium

Prof. Dr. Dr. h.c. Norbert Szyperski
(Kuratoriumsvorsitzender)
InterScience GmbH, Universität zu Köln

Dr. Bernd Thomas
(stellv. Kuratoriumsvorsitzender)
Continental AG

Touraj Gholami
BMW AG

Dr. Daniel Keesman
Tailormade Brand Consulting

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

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

Dr. Claus Axel Müller
T-Systems, Solutions for Research GmbH

Karl Solchenbach
Intel GmbH

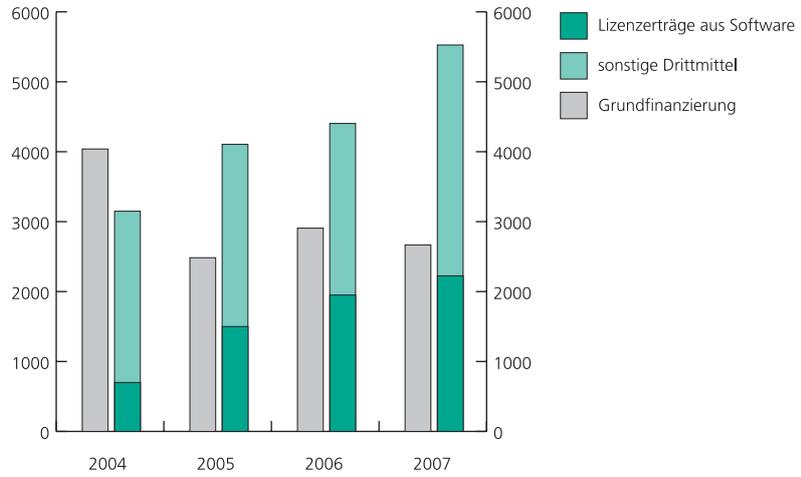
Organisation des Instituts

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

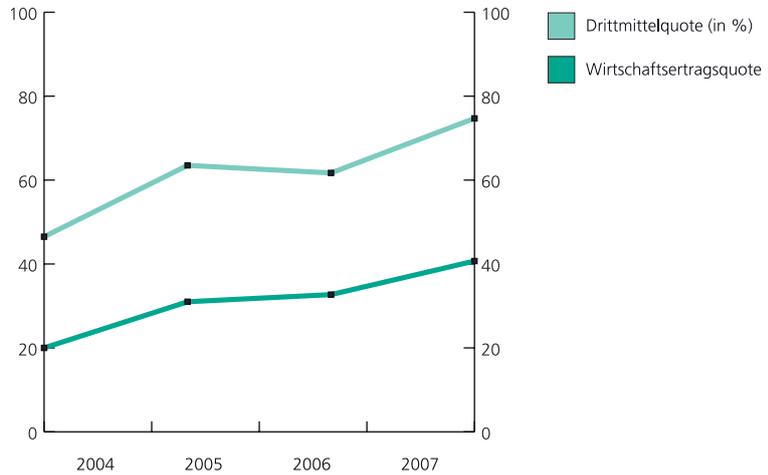
Das Institut in Zahlen

Finanzierung, Erträge

Der Trend zur Steigerung der Erträge hat sich im vergangenen Jahr fortgesetzt: Die Erträge aus Drittmitteln sind von 2004 bis 2007 von gut 3 Millionen auf über 5,5 Millionen Euro gestiegen. Im gleichen Zeitraum gelang es dem Institut, die Lizenz Erlöse aus Software zu verdreifachen.

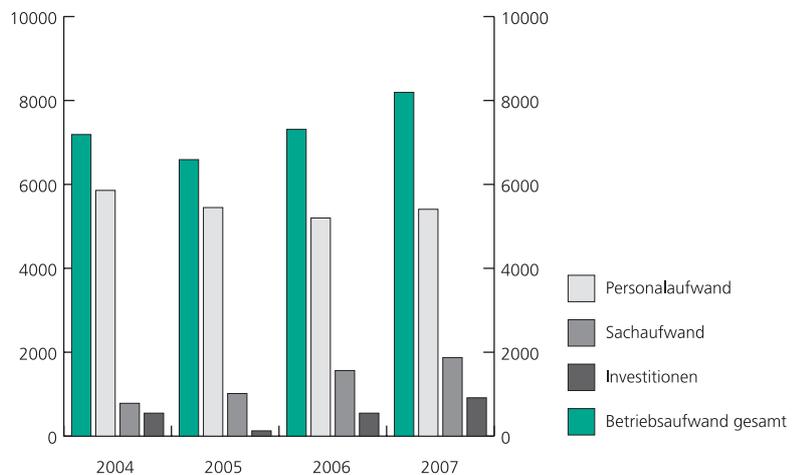


Die Gesamtquote externer Erträge stieg von 46,5 Prozent im Jahr 2004 auf 74,7 Prozent im Jahr 2007. Die Quote der Wirtschaftserträge hat sich im gleichen Zeitraum von 20 auf 40,7 Prozent mehr als verdoppelt. Auch in den nächsten Jahren wird ein weiteres Wachstum erwartet.



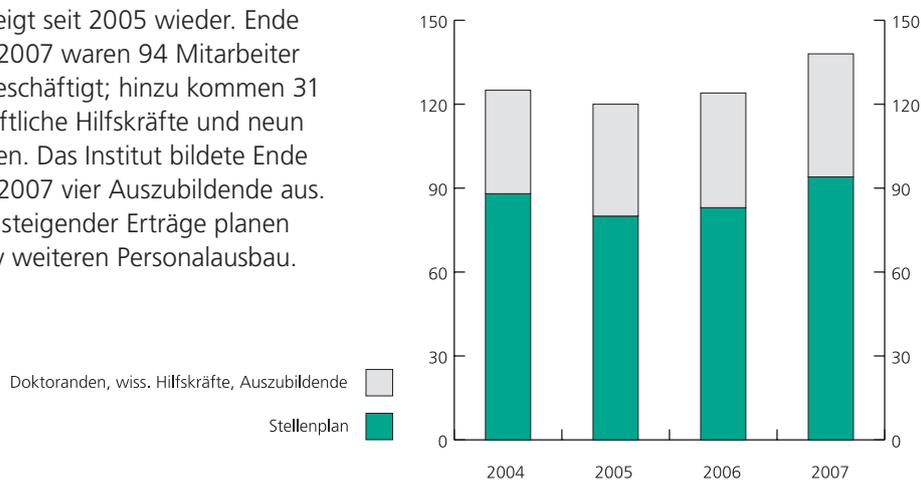
Aufwand

Der Betriebsaufwand des Instituts ist im Zeitraum von 2004 (6,6 Millionen Euro) bis 2007 (7,3 Millionen Euro) um rund 10 Prozent gestiegen. Den wesentlichen Anteil bildet dabei der Personalaufwand. Während der Personalanteil am Betriebshaushalt in 2004 noch bei rund 88 Prozent lag, ist er 2007 auf 74 Prozent zurück gegangen. Der Investitionshaushalt lag 2007 mit 914 T€ – bedingt durch größere Ersatzbeschaffungen im Server- und Netzwerkbereich – fast doppelt so hoch wie im sonstigen Durchschnitt.



Mitarbeiter

Die Zahl der Mitarbeiter am Fraunhofer SCAI steigt seit 2005 wieder. Ende Dezember 2007 waren 94 Mitarbeiter am SCAI beschäftigt; hinzu kommen 31 wissenschaftliche Hilfskräfte und neun Doktoranden. Das Institut bildete Ende des Jahres 2007 vier Auszubildende aus. Auf Grund steigender Erträge planen wir offensiv weiteren Personalausbau.



94 Mitarbeiter
 31 wissenschaftliche Hilfskräfte
 9 Auszubildende
 9 Doktoranden

Bundespräsident Horst Köhler: »Ich bin beeindruckt und fasziniert. Hier entsteht Zukunft – für uns alle«

Zum Jahr der Mathematik 2008 hat sich der Bundespräsident auf Schloss Birlinghoven über die Bedeutung der angewandten Mathematik für die Forschung informiert. Die Forscherinnen und Forscher des Instituts präsentierten dem Bundespräsidenten ausgewählte aktuelle Beispiele ihrer Arbeiten. Unter den Gästen aus Wissenschaft, Politik und Wirtschaft waren der Parlamentarische Staatssekretär im Bundesministerium für Bildung und Forschung, Thomas Rachel, der Nordrhein-Westfälische Innovationsminister, Professor Dr. Andreas Pinkwart, und der Vorstand der Fraunhofer-Gesellschaft für Finanzen und Controlling, Dr. Alfred Gossner.

Die angewandte Mathematik ist zugleich Grundlage des technischen Fortschritts sowie Werkzeug und Forschungsgegenstand für das Fraunhofer SCAI. Bundespräsident Köhler trug sich mit den Worten »Ich bin beeindruckt und fasziniert. Hier entsteht Zukunft – für uns alle« in das Gästebuch des Instituts ein.

Auch Staatssekretär Rachel zeigte sich fasziniert von den vorgestellten Forschungsergebnissen und ihrer Umsetzung in innovative Produkte am SCAI. Die vorgestellten Innovationen reichten von Datenkompressionsverfahren für die Fahrzeug-Crashsimulation oder für Wetterdaten über Methoden zur Berechnung der

optimalen Befüllung von Containern mit hochkomplexen Teilen aus der industriellen Fertigung bis zur integrierten Simulation mehrerer physikalischer Disziplinen mit der von SCAI entwickelten Software MpCCI, die zu einem Weltstandard geworden ist.

Institutsleiter Prof. Dr. Ulrich Trottenberg sagte: »Wir möchten mit unserer industrienahe Forschungsarbeit am Fraunhofer-Institut SCAI und unseren weltweit eingesetzten Algorithmen die Bedeutung der angewandten Mathematik für Wirtschaft und Gesellschaft demonstrieren und zu einer neuen mathematischen Aufbruchstimmung in Öffentlichkeit und Schule beitragen.«



Erfolgreicher Packversuch: Der Bundespräsident erreichte auf Anhieb eine optimale Anordnung komplexer Bauteile.



Dr. Alfred Gossner, Fraunhofer-Vorstand für Finanzen, und Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, Institutsleiter des Fraunhofer SCAI, begrüßten Horst Köhler und Frau Eva Luise bei ihrer Ankunft vor Schloss Birlinghoven.



Dr. Peter Terhoeven (links), Moeller GmbH in Bonn, erläuterte dem Bundespräsidenten den Einsatz der Software MpCCI zur Lichtbogensimulation in Elektro-Schaltanlagen.



Horst Köhler trug sich ins Gästebuch des Instituts ein.

SCAI-Forscher gewinnen den Joseph-von-Fraunhofer-Preis 2007

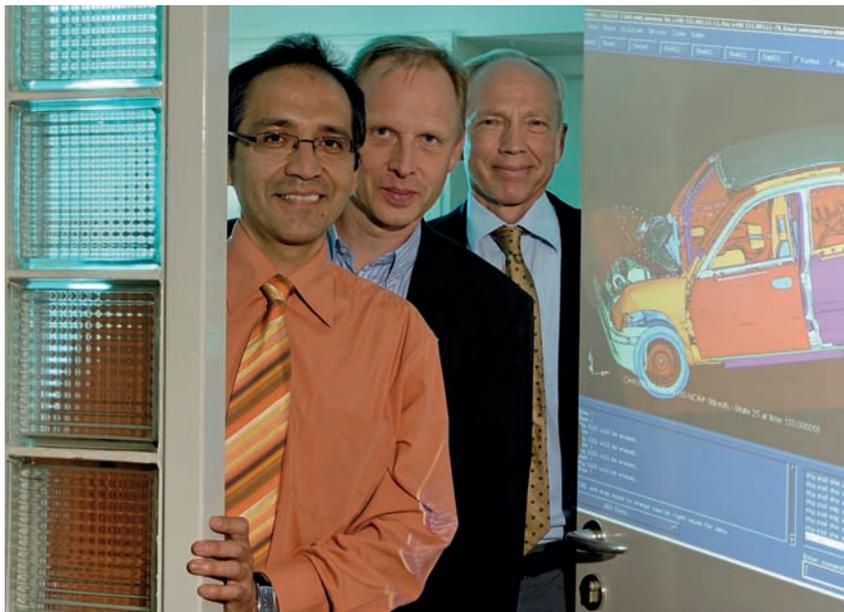
Für ihre Software zur Kompression von Simulationsergebnissen erhalten die drei SCAI-Forscher Rodrigo Iza-Teran, Prof. Dr. Rudolph Lorentz und Clemens-August Thole den mit 20 000 Euro dotierten Joseph-von-Fraunhofer-Preis 2007.

Zunehmend genauere Simulationen benötigen immer mehr Speicher. Dank einer neuen Komprimierungs-Software ist das für Crash- und Wettersimulationen kein Problem: Denn die Datenberge schrumpfen auf ein Zehntel ihrer ursprünglichen Größe. Die Jury überzeugten zum einen die hervorragenden mathematischen Methoden und zum anderen der große Erfolg, den die Kompressionsverfahren bei den Anwendern erzielt haben.

Ein Anwender ist der Deutsche Wetterdienst. Seit 2008 werden dort für jede Prognose bis zu 20 leicht verschiedene Simulationsläufe berechnet, um Unsicherheiten zu verringern. So entstehen im Jahr etwa 2,5 Petabyte Daten. Ein Petabyte entspricht 2000 Festplatten von 500 Gigabyte. Mit seinem Team hat Thole eine Software entwickelt, die Wetterdaten im GRIB-Format um den Faktor 2,5 komprimiert. Für die Simulationen wird Deutschland mit einem Netz von Gitterpunkten überzogen. Die Ergebnisse an benachbarten Punkten hängen jedoch voneinander ab. An vielen Gitterpunkten kann man die Werte gut vorher-sagen, braucht sie nicht zu speichern und kann so die Datengröße reduzieren.

Auch aus der Automobilindustrie sind Simulationen nicht mehr wegzudenken. Allerdings benötigt bereits ein virtueller Crashtest mehrere Gigabyte Speicherplatz. Pro Tag fährt so ein Modell etwa 100 bis 150 Mal im Rechner gegen die Wand. Da kommen schnell Daten von 100 Terabyte und mehr zusammen. Je nach Anwenderbedarf können die Wissenschaftler des Fraunhofer SCAI die Simulationsdaten um den Faktor 5, 7 oder 10 komprimieren. Fast alle deutschen Automobilhersteller setzen die Software mittlerweile ein. Die Dekompression ist bereits direkt in viele Programmpakete integriert, sodass sich die Dateien ohne Zwischenschritt zum Entpacken öffnen.

Die Preisträger:
Rodrigo Iza-Teran,
Clemens-August
Thole, Prof. Dr.
Rudolph Lorentz
(v. l. n. r.)



**Joseph-von-Fraunhofer-Preis:
Forschen für die Praxis**
Seit 1978 verleiht die Fraunhofer-Gesellschaft alljährlich Preise für herausragende wissenschaftliche Leistungen ihrer Mitarbeiter, die anwendungsnahe Probleme lösen. Mehr als 200 Forscherinnen und Forscher haben diesen Preis inzwischen gewonnen. In diesem Jahr wurden drei Preise dotiert mit jeweils 20 000 Euro vergeben.



SCAI eröffnet Außenstelle an der Universität zu Köln

Mit neuen Themen zeigt Europas führende Organisation für angewandte Forschung Präsenz in der Domstadt. Das Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI ist jetzt mit einer seiner Forschungsabteilung »Numerische Software« an der Universität zu Köln vertreten.

Zur Eröffnung der Außenstelle begrüßte Prof. Dr. Ulrich Trottenberg Gäste aus Wirtschaft, Politik und Wissenschaft. Professor Dr. Axel Freimuth, Rektor der Universität zu Köln, Elfi Scho-Antwerpes, Bürgermeisterin der Stadt Köln, sowie Professor Dr. Ulrich Buller, Vorstand für Forschungsplanung der Fraunhofer-Gesellschaft, richteten Grußworte an die Gäste.

In kurzen Fachvorträgen gaben die Wissenschaftler der Außenstelle Einblicke in ihre künftigen Kölner Forschungsaktivitäten: Schnelle Lösungsverfahren für Gleichungssysteme mit 100 Millionen Unbekannten, Numerische Simulation für das Chip Design sowie Kompressionsverfahren für Simulationsdaten.

SCALIGHTS
STRAHLUNG



Spannende Gespräche zur Eröffnung der Kölner Außenstelle des Fraunhofer SCAI.



Aufmerksame Zuhörer: Prof. Dr. Axel Freimuth, Rektor der Universität zu Köln, Elfi Scho-Antwerpes, Bürgermeisterin der Stadt Köln, und SCAI-Institutsleiter Prof. Dr. Ulrich Trottenberg.

Innovationspreis der Volksbank: Kein Schrott zuviel vom Stahlprofil

Für die mustergültige Zusammenarbeit von Wirtschaft und Wissenschaft hat eine Jury aus renommierten Experten den Fraunhofer-Instituten für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI und für Intelligente Analyse und Informationssysteme IAIS einen Innovationspreis der Volksbank Bonn Rhein-Sieg verliehen.

Lydia Franck und Dr. Onno Garms aus der Abteilung Optimierung des SCAI haben eine Idee der Mannstaedt GmbH in Troisdorf aufgegriffen und eine Software zur Längenoptimierung beim Zuschnitt von Stahlprofilen entwickelt. Sie reduziert anfallenden Verschnitt und spart so erhebliche Mengen an teurem Material ein. Das innovative Programm nutzt speziell für dieses Problem entwickelte Algorithmen. Die Mannstaedt GmbH, führender Hersteller warmgewalzter Spezialprofilen aus Stahl, vermag durch die Fraunhofer-Software die Produktionskosten zu senken, ohne die Produkt- oder Servicequalität einzuschränken. Letztlich werden somit hochwertige Arbeitsplätze in der Region gesichert.



Preisträgerin Lydia Franck mit Urkunde und beim Festvortrag. SCAI-Institutsleiter Prof. Dr. Trottenberg (u.) lobte die Zusammenarbeit in der Region Bonn-Rhein-Sieg.



Workshops begeistern Mädchen zum Girls' Day

Verschlüsselte Nachrichten am Computer schreiben, selbst einen Rechner zusammenschrauben oder Gene aus Lebensmitteln abspalten. Dies sind nur drei Beispiele aus 20 Workshops, mit denen das Fraunhofer-Institutszentrum Schloss Birlinghoven IZB rund 80 Mädchen zum Girls' Day begeisterte. Bereits seit Wochen waren die begehrten Plätze ausgebucht.

Ein besonderes Highlight der Traditionsveranstaltung im Jahr 2008 war der Besuch von Prof. Dr. Andreas Pinkwart, Minister für Innovation, Wissenschaft, Forschung und Technologie des Landes Nordrhein-Westfalen. Er begrüßte die Mädchen gemeinsam mit Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, SCAL.

Manege frei für die Mathematik

Zum bundesweiten »Tag der Technik« 2008 hat sich der Park vor Schloss Birlinghoven in einen Zirkus-Festplatz verwandelt. Rund 600 Schülerinnen und Schüler besuchten zwei Vorstellungen der »Manege der Innovationen«. In der vom bekannten Fernsehmoderator Helge Haas moderierten Wissenschafts-Show standen die Zahlen im Mittelpunkt.

»Wenn man ein Seil straff um den Äquator legt und es dann um einen Meter verlängert, passt dann wohl eine Maus darunter hindurch?«, fragte Moderator Helge Haas das Publikum. Oder: Wie funktioniert eigentlich Datenkompression, ohne dass danach etwas fehlt? Geht nicht? Doch, geht! Auf die Zuschauer warteten zahlreiche Attraktionen aus der Welt der Wissenschaft.

Eine besondere Rolle kam dem Fraunhofer-Präsidenten Prof. Dr. Hans-Jörg Bullinger zu: Bei einem Wahrscheinlichkeits-Versuch verbarg er sich als »Hauptgewinn« hinter einer von drei Türen. Er berichtete dem jungen Publikum von seinen Erfahrungen mit Mathematik: »Man muss dran bleiben und einen langen Atem haben – dann macht Mathe richtig Spaß!«

Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, Sprecher des Institutsleiterrates des Fraunhofer-Institutszentrums Schloss Birlinghoven, ermutigte ebenfalls dazu, sich mit Mathematik zu beschäftigen: »Deutsche Unternehmer suchen händeringend nach Ingenieuren und Facharbeitern. Die beruflichen Chancen sind für Absolventinnen und Absolventen deshalb exzellent.«

Reporterin für die Forschung bei der Arbeit (rechts)

Dr. Tanja Clees (rechts unten) führte Minister Pinkwart durch einige der Workshops.



Fraunhofer-Präsident Prof. Dr. Hans-Jörg Bullinger (oben, rechts) im Gespräch mit Moderator Helge Haas

Herausforderung Packungsoptimierung: Schüler traten gegen die Software »Pack-Assistent« an.

Exponate des SCAI locken auf das Matheschiff »MS Wissenschaft«

Mit seinen Exponaten auf dem Matheschiff »MS Wissenschaft« fasziniert das Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI die zumeist jugendlichen Besucherinnen und Besucher. SCAI zeigt ein interaktives Exponat zum Thema Packungsoptimierung. Es bietet die Möglichkeit, sich spielerisch an die optimale Anordnung komplexer Teile in einer Kiste heranzutasten und so einen Eindruck von der Leistungsfähigkeit der Software PackAssistant zu erhalten. Die am SCAI entwickelte Packungslösung berechnet optimierte Befüllungen von Standardbehältern mit baugleichen Teilen anhand von 3D-Datensätzen. So passen bis zu 20 Prozent mehr Teile in einen Behälter. Das spart vor

allem Lager- und Transportkosten und erleichtert die Verpackungsplanung.

Großes Interesse findet auch das Exponat zur Hochwassersimulation – eine Gemeinschaftsarbeit des Fraunhofer-Instituts für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM in Kaiserslautern mit dem Fraunhofer SCAI.

Die Hochwassersimulation dient zur Bewertung von Maßnahmen im Hochwasserschutz. Das interaktive Spiel veranschaulicht Aspekte der Berechnung für ein einfaches Szenario. Es zeigt einen Schnitt durch eine Landschaft mit Bodenprofil und Wasserstand. Der zeitliche Verlauf des Wasserabflusses wird berechnet und dargestellt. Die Intensität des Regens und die Beschaffenheit der Erdoberfläche lassen sich verän-

dern. Benutzerinnen und Benutzer können einen Kompromiss zwischen der Genauigkeit des Ergebnisses und der benötigten Rechenzeit für die Simulation finden, indem sie die Anzahl der Zellen verändern.

Die »MS Wissenschaft« wird von Wissenschaft im Dialog realisiert und vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) und der Klaus Tschira Stiftung (KTS) finanziell unterstützt. Die Exponate stellen die teilnehmenden Wissenschaftsorganisationen und Hochschulen zur Verfügung.

Vom 7. Mai bis Anfang September 2008 legt das Wissenschafts-Schiff in insgesamt 31 Städten an und lädt die Besucher ein zum Ausprobieren, Mitmachen und Mitforschen.

SCALIGHTS
STADTLICHTS

Auch im Jahr der Mathematik ist die »MS Wissenschaft« wieder auf deutschen Wasserstraßen unterwegs.



© Karin Scheubner



© Ilja C. Hendel für Wissenschaft im Dialog



Wie viele Teile passen in die Kiste? Die Mädchen kamen am SCAI-Exponat »PackAssistant« ganz schön ins Schwitzen. Über die Auswirkungen von Überschwemmungen informierte das interaktive Exponat zur Hochwassersimulation (rechts unten).



SCAI fesselt Tausende auf der Bonner Wissenschaftsnacht

Mit zahlreichen Attraktionen hat sich das Fraunhofer-Institut SCAI auf der Bonner Wissenschaftsnacht am 4. Juli präsentiert, die in diesem Jahr von mehr als 25 000 Menschen besucht wurde.

Vom 2. bis 5. Juli nutzten tausende Besucherinnen und Besucher die Gelegenheit zu einem Besuch im Mathematikzelt »Kopf oder Zahl« auf dem Bonner Münsterplatz. Eine der Hauptattraktionen des Zeltes war das interaktive Exponat zur Packungsoptimierung des Fraunhofer SCAI. Auch zahlreiche prominente Gäste aus Wissenschaft, Wirtschaft und Politik nutzten die Gelegenheit sich zu informieren. Unter ihnen der ehemalige Außenminister und amtierende Vorsitzende der Deutschen

Telekom Stiftung, Dr. Klaus Kinkel, der sich vor allem für die Möglichkeiten der Packungsoptimierung interessierte.

Besucher des Zeltes, die die langen Warteschlangen vor dem SCAI-Exponat schreckten, hatten am 4. Juli die Gelegenheit, die Packungsoptimierung auf der »MS Wissenschaft« zu erproben. Das Mathematik-Schiff war zur Wissenschaftsnacht noch einmal an der Anlegestelle Erzbergufer, nördlich der Kennedybrücke vor Anker gegangen.

Doch auch auf der Wissenschaftsnacht selbst gab es Spannendes vom SCAI zu entdecken: Prof. Dr. Rudolph Lorentz, SCAI-Abteilung »Numerische Software« präsentierte die Forschungsarbeiten des Instituts

im Hauptgebäude der Universität. Seine multimediale Präsentation zur Veranschaulichung der Auswirkungen verlustbehafteter Datenkompression auf Bilder und Musik unterhielt und faszinierte die Besucher zugleich.

Höhepunkt der Wissenschaftsnacht jedoch waren zwei neue Aufführungen der Fraunhofer-Mathematikshow »Manege der Innovationen« im Zelt auf der Bonner Hofgartenwiese. Tausende Zuschauer fesselten die mathematischen Rätsel, Experimente und Präsentationen aktueller Arbeiten des Institutszentrums Schloss Birlinghoven. Aufgrund des großen Publikumserfolgs sind im Jahr 2009 weitere Aufführungen der Wissenschafts-Show geplant.

Voll besuchtes Zelt auf der Hofgartenwiese (l.) Moderator Helge Haas interviewt Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, Leiter des Fraunhofer-Instituts SCAI



Dr. Klaus Kinkel, Vorsitzender Deutsche Telekom Stiftung, informierte sich am Exponat »PackAssistant«.



Das Fraunhofer-Institut SCAI im Spiegel der Presse:

Der Preis der Gedanken

»[...] Welch ein Schatz sich aus öffentlich zugänglichen Archiven heben ließe, erläuterte in Brüssel Martin Hofmann-Apitius vom Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen. »Computer sind mehr und mehr in der Lage, Texte inhaltlich zu erschließen«, sagte er. »So können sie mit geeigneten Text-Mining-Programmen automatisch erkennen, wenn etwa in molekularbiologischen Arbeiten eine Beziehung zwischen bestimmten Genen und Eiweißmolekülen hergestellt wird, wenn andere Forscher die Rolle dieser Moleküle bei einer bestimmten Erkrankung beschreiben und wieder andere Risikofaktoren für diese Krankheit in verschiedenen Bevölkerungsgruppen analysieren.« [...]

Süddeutsche Zeitung,
Ausgabe vom 20. Februar 2007

Software reduziert die Datenmengen

»[...] ab 2008 wird beim Deutschen Wetterdienst die Prognose für die kommenden Tage etwa 20 Mal vorausberechnet. »Da entstehen im Jahr etwa 2,5 Petabyte an Daten«, sagt Clemens-August Thole vom Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen. Ein Petabyte entspricht etwa 2 000 Festplatten mit je 500 Gigabyte Speicherplatz. Um diese Menge klein zu rechnen, hat Thole mit seinem Team eine Software entwickelt, die Wetterdaten um den Faktor 2,5 reduzieren. [...]

Handelsblatt,
Ausgabe vom 15. Oktober 2007

Schöne Formeln

»[...] Mathematik steckt in jedem Handy, im Auto, im Internet – solche Sätze hört man jetzt anlässlich des Jahres der Mathematik immer wieder. Aber ist das wirklich Mathematik oder bloßes Rechnen? Ulrich Trottenberg, Chef des Fraunhofer-Instituts Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI, besteht darauf, dass auch die Ingenieurmathematik echte Mathematik ist. [...] Trotzdem sind angewandte und reine Mathematik immer noch zwei Kulturen, und man sollte nicht von jeder neuen mathematischen Entdeckung erwarten, dass sie in 20 Jahren eine praktische Anwendung findet. »Ich glaube nicht, dass Perelmans Beweis der Poincaréschen Vermutung irgendeine Bedeutung für die Wirklichkeit hat«, sagt Ulrich Trottenberg. »Es ist einfach eine mathematisch spannende Frage.« [...]

Die Zeit – Wissen,
Ausgabe vom 24. Januar 2008

Köhler und Millionen Unbekannte

»[...] Weltweit führend ist das Fraunhofer-Institut auch mit einer brandneuen Software, die chemische Formeln – die bislang nur als Pixelhaufen gesehen wurden – wie ein Mensch erkennen und einordnen kann. Die Forscher warben beim Staatsoberhaupt beredt für sich – Institutsleiter Dr. Ulrich Trottenberg: »Deutschland braucht Zukunft, Deutschland braucht Fraunhofer« – und betonten die Zusammenarbeit mit der Wirtschaft in der Region, sowie den Universitäten im Umkreis, die sich auch in der Gästeliste spiegelte: mit führenden Vertretern der Hochschulen und großer Firmen wie der Telekom AG, die Moeller GmbH und die Intel GmbH. [...]

Kölnische Rundschau,
Ausgabe vom 30. Mai 2008

Höchste Punktzahl für Köhler bei Logistik-Test

Bundespräsident besucht das Fraunhofer-Institut

»[...] Er und seine Gattin Eva Luise sind in erster Linie als Zuhörer auf den Campus des Fraunhofer-Instituts gekommen. Auf Einladung von Institutsleiter Ulrich Trottenberg möchte sich das Paar einen Überblick über die Aktivitäten der über 500 Wissenschaftler machen. Anlass ist das deutschlandweite »Jahr der Mathematik«. Nachdem die schwarze Limousine mit dem Kennzeichen »0-1« pünktlich um 10 Uhr vorgefahren ist, erläutert Trottenberg den rund 60 geladenen Gästen zunächst einmal, was es mit dem Festjahr so auf sich hat. Dass die Reize der Mathematik ja bekanntlich eher im Verborgenen liegen. Dass in den Schulen keine Notiz von der Ablösung der Formeln als wichtigstem mathematischen Instrument genommen wird. Und wie wichtig die Kunst des Rechnens für die heimische Wirtschaft ist. [...]

Rhein-Sieg-Anzeiger,
Ausgabe vom 30. Mai 2008

»[...] Allerdings mache ein Modell immer Abstriche von der Realität, sagt Ulrich Trottenberg, Leiter des Fraunhofer-Instituts für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI in Sankt Augustin. Experimente parallel zur Modellierung müssen deshalb meist die Qualität der späteren Simulationsergebnisse sichern. Denn beweisen lässt sich deren prinzipielle Richtigkeit im strengen Sinne nicht. So werden weiterhin echte Jets getestet und reale Autos zerstört. Immerhin können Simulationen aber den Weg zum entscheidenden Realtest verkürzen. [...]

Technology Review,
Ausgabe vom Mai 2008

Die verschlafene Revolution

Computer, Handys, MP3-Player – die technischen Entwicklungen der letzten fünfzig Jahre sind noch nicht als Unterrichtsstoff an Schulen und Universitäten angekommen, sagt Mathematik-Professor Ulrich Trottenberg.

»KÖLNER STADT-ANZEIGER: Herr Trottenberg, hat die Mathematik ein Image-Problem?

ULRICH TROTTEBERG: Leider ja. Mathematik gilt als trocken und langweilig und ist als Fach in der Schule eher unbeliebt. Das geht so weit, dass man die Sympathien auf seiner Seite hat, wenn man zugibt, keine Ahnung von Mathe zu haben. [...]

Aber ist es nicht tatsächlich schwierig zu vermitteln, warum ich noch rechnen lernen soll, wenn das der Computer viel besser für mich machen kann.

TROTTEBERG: Die angewandte Mathematik hat sich in den vergangenen 50 Jahren grundlegend geändert – denn die Entwicklung der Computer hat die Situation revolutioniert. Doch davon ist in der Schule nur wenig angekommen. Warum werden Computer so selten im Mathe-Unterricht eingesetzt? Jugendliche nutzen täglich Handys und MP3-Player – alle diese Entwicklungen beruhen auf mathematischen Forschungen. Warum werden die zugrunde liegenden mathematischen Prinzipien nicht in der Schule vermittelt? [...]

Was können die Mathematiker, was Ingenieure oder Informatiker nicht können?

TROTTEBERG: Mathematiker sind Querdenker. Sie sind nicht so spezialisiert wie andere und können deswegen Zusammenhänge sehen und ihr Wissen auf verschiedene Disziplinen übertragen.«

Kölner Stadt-Anzeiger,
Ausgabe vom 17. Januar 2008

Chemische Informationen automatisch auslesen

»[...] Von der Zusammenarbeit mit den SCAL-Forschern erwartet InfoChem einen Durchbruch bei dem automatischen Auslesen chemischer Informationen aus unterschiedlichen Quellen. Die Münchener Softwerker wollen mit Hilfe der SCAL-Software ihr Dienstleistungsangebot ausdehnen. Zukünftig soll es auch kundenspezifische Projekte mit hoher Erkennungsrate geben. »Das Innovationspotential ist längst nicht ausgeschöpft«, ist Eiblmaier überzeugt. [...]

Fraunhofer-Magazin,
Ausgabe 3, 2008

Viel Spaß mit Zahlen und Wissenschaft

»Manege der Innovationen« im Hof von Schloss Birlinghoven

»[...] »Wir wollen zeigen, dass Mathematik und Informatik keine trockene und nüchterne Geschichte sind, sondern brauchbar für alle möglichen Probleme«, erklärte Michael Krapp, der in diesem Jahr die Gesamtorganisation in Sankt Augustin übernommen hatte. So haben Wissenschaftler der Fraunhofer-Gesellschaft die MP3-Datenkompression erfunden; wie das nicht nur für Musik, sondern auch für die riesigen Datenmengen von Crashtests verwendet werden kann, erfuhren die Zuschauer nun ebenso wie sie ein Navigationssystem für Feuerwehrleute kennen lernten. [...]

Bonner Rundschau,
Ausgabe vom 16. Juni 2008

Knallharte Mathematik im bunten Zirkuszelt

Wissenschafts-Show in der Manege der Innovationen. 600 Schüler im Fraunhofer-Institut

»[...] Zum ersten Mal nämlich hatte das IZB zur »Manege der Innovationen« eingeladen – und insgesamt 600 Schüler, meist aus den siebten Klassen, hatten sich übers Internet zur Wissenschafts-Show angemeldet. ... »Wir wollen einfach deutlich machen, dass Mathematik uns überall im Alltag begegnet, etwas Alltägliches ist, vor dem man keine Scheu zu haben braucht«, erklärt Michael Krapp, Mitarbeiter des Fraunhofer-Instituts. Er und sein fünfköpfiges Team hatten diese besondere Premiere auf dem sonst abgeschirmten Institutsgelände über vier Monate vorbereitet und konnten dank der überzeugenden Konzeption am »Tag der Technik« einiges mehr anbieten, als an einem »normalen Tag der offenen Tür« im Birlinghovener Institutszentrum. [...]

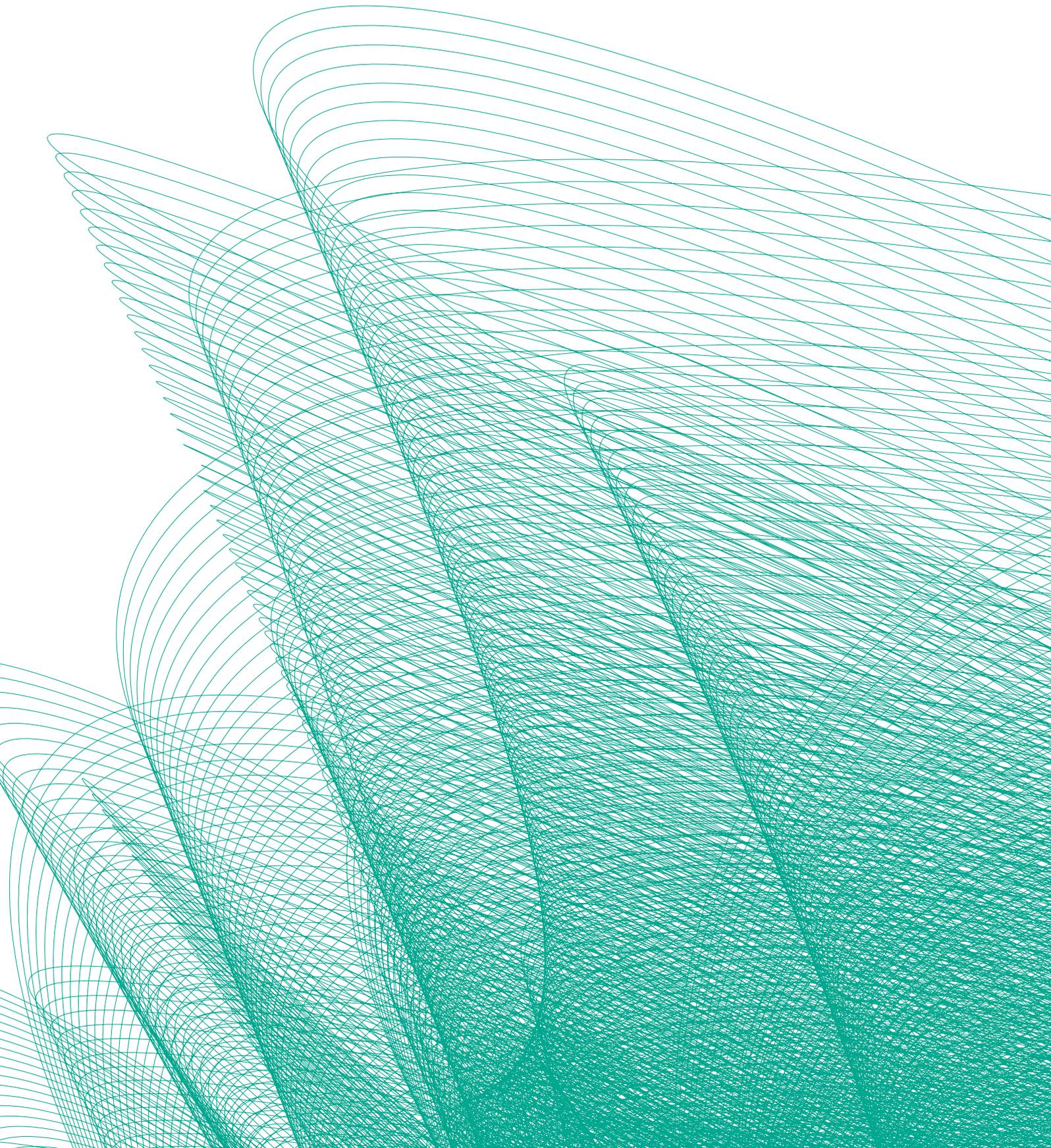
General-Anzeiger Bonn,
Ausgabe vom 16. Juni 2008

Mathematik steckt überall drin

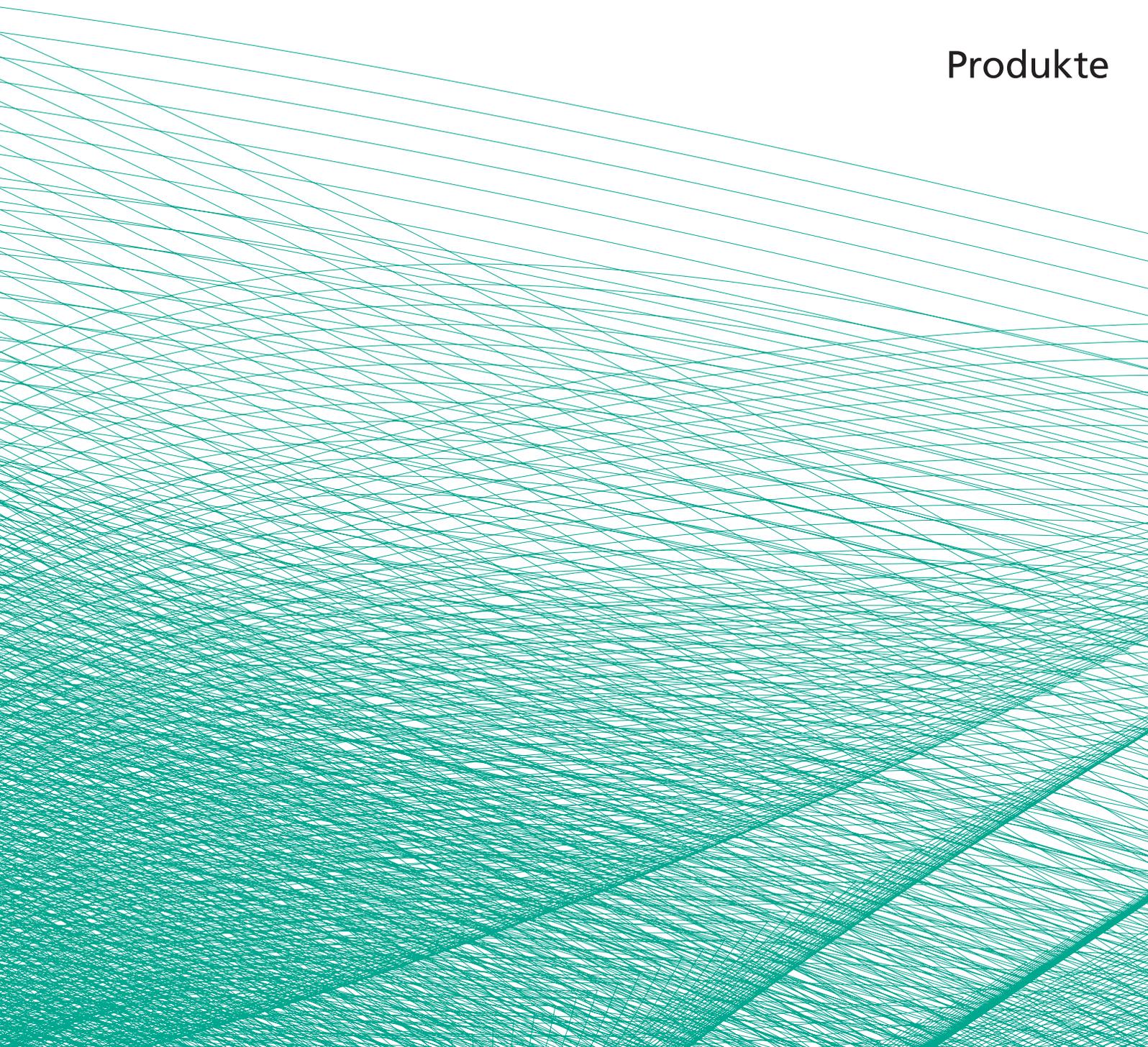
Im Wissenschaftszelt werden alte Vorbehalte abgebaut

»[...] Der Bundespräsident hat kürzlich acht in kurzer Zeit geschafft“, berichtete Michael Krapp von der Fraunhofer-Gesellschaft. Das Puzzle veranschaulicht die Arbeit des PC-Programms »PackAssistant«, den die Fraunhofer-Abteilung Optimierung mit BMW und Audi entwickelt hat, um durch Platz sparende Anordnung von Bauteilen Geld zu sparen. Die Audi-Zulieferer etwa packen heute 45 statt 36 Heckleuchten in einen Behälter, was eine Einsparung von jährlich 57 000 Euro erbringe. [...]

Bonner General-Anzeiger,
Ausgabe vom 3. Juli 2008



Produkte





»Bisher saßen bei uns hoch ausgebildete Chemiker, die Strukturen und Reaktionen aus der Literatur per Hand neu zeichnen und in die Datenbank eingeben. Die Symbiose mit Fraunhofer ist ideal, weil man uns dort eine Software an die Hand gibt und gemeinsam mit uns weiterentwickelt, die automatisiert diesen Content erzeugt. So erhalten wir einen erheblichen Zeitvorteil.«

Dr. Josef Eiblmaier – InfoChem GmbH, München.



InfoChem erstellt für die chemische- und Pharmaindustrie unter anderem Datenbanken von Publikationen und Patenten.



»Der Vorteil der feineren Gitterauflösung in der Wettersimulation ist, dass wir nun auch lokale Gegebenheiten des Geländes in Betracht nehmen und lokale Änderungen des Wetters berücksichtigen können.«

*Vis. Prof. (UK) Geerd-Ruediger Hoffmann
Deutscher Wetterdienst Offenbach*

Der Deutsche Wetterdienst nutzt den FEMZIP-Ableger GRIBZIP für feiner aufgelöste Simulationen bei gleicher Datenmenge.



»Wir benötigen die Zusammenarbeit mit Fraunhofer, weil man dort die Kompetenz hat, um den Lichtbogen als zentrales Element im Schalter zu verstehen und auch berechnen zu können. Wenn wir das nicht hätten, würden wir oft spät in der Entwicklung unserer Produkte die traurige Erfahrung machen, dass manche Dinge nicht so funktionieren wie gedacht. Die Simulation ermöglicht uns, schneller am Markt zu sein.«

Dr.-Ing. Peter Terhoeven – Moeller GmbH, Bonn



Die Moeller GmbH entwickelt Bauteile zur Energieverteilung und Automatisierung wie Leistungs- und Schutzschalter.



Die Interviews in voller Länge sowie weitere Informationen zu den SCAI-Produkten finden Sie auf der beiliegenden DVD im vorderen inneren Buchumschlag.



»Wenn man die komplette Logistikkette beleuchtet, ist der Behälter nur der Anfang. Es kann Lagerplatz gespart werden und es müssen weniger Anlieferzyklen durchgeführt werden, um Kunden zufrieden zu stellen.«

Dipl.-Wirtschaftsingenieur Marco Rosensprung – GEDIA GmbH



Die GEDIA GmbH ist Just-In-Time-Zulieferer der Automobilindustrie für Karosserieteile und Schweißbaugruppen.

»Die Software macht vieles einfacher, weil wir keine Musterteile benötigen, sondern direkt mit den vorhandenen CAD-Daten unsere Verpackungsuntersuchungen durchführen können.«

Dipl.-Ing. Thorsten Henschel – Audi AG



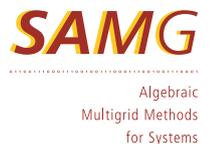
Die Audi AG gehört zu den innovativsten Unternehmen in der Automobilbranche.



Die MAGMA GmbH simuliert für verschiedene Hersteller Gießprozesse am Computer.

»Wir setzen SAMG ein, um unsere Simulationen zu beschleunigen. Verbesserungen um den Faktor zwei bis zehn sind hierbei möglich, wodurch unsere Kunden mehr Varianten in der selben Zeit simulieren und so ihre Gussprodukte besser optimieren können. Wir empfinden die Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer-Institut als sehr angenehm, da es dort Experten gibt, die uns verstehen und auf unsere Bedürfnisse eingehen. Umgekehrt können wir jederzeit Feedback geben, wo noch Verbesserungen an der Software möglich sind.«

Dr. Marc C. Schneider – MAGMA GmbH, Aachen



AutoNester

Automatische Verschachtelung und Verschnittoptimierung

Die zunehmende Verknappung von Rohstoffen, verbunden mit einer wachsenden Nachfrage und steigenden Preisen erfordert einen besonders sparsamen und wirtschaftlichen Umgang mit solchen Ressourcen. In Produktion und Fertigung stellt man aus einfachen Grundmaterialien höherwertige und komplexe Güter und Gegenstände her. Viele der dabei benötigten Einzelteile werden aus zweidimensionalen Materialien gefertigt. Daraus entstehen durch Verbinden oder Umformen dreidimensionale Produkte oder Produktkomponenten. Die zweidimensionalen Grundmaterialien entstehen meistens in größeren Abmessungen, die benötigten Einzelteile schneidet man dann daraus zu.

Mit der AutoNester-Produktfamilie bietet das Fraunhofer SCAI eine Software an, die bei solchen zweidimensionalen Verschnitt- und Anordnungsproblemen (oft bezeichnet als Nesting-Probleme) in unterschiedlichen Branchen Anwendung findet. Die Haupteinsatzgebiete liegen bei der Verarbeitung von Textilien, Leder, Metallen, Holz, Kunststoffen

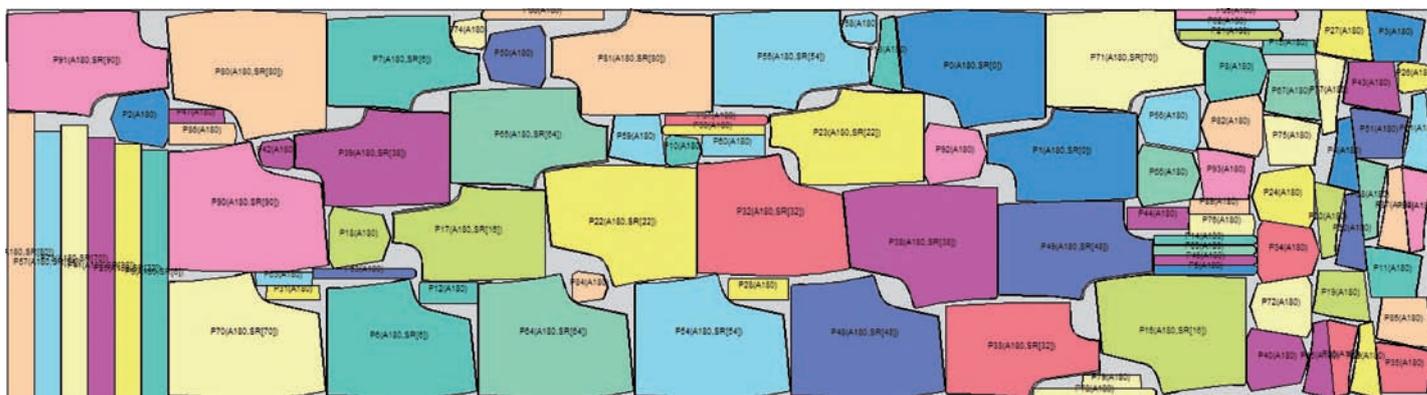
oder Verbundwerkstoffen (Composites), etwa bei der Herstellung von Bekleidung, Möbeln, Automobilen, Maschinen, Flugzeugen oder Schiffen. AutoNester kann eine Menge benötigter Teile auf optimierte Weise und in kurzer Zeit auf Grundmaterial oder auch Materialresten anordnen und dadurch Materialverschnitt wesentlich reduzieren. AutoNester bietet eine große Vielzahl von Funktionen und einstellbaren Verschachtelungsoptionen, sodass sich die Software auch einfach an neue und individuelle Probleme anpassen lässt.

Produktbeschreibung

Die Software AutoNester ist als eigenständige Programm-Bibliothek (DLL) organisiert. Sie besitzt eine einfache Programmierschnittstelle (API) und Software-Entwickler können sie als Packungswerkzeug in andere Software (zum Beispiel in ein CAD-System) integrieren. Für Endanwender erstellt SCAI – aufbauend auf der AutoNester-Bibliothek – individuelle, genau auf die jeweiligen Anforderungen zugeschnittene Lösungen.

Gegenwärtig unterstützt AutoNester bereits eine große Vielzahl von Funktionen. Diese werden fortlaufend erweitert und ergänzt. Beispiele hierfür sind, abhängig vom Anwendungsgebiet, Karo- und Streifenmuster, Maserungsrichtungen, Werkzeugdicken, gefaltete Unterlagen, Schlauchware, Qualitätszonen, Materialfehler, Verschachteln in Ausschnitte, Füllteile, Varianten von Teilen, beliebig wählbare Dreh- und Spiegeleinstellungen oder vorplatzierte Teile.

AutoNester kombiniert aktuelle Optimierungstechniken und neueste Forschungsergebnisse, um in kürzester Zeit die besten Ergebnisse zu erzielen. SCAI setzt lokale Suchverfahren ein, die auf neuen Varianten von Simulated Annealing beruhen, mehrfach iterierte Greedy-Strategien, gepaart mit effizienten Heuristiken, die schnelle und speziell zugeschnittene Algorithmen und Datenstrukturen nutzen. In den lokalen Suchverfahren verwendet SCAI zur Steigerung von Qualität und Geschwindigkeit vollständig dynamische und statistische Verfahren zur Parameterein-



Verschachtelung von Polstermöbelteilen auf Lederhäuten. Die Farben repräsentieren unterschiedliche Qualitäten auf der Lederhaut und unterschiedliche Qualitätsanforderungen auf den Teilen.

stellung. Zur Berechnung von Gütegarantien für die erstellten Schnittbilder kommt eine Kombination aus Branch-and-Bound-Algorithmen und Linearer Programmierung zum Einsatz.

Nutzen

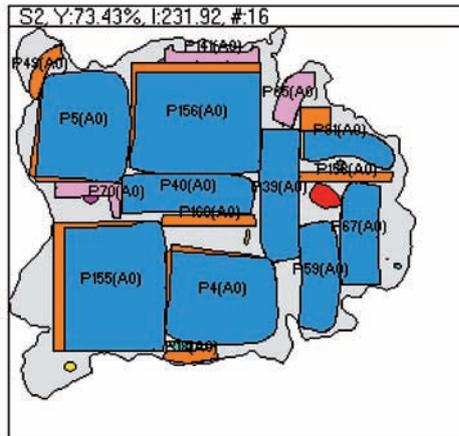
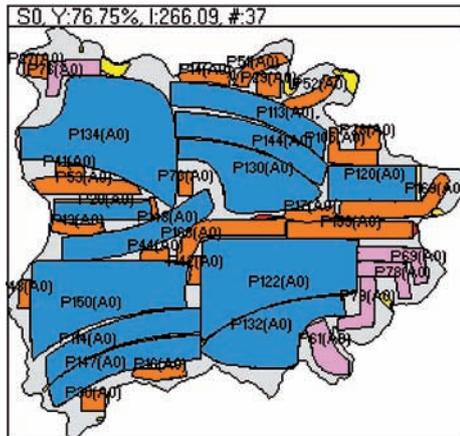
AutoNester ist im Produktionsalltag eine wesentliche und verlässliche Entlastung für den Anwender. Die Software sichert Unternehmen dauerhaft und unabhängig eine hocheffiziente Ausnutzung der eingesetzten Materialien und trägt damit zur Kostensenkung und zur Einsparung von Rohstoffen

bei. Durch die automatisierte und sehr schnelle Berechnung von Schnittbildern kann der Nesting-Prozess jederzeit und gegebenenfalls auch mehrfach in der Wertschöpfungskette gestartet werden (zum Beispiel während der Design-, Kalkulations- und Produktionsphase). Durch die hohe Geschwindigkeit und Verfügbarkeit von Verschachtelungskapazität ist eine wirkungsvolle Unterstützung sowohl bei Individual- und Kleinserienfertigung gegeben, wie auch in Zeiten hohen Arbeitsaufkommens, etwa bei Modellwechseln.

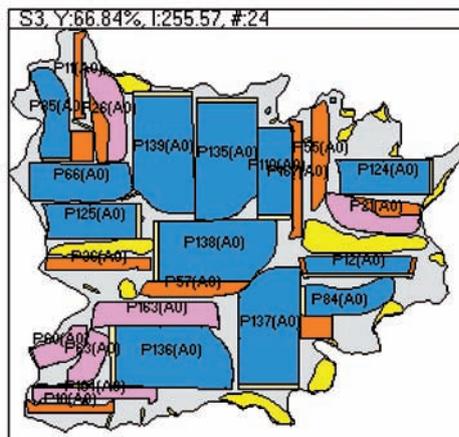
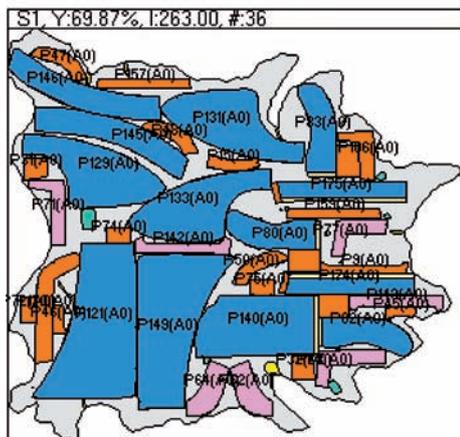
AutoNester wird von führenden, internationalen Anbietern von Produkten für

das Computer Aided Design und das Computer Aided Manufacturing oder von Zuschneidemaschinen, meistens integriert in deren eigene Produkte, vertrieben. Weltweit nutzen bereits viele tausend Anwender die Software des Fraunhofer SCAI.

Viele Firmen setzen zudem Speziallösungen ein, die für ihre individuellen Anforderungen angefertigt wurden. Da das Institut langjährige Erfahrung und tiefgreifendes Know-how auf diesem Gebiet besitzt und zudem die gesamte Entwicklung im Hause stattfindet, können wir Kunden schnell und kosteneffizient Lösungen anbieten.



Verschachtelung von Kleidungsteilen auf einer Stoffbahn. Die Farben zeigen an, welche Teile zum gleichen Kleidungsstück gehören.



Ansprechpartner

» Dr. Ralf Heckmann
 Telefon 02241 14-2810
 ralf.heckmann@scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/autonester

PackAssistant

Software zur automatischen Befüllung von Behältern mit komplexen Bauteilen

Weltweit werden immer mehr Güter transportiert. Gleichzeitig werden Transporte durch Staus auf der Straße, steigende Energiepreise, wachsende umweltpolitische Auflagen und Besteuerungen zunehmend teurer. Unternehmen sind deshalb daran interessiert, ihre vorhandenen Transport- und Lagerkapazitäten möglichst optimal auszunutzen. Die Auslastung der Behälter ist eine wichtige Kennzahl in den gesamten Logistikkosten. Die effiziente Packung komplexer Teile ist eine aktuelle Frage in der Forschung und eine besondere Herausforderung in der industriellen Anwendung.

Aus mathematischer Sicht zählen Packungsprobleme zu einer Klasse von Problemen, zu deren Lösung es in vertretbarer Zeit kein Verfahren gibt. Man ist daher auf die Entwicklung neuer Verfahren angewiesen, die in kurzer Zeit möglichst gute Lösungen berechnen. Abhängig von den Bedingungen des Packungsproblems sind unterschiedliche Lösungsverfahren notwendig. Aufgrund ihrer Komplexität können sie oft nur mit Hilfe von Heuristiken gelöst werden. Heuristiken nutzen Eigenschaften eines speziellen Problems, um durch intelligentes Ausprobieren eine Lösung zu erzeugen.

Software

Die Software PackAssistant berechnet optimierte Befüllungen von Transportbehältern mit baugleichen Teilen anhand von 3D-CAD-Modellen. Das Besondere an PackAssistant ist, dass es mit beliebig komplexen CAD-Modellen rechnen kann.

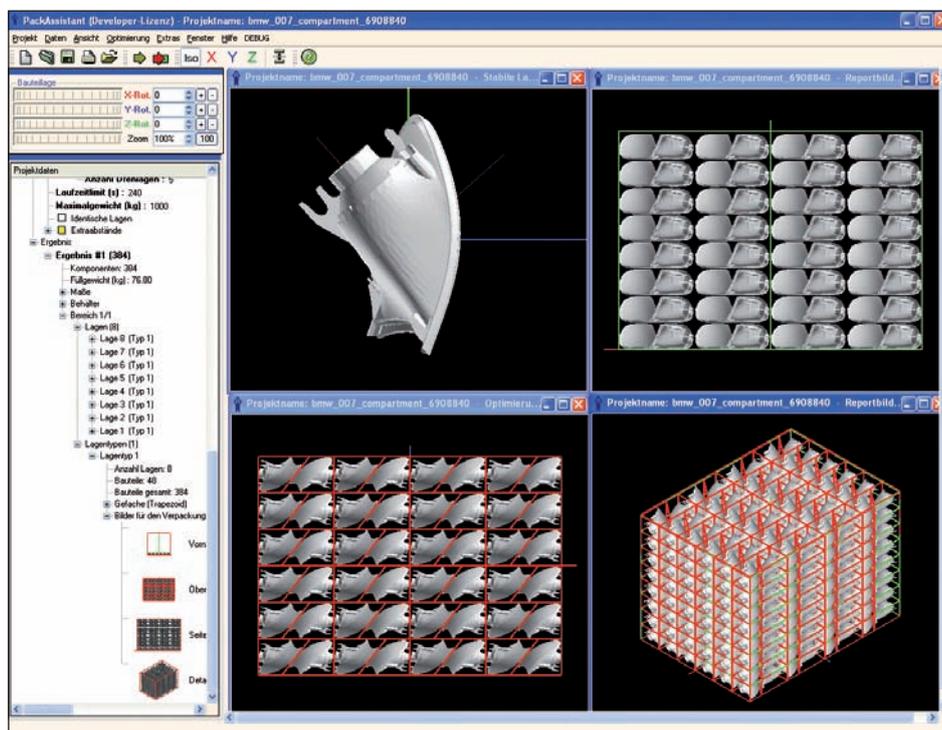
PackAssistant ordnet die Teile im Behälter lagenweise an, wobei die einzelnen Lagen durch Zwischenlagen voneinander getrennt sind. Aus Gründen der Stabilität einer Anordnung und zum Schutz empfindlicher Teile kann man

in PackAssistant entweder mit festen Zwischenlagen (etwa Kunststoffplatten) oder mit Gefachen rechnen. Für unempfindliche Teile kann man mit flexiblen Zwischenlagen (etwa Wellpappe) rechnen und somit eine höhere Auslastung erreichen. PackAssistant kann auch Teile stapeln. Dies wird besonders bei flachen, unempfindlichen Blechteilen beispielsweise im Fahrzeug-Rohbau benutzt. Man kann in PackAssistant Gewichtsbeschränkungen festlegen und fordern, dass bestimmte Abstände zwischen Bauteilen, Böden und Behälterwänden eingehalten werden müssen. Außerdem kann PackAssistant aus einer Liste von Behältern automatisch den am besten geeigneten Behälter aussuchen. PackAssistant achtet darauf, dass die Teile im Behälter nicht kreuz

und quer liegen, sondern sich leicht be- und entladen lassen.

Unser Entwicklungs- und Vertriebspartner MVI-Solve-IT hat eine leicht zu erlernende und grafisch ansprechende Benutzerschnittstelle unter Windows entwickelt und sorgt mit verschiedenen Datenschnittstellen für eine leichte Integration in die Prozesse der Unternehmen.

PackAssistant zeigt alle Ein- und Ausgaben in einer übersichtlichen Baumstruktur an. Die Ergebnisse werden als aussagekräftige 3D-Modelle am Bildschirm dargestellt und lassen sich interaktiv verändern. Verpackungsreporte gibt die Software als Word-Dokumente aus. Die anschaulichen Grafiken darin erlauben



Programmoberfläche von PackAssistant

den beauftragten Arbeitskräften eine einfache Umsetzung der dargestellten Packungen.

Nutzen

Trotz fortschreitender Automatisierung sind aufwändige manuelle Packversuche mit Prototypen gängige Praxis, um eine platzsparende Verpackung zu ermitteln. Mit Hilfe einer Softwarelösung lässt sich bereits in der Konstruktionsphase neuer Bauteile die spätere Behälterbefüllung in wenigen Minuten exakt berechnen und anschaulich darstellen. Anhand der Behälterauslastung kann man die Kosten für deren Transport und Lagerung frühzeitig planen

ohne einen Prototypen des Bauteils zu besitzen.

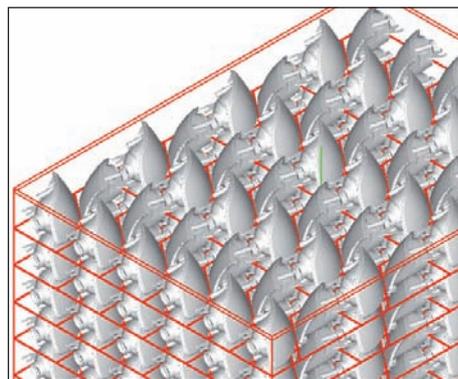
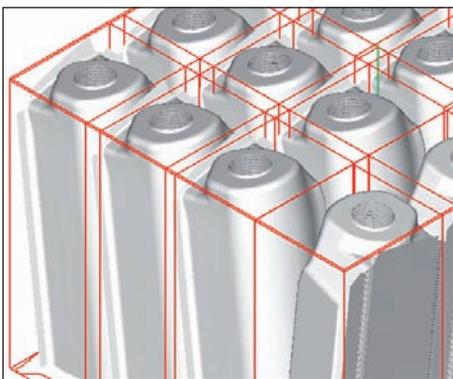
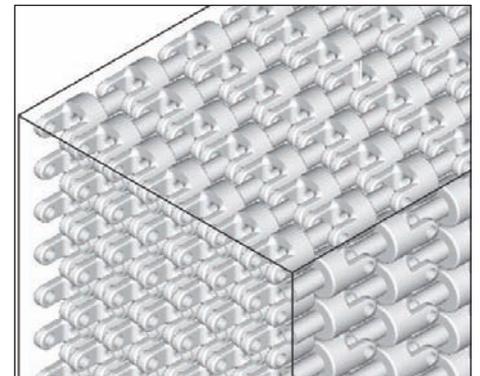
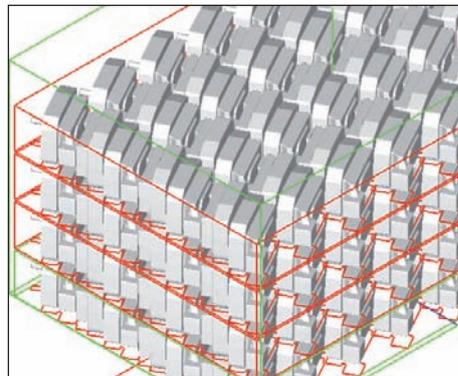
PackAssistant spart Zeit und senkt Kosten durch:

- eine optimierte Behälterauslastung,
- den Verzicht auf zeitaufwändige Packversuche,
- eine frühzeitige Transport-, Behälter- und Lagerplanung und
- eine maßgebliche Unterstützung bei der Angebotserstellung.

PackAssistant wird bereits von vielen führenden Automobilherstellern und -zulieferern weltweit eingesetzt. Anwender von PackAssistant erzielen bei den berechneten Bauteilen verbesserte Packungsdichten von bis zu 20 Prozent.

Dieses Einsparpotenzial wirkt sich auf viele Glieder der Logistikkette aus. In einigen Fällen konnte man auch feststellen, dass es sich lohnt, einen neuen Behälter und neues Verpackungsmaterial anzuschaffen.

Fraunhofer-SCAI entwickelt PackAssistant zusammen mit dem Münchner Unternehmen MVI-Solve-IT ständig weiter. PackAssistant gibt es für Windows PC in deutscher und englischer Sprache zu kaufen. Weitere Sprachen sind bei Bedarf lieferbar.



Verschiedene Packungsarten

Ansprechpartner

» Dr. Ralf Heckmann
Telefon 02241 14-2810
ralf.heckmann@scai.fraunhofer.de

» www.packassistant.de

CutPlanner

Produktionsplanung in der Textilindustrie

In der Textilindustrie ist die Produktionsplanung eine häufige Aufgabe. Jeder Auftrag eines Kunden – der aus den Bestellmengen für ein Kleidungsstück in verschiedenen Konfektionsgrößen und verschiedenen Stoffen besteht – muss so geplant werden, dass er möglichst kostengünstig ausgeführt werden kann. Dazu muss nicht nur der Materialverbrauch minimiert werden, es sind unter anderen auch die durch Personal und den Betrieb von Maschinen entstehenden Kosten zu berücksichtigen.

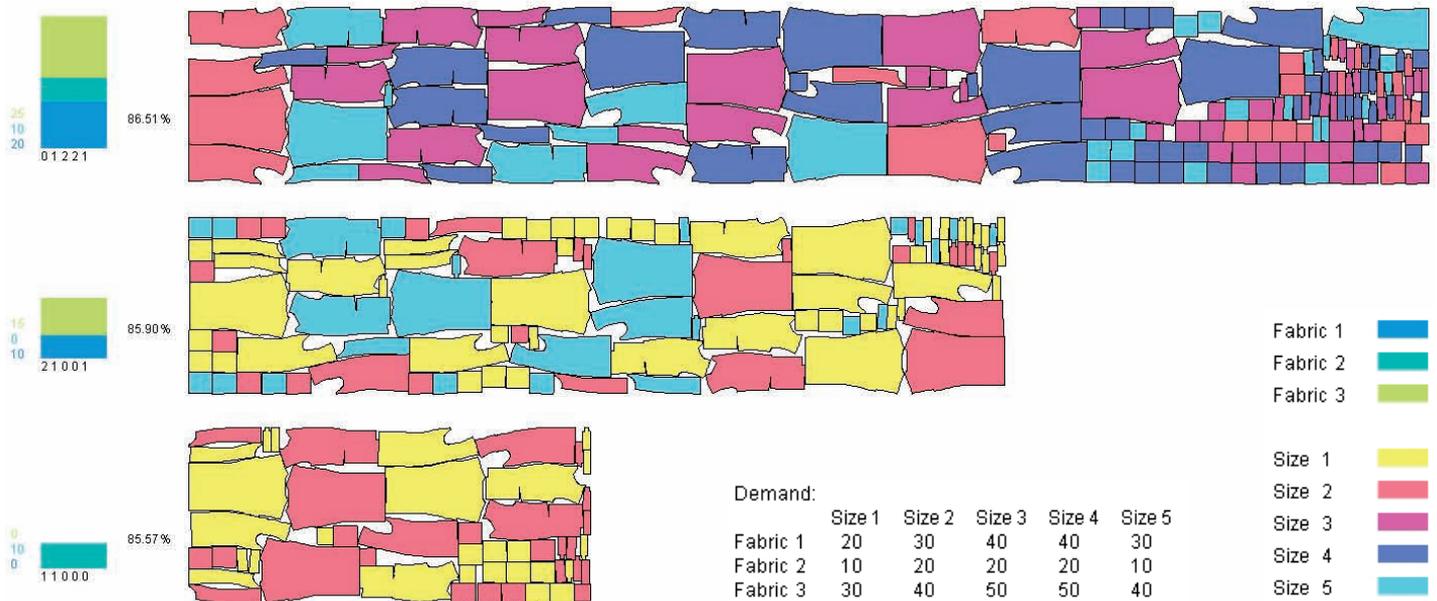
Die von Fraunhofer SCAI entwickelte Software CutPlanner erstellt einen Produktionsplan für einen solchen Kundenauftrag. Darin werden die vorkommenden Konfektionsgrößen auf

verschiedene Schnittbilder verteilt. Außerdem werden die notwendigen Fertigungszahlen für die Schnittbilder bestimmt, die notwendig sind, um die Bestellmengen für alle Konfektionsgrößen und alle geforderten Stoffe zu erfüllen. Es handelt sich hierbei um eine sehr komplexe Aufgabe der kombinatorischen Optimierung. Weil sie sogar NP-schwer ist, gibt es kein Lösungsverfahren, das in praxistauglicher Rechenzeit einen optimalen Produktionsplan findet.

CutPlanner verwendet deshalb heuristische Verfahren zur Bestimmung von Produktionsplänen. Um alle verschiedenen Kostenfaktoren zu berücksichtigen und gute Lösungen für Aufträge mit unterschiedlichen Parametern zu

finden, wird bei diesen Algorithmen großer Wert auf Flexibilität gelegt. Als Basis dienen deshalb schnelle lokale Suchverfahren. Sie unterstützen beispielsweise Verfahren zur Mustererkennung und Parameter, die sich dynamisch an die Aufgabenstellungen anpassen. Durch die Verwendung solcher flexibler Algorithmen kann CutPlanner bei Bedarf ohne viel Aufwand so erweitert werden, dass sich zusätzliche von Kunden erwünschte Kostenfaktoren oder Bedingungen an die Form von Produktionsplänen berücksichtigen lassen.

Eine besondere Eigenschaft von CutPlanner ist die Möglichkeit, die Materialkosten der Schnittbilder auf zwei verschiedene Arten zu bestimmen:



Produktionsplan für ein Shirt in fünf Konfektionsgrößen und drei Stoffen mit berechneten Materialkosten.

1. Sie können in Abhängigkeit der Anzahl unterschiedlicher Konfektionsgrößen, die sich auf einem Schnittbild befinden, geschätzt werden, oder
2. durch den Einsatz von AutoNester (siehe Seite 26) genau berechnet werden.

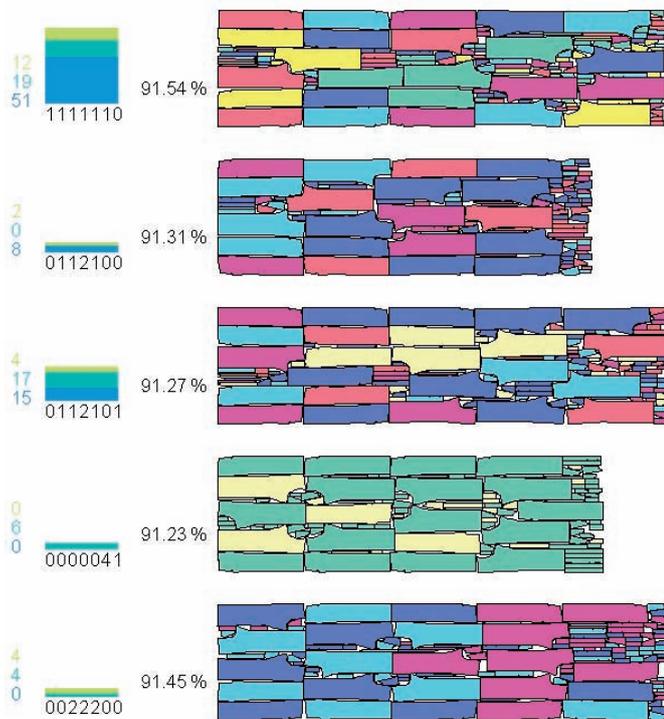
Das erste Verfahren benötigt nur sehr wenig Rechenzeit, sodass schon nach wenigen Sekunden gute Produktionspläne vorliegen. Die Gesamtkosten sind jedoch wie die Materialkosten nur Schätzungen, und können deshalb von den realen Werten abweichen. Werden die Materialkosten der Schnittbilder hingegen mit AutoNester berechnet, so entsprechen die Kosten der erstellten Produktionspläne der Realität.

Durch den Einsatz von AutoNester ist jedoch einige zusätzliche Rechenzeit notwendig.

Um Rechenzeit zu sparen, aber trotzdem Ergebnisse mit realen Kosten zu erhalten, wird in der Industrie oft auf schon erstellte Schnittbilder zurückgegriffen, die in einer Datenbank vorliegen. In der Regel ist jedoch nur eine kleine Auswahl aller Schnittbilder in einer solchen Datenbank hinterlegt, sodass dieses Vorgehen die Kombinationsmöglichkeiten der Produktionsplanung und damit die Qualität ihrer Lösungen deutlich einschränkt.

CutPlanner hingegen wählt möglichst repräsentative Schnittbilder aus, für die die Materialkosten bestimmt werden.

Diese Ergebnisse dienen dazu, die Kosten für andere benötigte Schnittbilder vorläufig zu schätzen. Durch zahlreiche Einsätze von AutoNester im Laufe der Lösungssuche mit immer mehr Rechenzeit werden so zunehmend bessere Vorhersagen der realen Kosten von Schnittbildern und damit von ganzen Lösungen möglich. Mit insgesamt wenig Rechenzeit lassen sich auf diese Art realistische Ergebnisse erzielen, ohne dass eine Bestimmung der Materialkosten für alle während der Lösungssuche betrachteten Schnittbilder notwendig ist. CutPlanner ist momentan die einzige Software auf dem Markt, die in der Lage ist, reale Materialkostenwerte im laufenden Betrieb zu integrieren.



Demand:

	Size 1	Size 2	Size 3	Size 4	Size 5	Size 6	Size 7
Fabric 1	51	74	74	97	74	51	15
Fabric 2	19	36	44	61	44	43	23
Fabric 3	12	18	26	32	26	12	4

- Fabric 1 ■
- Fabric 2 ■
- Fabric 3 ■
- Size 1 ■
- Size 2 ■
- Size 3 ■
- Size 4 ■
- Size 5 ■
- Size 6 ■
- Size 7 ■

Ansprechpartnerin
 » Dipl.-Math. Katerina Keuneke
 Telefon 02241 14-1579
 katerina.keuneke@scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/cutplanner

Produktionsplan für eine Hose in sieben Konfektionsgrößen und drei Stoffen mit berechneten Materialkosten.

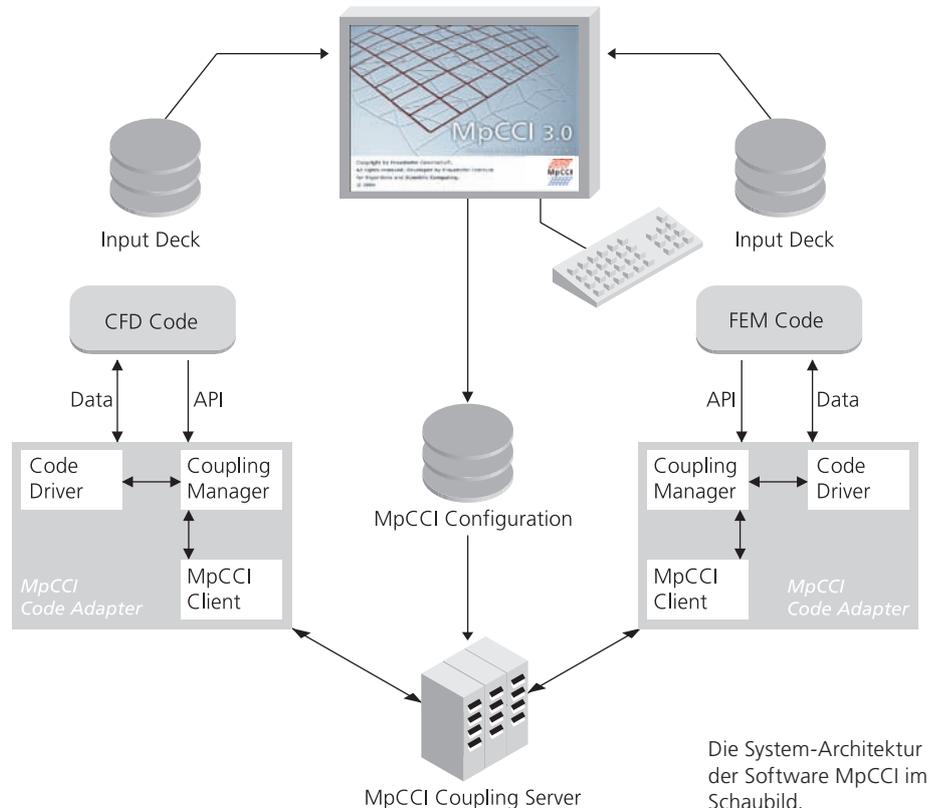
MpCCI

Der Industriestandard zur Kopplung kommerzieller Simulationscodes

Raketentriebwerke und Auspuffanlagen von Pkw, Bauwerke, Herzklappen, elektrische Schaltanlagen und Druckventile in Kernkraftwerken haben eines gemeinsam: Für eine realitätsnahe Simulation ihres Verhaltens müssen jeweils mehrere physikalische Grunddisziplinen berücksichtigt werden.

Für die Disziplinen Strömungsmechanik (CFD), Strukturanalyse (FEM), elektromagnetische Effekte (EMAG) und auch Strahlung gibt es jeweils eigenständige und in der Industrie etablierte Simulations-Werkzeuge. Die Kombination der einzelnen Codes in einer Anwendung war jedoch bis vor wenigen Jahren nur mit proprietären Lösungen möglich.

Mit MpCCI konnte das Fraunhofer SCAI in den letzten Jahren den weltweit führenden Schnittstellenstandard für die direkte Kopplung von Simulationsprogrammen etablieren und die Lösung als Lizenz-Software vielfach zum Einsatz beim Kunden bringen.



Funktionsumfang

Die aktuelle Version 3.0.6 der MpCCI-Kopplungsumgebung, bietet dem erfahrenen Simulationsingenieur in Industrie und Forschung eine Komplettlösung für die multidisziplinäre Simulation:

- Anbindungen an die führenden Simulationscodes:
Abaqus, Ansys, MSC.Marc, Permas, Fluent, StarCD, Flowmaster, Flux3D, RadTherm
- Eine transparente Einbettung in die bestehende Softwareumgebung für Computer Aided Engineering (CAE): MpCCI erkennt automatisch die schon installierten CAE-Tools und koppelt diese in ihren Originalversionen miteinander. Auf Seiten der individuellen Programme sind keine Spezialanpassungen notwendig.

- Eine einheitliche Nutzerschnittstelle: MpCCI erkennt bereits vorhandene mono-disziplinäre Rechenmodelle und bietet dem Anwender in einer grafischen Oberfläche die möglichen Kopplungsflächen und -volumen zur Auswahl. Der Nutzer definiert alle weiteren Kopplungsbedingungen (Kopplungsgebiete, Kopplungsgrößen, Such- und Interpolationsparameter) und startet schließlich das gekoppelte multidisziplinäre Simulationssystem auf einem verteilten Netz von Rechnern.
- Vordefinierte Kopplungsmodelle für typische Anwendungen: Fluid-Struktur-Interaktion, thermische und Strahlungs-Kopplung, elektro-thermische Kopplung, Plasma- und Lichtbogensimulationen.

Weitere Modelle werden auf Kundenanfrage hin bereitgestellt.

Anwendungsbeispiele

MpCCI ist eine offene Softwareumgebung, in die erfahrene Anwender aus Industrie und Forschung ihre Simulationscodes einbetten können.

Beispiele für die Integration von Anwender-Codes sind:

- die Universität Stuttgart mit dem CFD-Tool FenFloss und dem FEM-Programm Calculix
- die Universität Karlsruhe mit einem eigenen Scancode
- verschiedene CFD-Codes der französischen Forschungseinrichtung ONE-RA sowie einige industrielle Inhouse-CFD-Codes

Kommerzielle Codes wie INDEED (GNS GmbH) und SAMCEF (SAMTECH S.A.) nutzen MpCCI als Programmierschnittstelle.

Strategische Partnerschaften

Der Erfolg und die Akzeptanz von MpCCI als führender Schnittstellenstandard hat zwei Gründe:

1. die technischen und methodischen Lösungsangebote und
2. die vielen Kooperationen mit führenden Anbietern von Simulationssoftware.

Die technische Weiterentwicklung, die Lösungen für spezielle und allgemeine Nutzeranforderungen sowie die strategische Marktausrichtung werden vorab mit den CAE-Partnern diskutiert und in enger Kooperation mit ihnen realisiert. Die Schnittstellenlösung MpCCI hat in diesem Sinne keinen eigenen (neuen) Markt – sondern spricht die Kunden der etablierten CAE-Lösungen an und bietet ihnen neue Simulationspotenziale.

Schon seit Jahren arbeitet SCAI mit den Firmen

- Fluent Inc.
(seit 2006 Teil von ANSYS Inc.),

- MSC Software Corporation,
- Intes GmbH,
- Cedrat S.A.,
- Thermo Analytics Inc. TAI und
- Simulia (vorher ABAQUS)

eng zusammen.

Seit 2006 sind weitere Partnerschaften hinzugekommen: Im Februar 2007 haben Simulia und CD adapco Group ihre Initiative zur Lösung von Fluid-Struktur-anwendungen über die Codekombination Abaqus-STAR-CD4 vorgestellt.

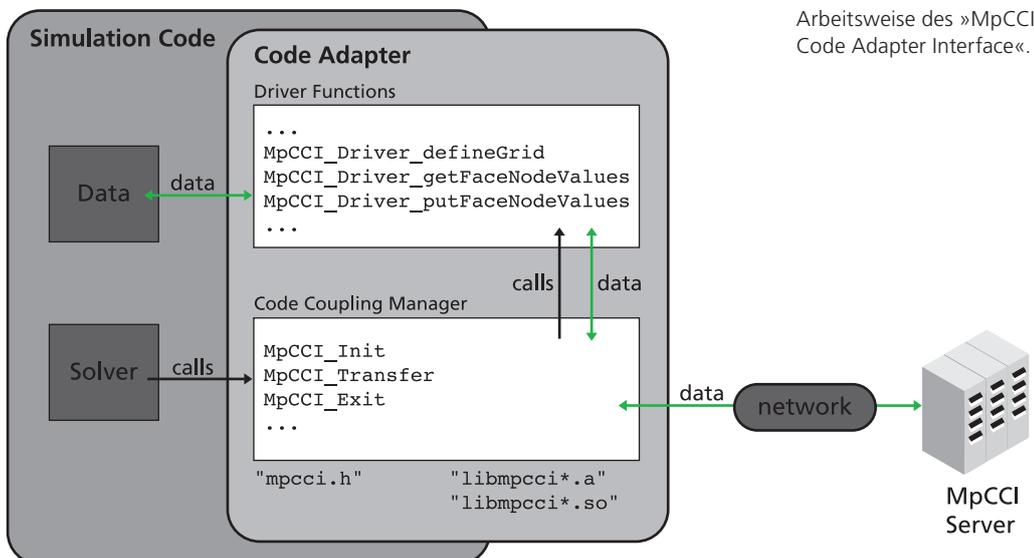
Seit Anfang 2007 arbeitet SCAI gemeinsam mit Flowmaster Ltd. an einer speziellen Kopplung zwischen ein-dimensionalen (1D) Systemcodes für Pipelineberechnungen mit hochauflösenden 3D-Strömungscodes zusammen. Anwendungen für solche 1D-3D-Kopplungen kommen aus der Luftfahrt (Kabinenbelüftung von Flugzeugen), Automobilbau (Wasserkreisläufe & Pumpsimulation) oder auch dem Kraftwerksbau.

SAMTECH S.A. hat seinen FEM-Code Samcef/Mecano über MpCCI mit einem Code zur Berechnung der thermischen Spannungen für Schmelzschweißen gekoppelt.

Im vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Projekt Innovative Methoden zur Auslegung von Umformwerkzeugen im Fahrzeugbau (IMAUF) arbeitet SCAI mit der GNS GmbH und DYNAMore an der Realisierung von Code-Adaptoren für den Umformcode Indeed und den expliziten Löser LSDyna.

Als Vertriebspartner im asiatischen Raum konnten CD adapco Japan und die jeweils unabhängigen FLUENT-Distributoren

- FLAP / Cybernet (Japan)
- HiKey Beijing (China)
- ATES (Korea)
- Anova Ltd. (Türkei) gewonnen werden.



Arbeitsweise des »MpCCI Code Adapter Interface«.

Einige Schwerpunktprojekte

Thermische Absicherung von Fahrzeugen – Daimler AG

Bei der Entwicklung von Fahrzeugen ist die thermische Absicherung von Motorraum und Unterboden von zentraler Bedeutung. Die Temperaturen der Abgasanlage sind bestimmt durch alle drei Arten von Wärmeübergängen: Wärmeleitung, Wärmekonvektion und Strahlung. Entsprechend müssen in der numerischen Berechnung automobilier Unterbodenkomponenten auch drei verschiedene Simulationsdisziplinen miteinander kombiniert werden: Strukturanalyse, Strömungsberechnung sowie die Strahlungssimulation. Die Wärmekonvektion und die Wärmeleitung

können dabei durch eine gekoppelte Fluid-Struktur-Interaktion (FSI) behandelt werden. In der Auslegung des Gesamtfahrzeuges ist dann auch noch die Wärmestrahlung von wesentlicher Bedeutung. In den Bereichen, in denen das Strömungsverhalten eine wichtige Rolle spielt (Motorraum, Getriebe, Abgasanlage), müssen Konvektion und Strahlung in einem komplexen gekoppelten Simulationssystem berechnet werden. Die Daimler AG nutzt dazu die Kopplungslösung MpCCI, um die drei Simulationscodes STAR-CD (Strömung), POSRAD (Strahlung) und PERMAS (Strukturanalyse) miteinander für eine komplexe Gesamtberechnung zu kombinieren.

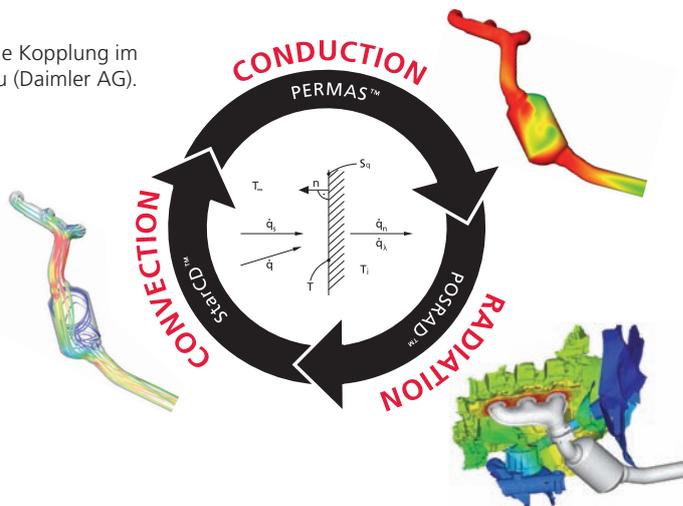
Kopplung von 1D-System- und 3D-Strömungssimulationen

Der Code Flowmaster ist ein eindimensionales Modellierungswerkzeug für die Auslegung unterschiedlicher Strömungskreisläufe wie Kraftstoffzuleitungen in Flugzeugen, Klimaanlage für Kraftfahrzeuge, Pipelineanlagen in Schiffen und Kühlmittelekreisläufe in Satelliten. Das Flowmaster-Tool stellt Bibliotheken für alle typischen Komponenten in solchen Strömungskreisläufen bereit und ermöglicht damit einem Anwender einen schnellen Modellaufbau seiner eigenen Anwendung.

Eine direkte Interaktion zwischen dieser 1D-Systemsimulation und einer hochauflösenden 3D-Strömungsberechnung erlaubt es nun, einzelne komplexe Komponenten im Detail unter Berücksichtigung ihrer Interaktion mit dem Gesamtsystem zu berechnen – und umgekehrt den Einfluss neuer Teilkomponenten auf das Systemverhalten zu simulieren. Die Vorteile solcher 3D-1D-Kopplungen sind höhere Verlässlichkeit, gesteigerte Simulationsgenauigkeit und genauere Modelle insbesondere bei komplexen Konfigurationen, da die sich zeitlich verändernden Randbedingungen für die Strömungsmechanik (CFD) genauer bestimmt werden.

Beispiele für solche Anwendungen kommen aus dem Automobilbereich (Kühlkreisläufe mit integrierter 3D-Simulation des Kühlergehäuses) oder der Luftfahrt (Belüftungskreislauf mit gekoppelter 3D-Simulation der Kabinenströmung).

Thermische Kopplung im Automobilbau (Daimler AG).



Elastische Umformwerkzeuge

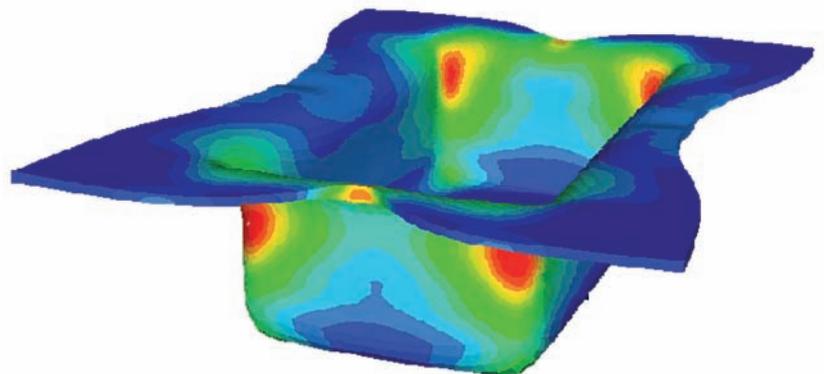
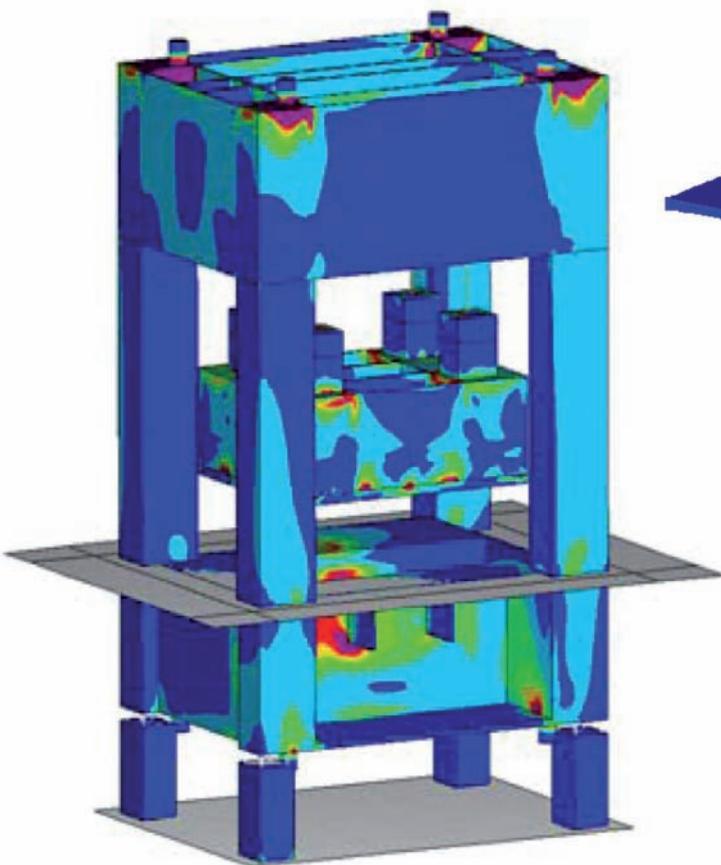
Im BMBF-Forschungsprojekt IMAUF (Innovative Methoden zur Auslegung von Umformwerkzeugen im Fahrzeugbau) geht es darum, neue Methoden aus der Blechumformung, rechnergestützten Simulationen, Plasmabeschichtungstechnik und Oberflächenmodifizierung zusammenzuführen und in der Automobilindustrie zu erproben.

Dazu ist als erste Stufe der Simulation der Übergang von der Prozesssimulation mit starren Werkzeugen (unilateraler Kontakt) hin zur Anlagensimulation (Werkzeug und Maschine, elastisch)

als bilateraler Kontakt erforderlich. Der wichtigste an der Wechselwirkung zwischen Werkzeug und Werkstück beteiligte Prozess ist die Reibung, die in der Realität orts- und prozessabhängig abläuft. Dies wird derzeit aber nicht in den Simulationen berücksichtigt. Die Druck-, Deformations-, Temperatur- und Schmiermittelabhängigkeit der Reibprozesse soll aufgeklärt und modelliert werden, um die Realitätsnähe der Simulationen zu erhöhen.

Um den Übergang von der Prozesssimulation mit starren Werkzeugen hin zur Anlagensimulation zu ermöglichen, definiert das Fraunhofer SCAI zusam-

men mit den industriellen Anwendern die Kopplungsbedingungen und entwickelt mit MpCCI eine Kopplung der im Projekt eingesetzten Umform- und Struktursimulationscodes. Im Unterschied zur monolithischen Simulation von Werkzeug und Werkstück in einem einzigen Rechenmodell lassen sich bei einer gekoppelten Simulation die separaten Modelle für Werkstück und Werkzeug in ihrer räumlichen und zeitlichen Auflösung jeweils optimal definieren. Für die Realisierung der Kopplung muss dann nur die Kompatibilität der Randgeometrien (Kontaktbereiche von Werkstück zu Werkzeug) gewährleistet sein.



Gekoppelte Simulation elastischer Umformwerkzeuge.

Ansprechpartner

» Dipl.-Inf. Klaus Wolf
Telefon 02241 14-2557
klaus.wolf@scai.fraunhofer.de

» www.mpcci.de

SCAIMapper

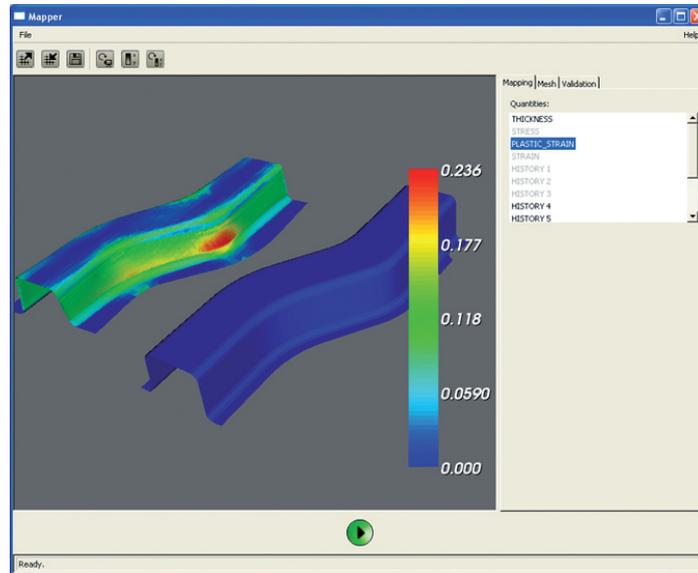
Datenübertragung von Umform- auf Crash-Modelle

Neuentwicklungen im Fahrzeugbau zielen auf möglichst große Sicherheit bei reduziertem Gewicht. Um dieses Ziel zu erreichen helfen umfangreiche Simulationen, Bauteile und Herstellungsprozesse zu optimieren.

In der Entwicklungsphase dienen Crash-Berechnungen mit speziell entwickelten Simulationsprogrammen dazu, die Fahrzeugsicherheit zu beurteilen. Die hierbei verwendeten Modelle sind jedoch idealisiert und weichen von späteren Fahrzeugen ab. Um die Aussagekraft der Crash-Berechnungen zu verbessern, gilt es die Simulation des Herstellungsprozesses mit der Crash-Simulation zu verknüpfen.

Für die Berechnung des Herstellungsverfahrens stehen verschiedene Tools zur Auswahl. Die für den Crash-Test entscheidenden Karosseriebauteile werden überwiegend durch einen Tiefziehprozess hergestellt, in dem ein ursprünglich ebenes Blech umgeformt wird. Für einige Bauteile folgt eine Wärmebehandlung, um günstigere Materialeigenschaften zu erreichen. Aufgrund der unterschiedlichen Berechnungsverfahren für die Blechumformung und die Crash-Simulation werden in der Regel verschiedene Diskretisierungen, das heißt mehr oder weniger feine Gitter, verwendet. Durch den Tiefziehprozess verändern sich bestimmte Eigenschaften, wie die Blechdicke oder plastische Dehnung. Diese Größen beeinflussen jedoch das Crash-Verhalten, sodass sie ebenfalls in die Crash-Simulation einbezogen werden sollen.

Um realistischere Crash-Modelle zu erhalten, müssen also einige Materialkenngrößen von den Ergebnissen einer Umform-Simulation auf ein Crash-Modell übertragen werden. Hierzu hat das Fraunhofer SCAI in einem Projekt mit dem Verband der Automobilindustrie SCAIMapper entwickelt.



Graphisches User-Interface der Software SCAIMapper

Anwendung des SCAIMappers

Alle Funktionen des SCAIMappers können interaktiv über sein graphisches Interface gesteuert werden.

Zunächst müssen Ausgangs- und Zielgitter geladen werden. Der SCAIMapper unterstützt hier die Dateiformate von vielen in der Umform- und Crash-Simulation verwendeten Codes:

- Abaqus (.inp-Dateien lesen/schreiben)
- Indeed (.gns lesen)
- LS-DYNA (Keyword-Dateien lesen/schreiben)
- PAM-STAMP PAM-CRASH (Mapping Files lesen/schreiben, Keyword files lesen)
- Radioss (starter input D00 lesen, output file Ynnn lesen/schreiben)
- Nastran (lesen, patchen)
- Sysweld (.asc lesen, schreiben, patchen)

Vor dem eigentlichen Mapping-Vorgang kann der Benutzer anhand von Listen oder mit der Maus diejenigen

Bauteile im Ausgangs- und Zielgitter auswählen, die in die Datenübertragung einbezogen werden sollen.

Wenn in beiden Modellen unterschiedliche Koordinatensysteme verwendet wurden, können die Bauteile entweder per Hand oder auch automatisch aufeinander gedreht werden. Durch das automatische Einschwenken wird dabei ein optimales Aufeinanderliegen der Gitter erreicht. Zusätzlich ist es möglich, die Bauteile zu spiegeln.

Wenn die Bauteile und deren Position eingestellt sind können die Quantitäten ausgewählt werden, also die zu übertragenden physikalischen Größen. Per Knopfdruck führt der Nutzer nun das Mapping aus und die übertragenen Daten werden im Graphik-Fenster auf dem Zielgitter angezeigt. Nach der Datenübertragung lässt sich deren Qualität mit Hilfe eines vom Institut für Statik und Dynamik der Luft- und Raumfahrt-Konstruktionen der Universität Stuttgart entwickelten Verfahren überprüfen. Hierzu werden die Daten auf das

Ausgangsgitter zurückgemappt und mit den ursprünglichen Werten verglichen.

Aktueller Stand und Ausblick

Der SCAIMapper liegt derzeit als Beta-Version vor. Einige Kunden setzen ihn bereits erfolgreich zur Datenübertragung von Umform- auf Crash-Modelle und von Ergebnissen graphischer Analyse-Tools auf Simulations-Modelle ein.

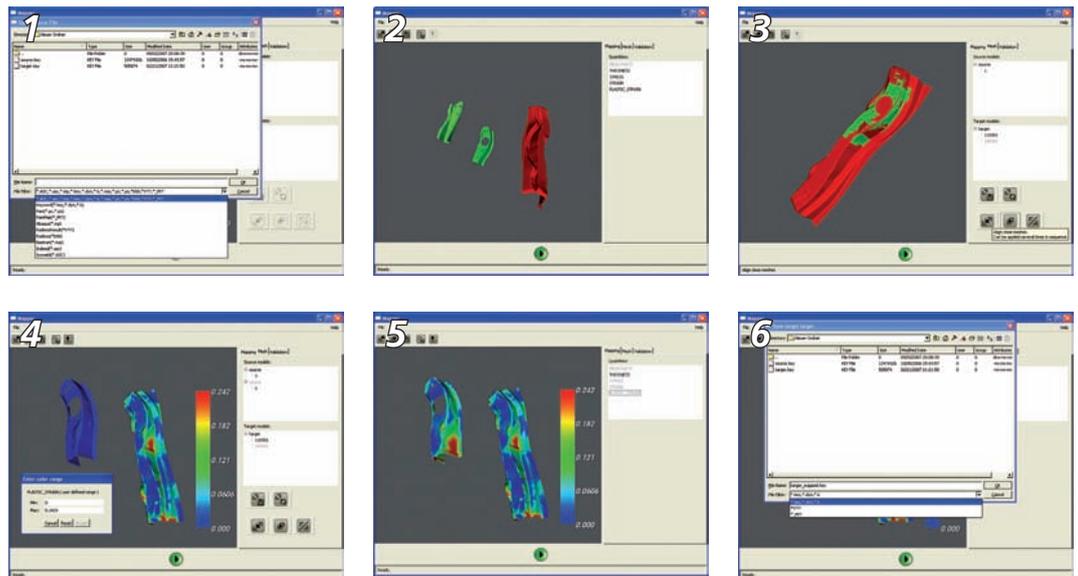
Dabei beschränkt sich der Mapper bisher auf Modelle aus Schalenelementen.

Da sowohl der SCAIMapper als auch die Kopplungs-Software MpCCI ähnliche Algorithmen zur Übertragung von Daten zwischen verschiedenen Gittern benötigen, entwickelt SCAI beide Produkte in Zukunft gemeinsam weiter. Langfristig soll dabei der SCAIMapper zu einem flexibel einsetzbaren Werkzeug für Datei-basiertes

Mapping ausgebaut werden, das sich auch über das Umform-Crash-Mapping hinaus in anderen Bereichen einsetzen lässt. Geplant ist, dass die Software die Datei-Formate der wichtigsten Simulationscodes und eine Vielzahl physikalischer Größen unterstützt.

Schritte des Mapping-Prozesses:

1. Laden
2. Auswählen
3. Positionieren
4. Quantitäten auswählen
5. Mappen
6. Speichern



Ansprechpartner

» Dr.-Ing. Holger Spiess
 Telefon 02241 14-2647
 holger.spiess@scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/mapper

SAMG

Eine Softwarebibliothek zur skalierbaren Lösung großer linearer Gleichungssysteme

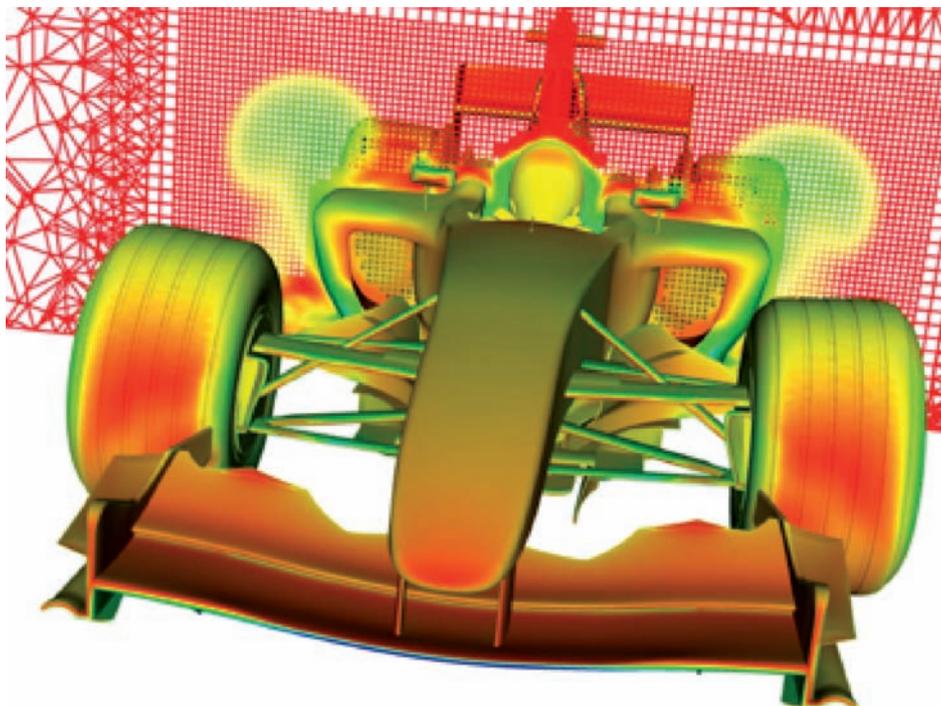
Situation

Die numerische Simulation vieler physikalischer Prozesse, etwa aus der Strömungs- und Strukturmechanik, erfordert die Lösung großer linearer Gleichungssysteme, die durch die Diskretisierung (elliptischer) partieller Differentialgleichungen auf komplexen Gittern entstehen. Je feiner die Auflösung dieser Gitter, umso höher ist im Allgemeinen die Simulationsgenauigkeit, umso größer sind aber auch die numerisch zu lösenden Gleichungssysteme. Bei den heutzutage verlangten Simulationsgenauigkeiten ist die Geschwindigkeit, mit der diese Gleichungssysteme gelöst werden können, eine kritische Größe. Systeme mit zehn oder gar 100 Millionen Unbekannten sind keine Seltenheit und die Tendenz ist weiter steigend. Klassische numerische Lösungsverfahren sind nicht mehr in der Lage, Gleichungssysteme dieser Größe mit ökonomisch vertretbarem Zeitaufwand zu lösen.

Lösung

Die effiziente Lösung derart großer Gleichungssysteme erfordert zwingend »skalierbare« Löser, das heißt Löser, deren Rechenaufwand nur linear von der Problemgröße abhängt. Skalierbarkeit aber ist, etwa für die große Klasse »elliptischer« Anwendungen, nur über hierarchisch operierende Algorithmen zu erreichen, die – mathematisch gesprochen – die schnelle Reduktion sowohl kurz- als auch langwelliger Fehlerfrequenzen gleichermaßen garantieren.

Als für den industriellen Einsatz besonders Erfolg versprechend hat sich die in SCAI mitentwickelte algebraische Mehrgittermethodik (AMG) erwiesen: Zu einem gegebenen Problem separieren AMG-basierte Verfahren zunächst



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

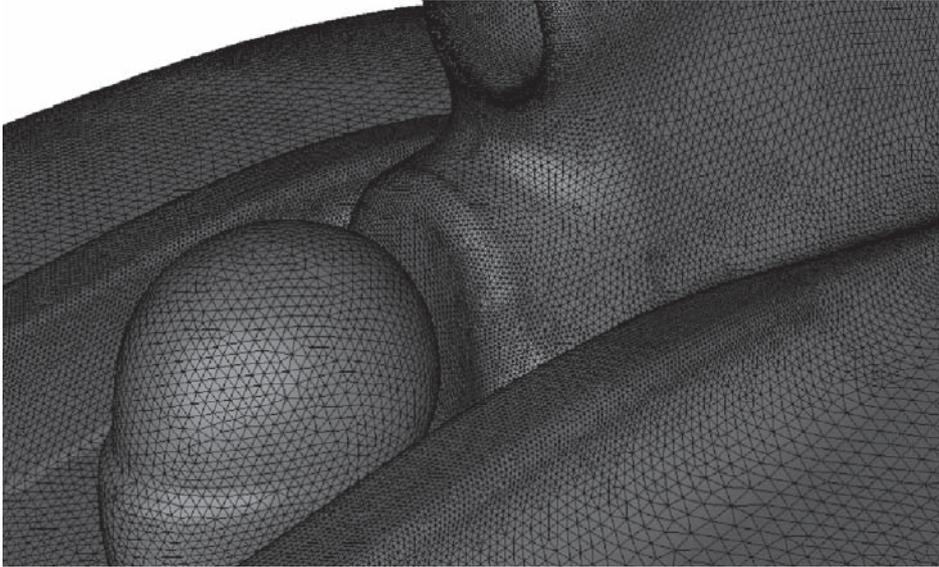
in geeigneter Weise numerische Information, die der Auflösungsgenauigkeit verschiedener Skalen des gleichen Problems entsprechen. Durch die geeignete Kombination dieser »hierarchischen« Information wird dann die Lösung des gegebenen Problems mit optimaler Geschwindigkeit ermöglicht.

AMG-basierte Verfahren sind aus der Idee heraus entstanden, klassische »geometrische« Mehrgitterverfahren so zu verallgemeinern, dass sie direkt auf lineare Gleichungssysteme angewendet werden können, ohne explizit geometrische Eigenschaften zu benutzen. Im Gegensatz zu den geometrisch-basierten sind AMG-basierte Verfahren daher genau so leicht in existierende Simulationspakete zu integrieren wie klassische Standardverfahren – einer der Hauptgründe für ihren industriellen Erfolg.

Die Bibliothek SAMG

SCAI entwickelt eine Softwarebibliothek AMG-basierter Routinen zur hocheffizienten Lösung großer linearer Gleichungssysteme mit dünnbesetzten Matrizen, wie sie im numerischen Kern vieler industriell relevanter Simulationssoftwarepakete auftreten. Diese Bibliothek wird unter dem Namen SAMG (»Systems Algebraic Multigrid«) bereits seit einigen Jahren vermarktet. Hauptzielgruppe bilden die Entwickler industrieller numerischer Simulationssoftware in den verschiedenen Anwendungsdisziplinen.

SAMG ist besonders zur Lösung elliptischer partieller Differentialgleichungen auf unstrukturierten zwei- oder dreidimensionalen Gittern geeignet, oder aber zur Lösung linearer Gleichungs-



Oberflächengitter in der Umgebung des Fahrers (Bilder mit Dank an Sauber-Petronas und Fluent)

systeme, die zwar nicht auf Differentialgleichungen zurückgehen, aber durch strukturell ähnliche Eigenschaften charakterisiert sind. Verglichen mit klassischen Verfahren kann – je nach Anwendungsbereich und Problemgröße – der Rechenzeitgewinn durch den Einsatz von SAMG im Bereich von einer bis zwei Zehnerpotenzen liegen. Hauptvorteile von SAMG – seine numerische Skalierbarkeit sowie seine einfache Nutzung – sind zur treibenden Kraft für einen wachsenden Erfolg in der industriellen Anwendung geworden.

Wesentliche physikalische Eigenschaften partieller Differentialgleichungen – und damit auch die numerischen Eigenschaften der daraus resultierenden Gleichungssysteme – können sich grundlegend zwischen verschiedenen Anwendungsklassen unterscheiden. Es gibt daher keinen einzelnen Löser, der in der Lage wäre, sämtliche praktisch relevanten Gleichungssysteme glei-

chermaßen effizient zu lösen. Vielmehr müssen Löser gewissen charakteristischen physikalischen Gegebenheiten einer Anwendung angepasst werden, um eine hohe Effizienz zu erzielen. Entsprechend ist die AMG-Methodik während der letzten Jahre kontinuierlich weiter entwickelt worden mit dem Ziel, möglichst viele industrielle Anwendungsbereiche zu unterstützen. Heute bildet die Bibliothek SAMG ein flexibles Framework hierarchischer Mehrgitterkomponenten, welche in Hinblick auf spezifische Anforderungen verschiedener Anwendungsklassen geeignet kombiniert werden können.

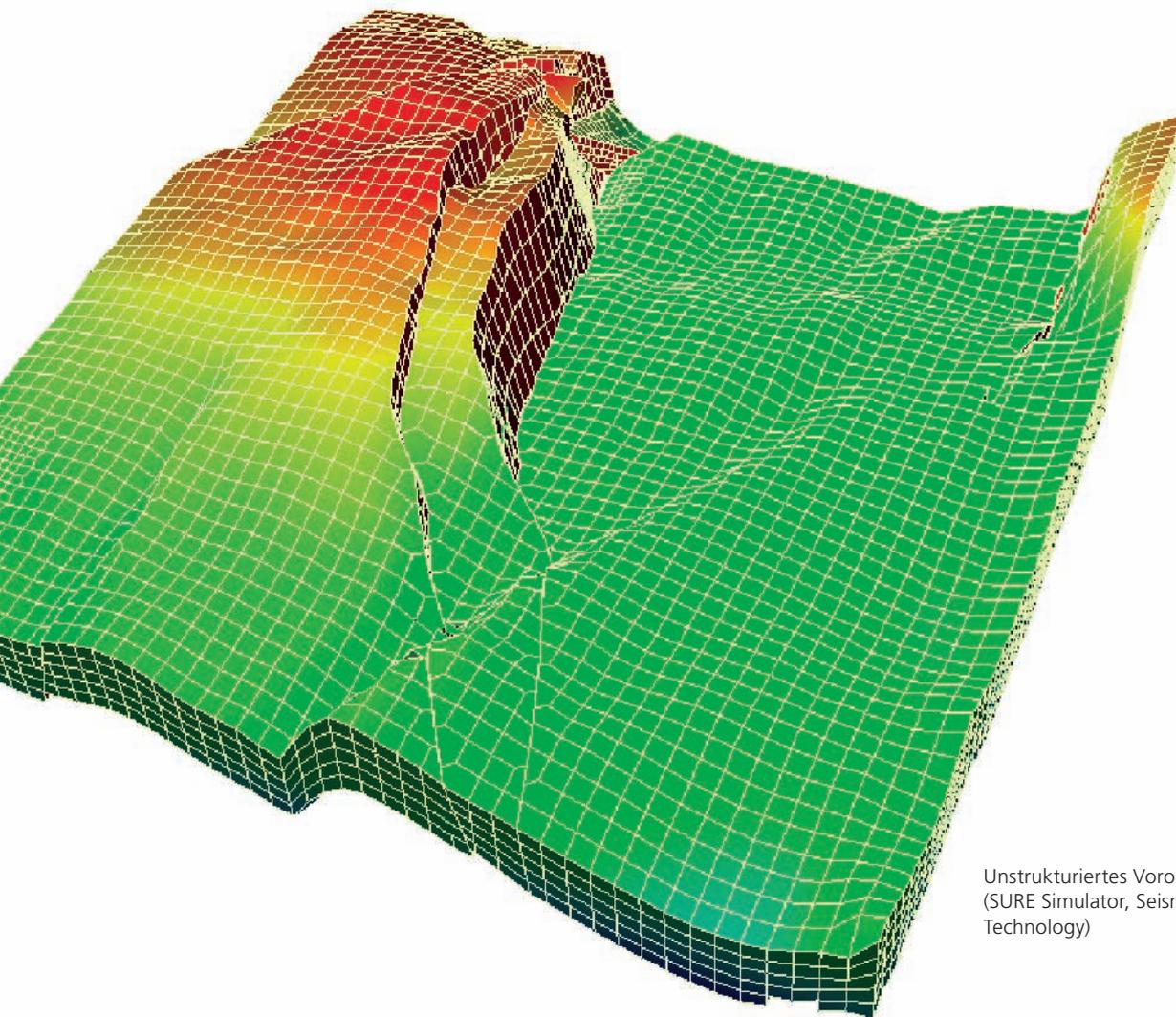
SAMG in der industriellen Praxis

In vielen Anwendungsbereichen wie Strömungsmechanik, Reservoirsimulation (sowohl Öl als auch Grundwasser), sowie Gießen und Formen von Plastik und Metallen sind hierarchische

Lösungsverfahren mittlerweile weit verbreitet. Insbesondere ist SAMG als numerischer Kernlöser bereits in vielen kommerziellen Simulationsprogrammen vorhanden, obwohl noch nicht alle Diskretisierungsansätze einer optimalen Behandlung durch SAMG zugänglich sind. In anderen Anwendungsfeldern wie Prozess- und Devicesimulation der Halbleiterphysik konnten zwar die Effektivität und Robustheit von SAMG praktisch verifiziert werden, kommerziell hat sich SAMG allerdings noch nicht durchgesetzt.

Bei strömungsmechanischen Anwendungen, etwa aus der Automobilindustrie, kommen hierarchische Verfahren traditionell bereits seit langem zum Einsatz. Neben der Umströmung des Autos für eine optimale aerodynamische Auslegung gehören zu den klassischen Simulationsanwendungen zum Beispiel die optimale Auslegung von Heiz- und Kühlsystemen, die Durchströmung des Motorraums, und die Innenströmung in der Fahrgastzelle. Komplizierte, unstrukturierte und hochauflösende Gitter benötigt man zur Modellierung dieser Anwendungen. Die Anforderungen an die Genauigkeit praktisch relevanter Simulationen steigen ständig, was wiederum zu immer feineren Gittern, verbunden mit wachsendem Rechenaufwand führt.

Allein aufgrund der schieren Größe der resultierenden Gleichungssysteme sind hier klassische Standardverfahren nicht mehr in der Lage, eine Lösung in einer ökonomisch vertretbaren Zeit zu liefern. Oft kommen allerdings noch andere, anwendungsspezifische Probleme hinzu, welche die Brauchbarkeit klassischer Verfahren weiter stark einschränken. Zum Beispiel werden in der Reservoirsimulation komplexe Mehrphasenströmungen in porösen Medien numerisch berechnet. Starke Variationen in der Permeabilität (Durchlässigkeit) der durchströmten Medien



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

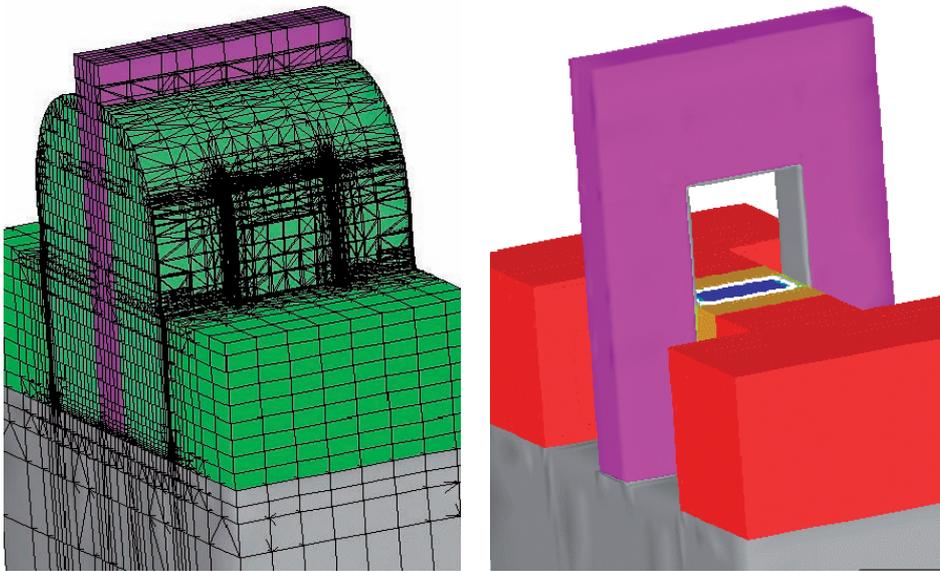
erzeugen extreme Unstetigkeiten in den physikalischen Modellen verbunden mit entsprechenden Schwankungen in den Matrixkoeffizienten der zu lösenden Gleichungssysteme. AMG-basierte Verfahren können gerade auf Gleichungssysteme mit solchen Eigenschaften sehr effizient angewendet werden.

Speziell in der Ölreservoirsimulation ist SAMG mittlerweile ein etabliertes Tool für viele Softwareprovider sowie bedeutende Ölfirmen geworden. Im Zusammenhang mit speziellen Simulationsmethoden (Stromlinienmethode) konnten zum ersten Male Reservoirs mit mehreren Millionen Zellen simuliert

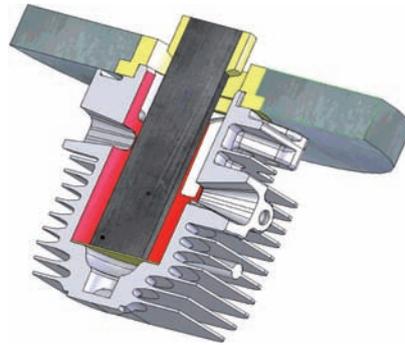
werden, wobei der typische Rechenzeitgewinn durch die Benutzung von SAMG ein bis zwei Zehnerpotenzen beträgt. Die Ansprüche an die Modellierung in der Ölreservoirsimulation steigen allerdings ständig. So berücksichtigen die anspruchvollsten der heutigen Modelle nicht nur die einzelnen chemischen Komponenten von Öl und deren Interaktion («compositional models»), sondern auch geophysikalische Abhängigkeiten. Damit wachsen auch die Anforderungen an den numerischen Kernlöser weiter an. SCAI verbessert und erweitert ständig die algebraische Mehrgitterbibliothek SAMG, um den wachsenden Anforderungen

in der Ölreservoirsimulation gerecht zu werden.

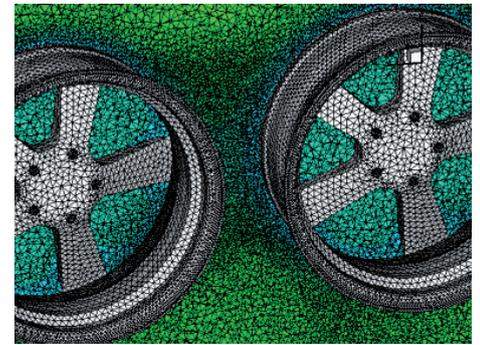
Weit verbreitet ist SAMG auch in der Simulation von Gieß- und Formprozessen. Hier geht es beispielsweise um die fundierte Berechnung von Formfüllungen, Erstarrung und Abkühlung der mechanischen Eigenschaften, thermischen Spannungen und des Verzugs von Gussteilen. In der Kunststofftechnik erlaubt die numerische Simulation neue Einblicke in die formgebenden Prozesse. SAMG ist bereits bei mehreren Softwarehäusern im Einsatz. Je nach konkreter Anwendung ließen sich Beschleunigungen von Simulationspro-



Device-Simulation: Gitter und Dopingprofil eines FinFET-Transistors (Synopsys Inc.)



Geometrie zur Verchromung eines Verbrennungszylinders (Elyca)



Verchromung von Autorädern: Gitter für die numerische Simulation (Elyca)

zessen um einen Faktor fünf bis zehn oder sogar mehr erzielen.

Neue Anwendungen

Ein relativ neues Einsatzgebiet für SAMG liegt in der Elektrochemie. SAMG wird hier zur Zeit industriell zur Beschleunigung von Simulationen elektrochemischer Ätz- und Beschichtungsprozesse (künstl. Korrosion bzw. Galvanisierung) eingesetzt. Mathematisch läuft dies auf die effiziente Lösung der Navier-Stokes Gleichungen (zur Simulation der Strömung in einem Elektrolyt) sowie spezieller Potenzialmodelle (Poisson- und Netzwerkglei-

chung) hinaus. In der praktischen Anwendung konnten durch den Einsatz von SAMG die Rechenzeiten um einen Faktor von bis zu fünf oder sogar mehr reduziert werden. In einigen Anwendungen machte SAMG eine numerische Simulation überhaupt erst möglich. Ein Beispiel hierfür sind Diesel-Einspritzsysteme, deren hochkomplexe Diskretisierungsgitter zur Divergenz von Standardlösern führte. Die Anwendung von SAMG auch auf komplexe Multi-Ionen-Modelle ist zur Zeit noch Gegenstand der Forschung.

In weiteren neuen Anwendungsfeldern wie der Schaltkreissimulation und der elektromagnetischen Kom-

patibilität existieren effiziente AMG-Ansätze bisher nur in Spezialfällen. Hier liegt zwar ein großes Potenzial für den industriellen Einsatz von SAMG, zur Zeit sind entsprechende Entwicklungsarbeiten allerdings noch stark forschungsorientiert.

Ansprechpartner

» Dr. Klaus Stüben
Telefon 02241 14-2749
klaus.stueben@scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/samg

FEMZIP und GRIBZIP

Standards für die Kompression numerischer Simulationsergebnisse und meteorologischer Daten

Situation

Bei der Simulation dynamischer Prozesse (zum Beispiel Crash-Versuche, Wetterentwicklung oder Gießvorgänge) entstehen riesige Datenmengen. Pro Simulationslauf können die Dateien leicht eine Größe von zehn Gigabyte erreichen und zu Datenarchiven in der Größenordnung von 15 Petabyte führen. Der Umgang mit diesen Datenbergen ist für die Unternehmen schwierig. Noch dazu kommen inakzeptabel lange Wartezeiten für diejenigen, die diese Daten visualisieren wollen.

Lösung

Zur Lösung dieser Probleme hat das Fraunhofer SCAI Verfahren zur Kompression numerischer Simulationsergebnisse entwickelt, die auf finiten

Elementen (FE) beruhen. Eines der entstandenen Softwareprodukte ist FEMZIP. Das Programm kann Simulationsergebnisse der Crash-Simulationsprogramme Pamcrash- und LS-DYNA um den Faktor zehn bei einem bedeutungslosen Informationsverlust verkleinern. GRIBZIP, ein Kompressionstool für meteorologischen Daten, kann solche Daten um den Faktor drei verlustfrei komprimieren.

Kompression im Detail

FEMZIP-P und -L sind Programme, die Ergebnisdaten der führenden Crashprogramme PAM-CRASH und LS-DYNA komprimieren, sodass sie nach der Dekompression als Ersatzdaten für das Standard-Postprocessing benutzt werden können. Die Kompression ist nicht verlustfrei. Die Nutzer legen die Genau-

igkeit der komprimierten Daten fest. Bei Einstellung der Genauigkeit auf »fein«, sind Kompressionsfaktoren um fünf zu erwarten, bei grober Genauigkeit um zehn.

Erfolgreiche Vermarktung

Die Vermarktung von FEMZIP entwickelt sich für das Fraunhofer SCAI äußerst erfolgreich. Viele Automobilhersteller haben die Software bereits lizenziert.

Bislang besitzt FEMZIP ein Alleinstellungsmerkmal, da es keine Software zur formaterhaltenden Kompression von Daten aus den Programmen LS-DYNA und PAM-CRASH auf dem Markt gibt.

Automobilhersteller und Zulieferer setzen spezielle Programme, so-



Finite-Elemente-Modell eines Ford Taurus für die Crash-Simulation mit etwa einer Million Gitterpunkten. Das Modell stammt vom National Crash Analysis Center (NCAC), Ashburn Virginia, USA.

Simulationsergebnis eines Frontcrash mit vollständiger Überdeckung zwischen Modell und Barriere.



nannte Postprozessoren ein, um die Ergebnisdateien von Crash-Simulationsprogrammen zu visualisieren. Zur Durchdringung des Marktes hat SCAI daher besondere Anstrengungen unternommen, damit die Postprozessoren die mit FEMZIP komprimierten Daten direkt, ohne zuerst dekomprimieren zu müssen, einlesen können. Die Leseschwindigkeit solcher komprimierten Dateien konnte so weit erhöht werden, dass die Visualisierung komprimierter Dateien schneller vonstatten geht, als das Lesen einer unkomprimierten Datei. Dies trifft auf die folgenden Visualisierer zu: Altair Hyperview, GNS Animator, LSTC LSPrepost und Beta von Beta CAE Systems, Hyperview und LSPrepost.

In einer Studie für Audi hat SCAI verschiedene Strategien zur Kompression von Noise-Vibration-Harshness-Ergebnissen (NVH) im Automobilbe-

reich verglichen. Die guten Ergebnisse mit den am SCAI entwickelten Verfahren führten zur Entwicklung einer Programmvariante, FEMEZIP-NVH, deren Vermarktung im Jahr 2008 starten soll. Die Grafiken zeigen die Eigenschwingungen eines Pkw.

GRIBZIP komprimiert meteorologische Daten verlustfrei

GRIBZIP ist eine Software zur verlustfreien Kompression meteorologischer Daten im internationalen Standardformat Grib1. Der Deutsche Wetterdienst (DWD) in Offenbach hat GRIBZIP im Jahr 2007 in Betrieb genommen. Das zu komprimierende Archiv hat aktuell eine Größe von zwei Petabyte. Nach Inbetriebnahme eines neuen Rechenzentrums beim DWD würde die Archivgröße auf 10 bis 15 Petabyte anwachsen.

Zurzeit entwickelt das Fraunhofer SCAI eine drei mal schnellere, aber genau so gut komprimierende Version von GRIBZIP.

Fraunhofer-Preis im Jahr 2007

Ein großer Erfolg für die Kompressionsgruppe war die Verleihung des Josef-von-Fraunhofer-Preis im Jahr 2007 für herausragende wissenschaftliche Leistungen zur Lösung anwendungsnaher Probleme in der Informationstechnik.



Das für Wettervorhersagen benutzte Ikosaedergitter wird im Jahr 2012 aus etwa vier Millionen Gitterpunkten auf der Erdoberfläche und 100 Höhenschichten bestehen. In jedem Zeitschritt sind dann jeweils Gleichungssysteme mit 400 Millionen Unbekannten zu lösen.

Ansprechpartner

» Dipl.-Math. Clemens-August Thole
Telefon 02241 14-2739
clemens-august.thole@
scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/femzip

DIFF-Crash

Visuell unterstützte Stabilitätsanalyse von Simulationsergebnissen

Physikalische Verzweigungen im Modell und numerische Instabilitäten im eingesetzten Simulationspaket führen in der Crash-Simulation oft zu einer sehr empfindlichen Abhängigkeit der Ergebnisse von selbst kleinsten Modelländerungen. Werkzeuge wie die SCAI-Software DIFF-Crash erlauben es, kritische Instabilitäten aufzudecken, sie zu interpretieren und mit Hilfe spezieller Methoden gezielt die Ursachen in einem Modellentwurf zu finden.

Um die Sicherheit von Automobilentwürfen zu beurteilen, setzt man heute – neben realen Crash-Tests – vorwiegend auf Simulationen des Aufprallverhaltens. Genauigkeit und Zuverlässigkeit der Simulationsergebnisse sind daher unverzichtbare Forderungen. Ein Problem besteht allerdings darin, dass Produktionstoleranzen – zum Beispiel Variationen von Blechdicken – unvermeidbar sind, was wiederum erheblichen Einfluss auf die Simulationsergebnisse haben kann. So können

etwa Beuleffekte sehr empfindlich von derartigen Einflussgrößen abhängen, und selbst geringe Änderungen am Modell – auch wenn diese nur durch Rundungsfehler bedingt sind – können substantielle Variationen («Streuungen») der funktionalen Kenngrößen bewirken.

Bild 1 zeigt beispielhaft ein Szenario für ein realistisches Crash-Modell eines Chrysler Neons. Hier wird die Lage der Barriere für den Crash variiert. Es werden entsprechende Simulationsläufe durchgeführt, und anschließend sollen die resultierenden Streuungen untersucht werden.

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

Simulationsergebnissen, erweitert um die berechneten Analyse-Werte. Diese Datei kann man anschließend mit Standard-Grafikprogrammen visualisieren und interpretieren. So lassen sich zum Beispiel die Streuung von Knotenkoordinaten an verschiedenen Orten im simulierten Fahrzeugmodell vergleichen (Bild 2), die Entwicklung der Streuung auf verschiedene Arten analysieren (Bild 3) und unterschiedliche Verzweigungsmuster derjenigen Bauteile finden, die für die Streuung ursächlich sind. Hierdurch erhält der Ingenieur konkrete Hinweise auf die Stabilität eines Modells und der entsprechenden Simulation und somit wertvolle Hilfen zu Verbesserungen auf dem Weg zu einem stabileren Modell.

SCAI erweitert die Analysemöglichkeiten von DIFF-Crash kontinuierlich. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Entwicklung und Realisierung weiterer Funktionale, welche die Wertestreuung an unterschiedlichen Stellen im

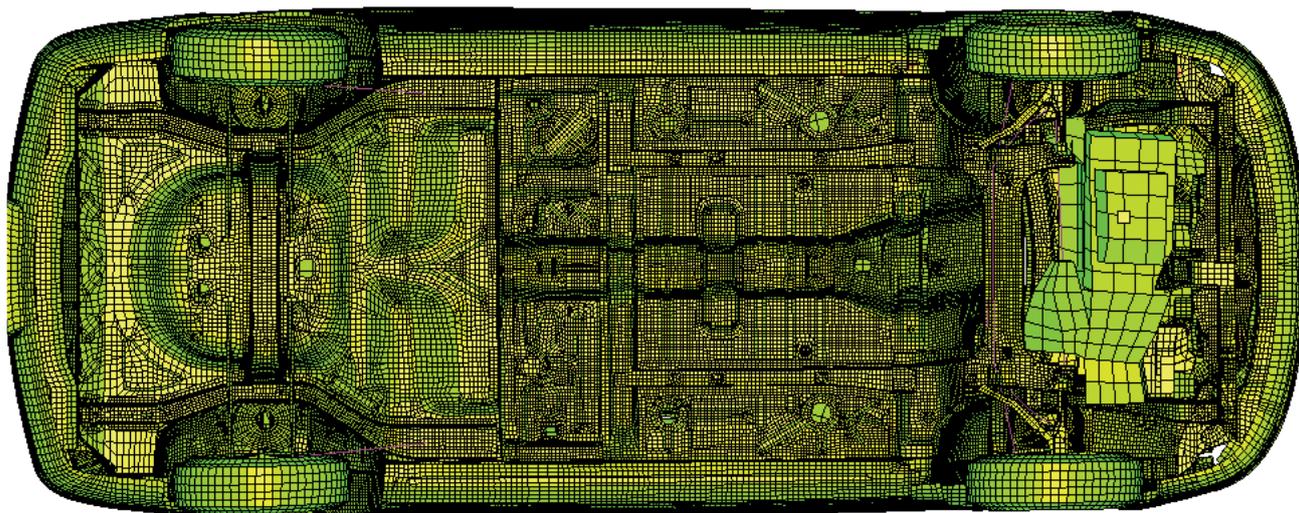


Bild 1: Ein Crash-Szenario für das Modell Neon von Chrysler.

Modell vergleichen und Ähnlichkeiten messen. Eine typische Situation ist in Bild 4 skizziert, wo die Positionen zweier Knoten, so wie sie sich aus sechs verschiedenen Simulationsläufen ergeben, in Form von zwei Knotenwolken dargestellt sind. Während sich die konkrete Lage oder Distanz der zu verschiedenen Simulationsläufen gehörenden Positionen stark unterscheiden, bleibt die grundsätzliche Position der beiden Knoten zueinander aber bei jedem einzelnen Simulations-

lauf unverändert. Bei einer derartigen Struktur geht man davon aus, dass die Streuung an den beiden Modellknoten die gleiche Ursache hat. SCAI hat ein für solche Fälle entwickeltes Ähnlichkeitsfunktional patentiert.

DIFF-Crash wird bereits heute gewinnbringend in der Automobilindustrie eingesetzt. So konnte mit Hilfe von DIFF-Crash die Ursache einer in einem Modell der Volkswagen AG beobachteten Streuung aufgedeckt und durch

eine gezielte Modelländerung deutlich reduziert werden.

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

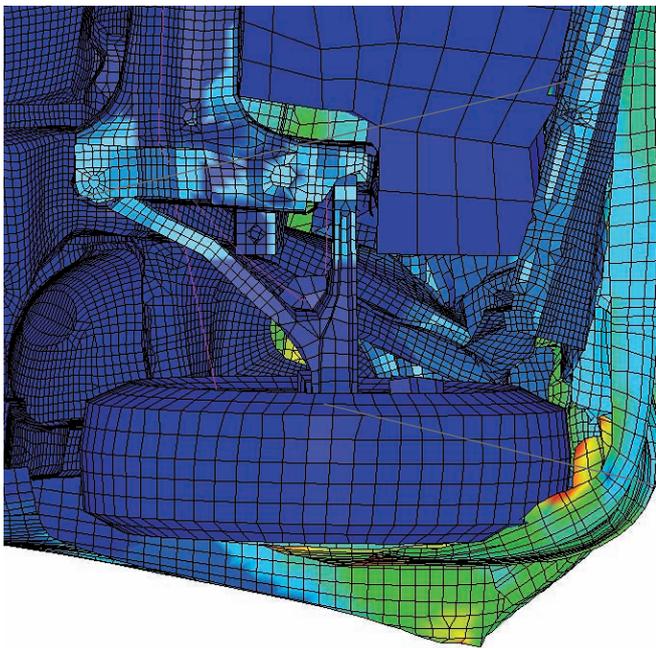


Bild 2: Streuung von Knotenpositionen in unterschiedlichen Simulationsläufen.

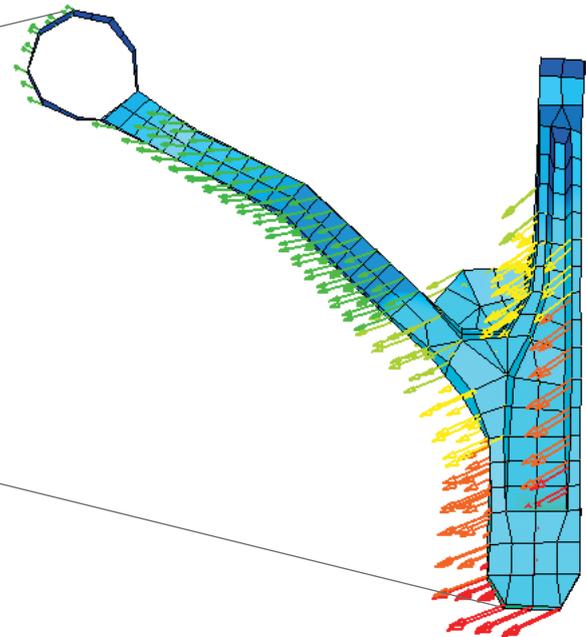


Bild 3: Hauptrichtungen der Streuungen.

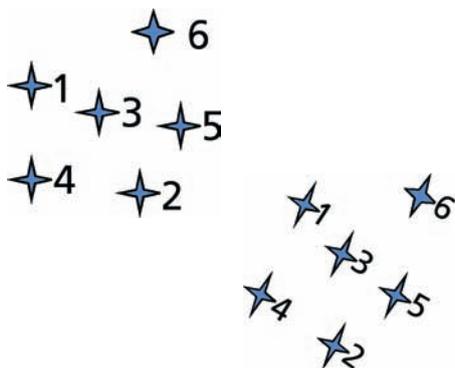


Bild 4: Streumuster: Positionen zweier Gitterpunkte in sechs unterschiedlichen Simulationsläufen

Ansprechpartner

» Dr. Tanja Clees
Telefon 02241 14-2983

» Dipl.-Inf. Helmut Schwamborn
Telefon 02241 14-2312

» diffrash@scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/diffrash

DesParO

Interaktive Umgebung zur Optimierung von Design-Parametern

Computersimulationen technischer Prozesse und Produkte hängen typischerweise von vielen Geometrie-, Material- und Prozessparametern ab. Der Anwender ist an einer Konfiguration dieser Design-Parameter interessiert, die eine möglichst gute Auslegung des Produktes oder die Steuerung des Fertigungsprozesses erlaubt. Üblicherweise sind jedoch nicht alle Kriterien gleichzeitig voll erfüllbar. Ein Beispiel ist die möglichst kleine Blechdicke eines Bauteils bei möglichst großer Stabilität. Wie aber verändern sich die Eigenschaften eines Produkts, wenn Design-Parameter verändert werden? Und wie findet man möglichst gute, das heißt pareto-optimale, Kompromisslösungen des gegebenen Optimierungsproblems? Die Antworten darauf liefert die interaktive Umgebung DesParO.

Im Gegensatz zu existierenden automatischen Optimierungstools erlaubt DesParO dem Benutzer, interaktiv den kompletten Design-Raum zu

erforschen und den optimalen Bereich (die Pareto-Front) des multikriteriellen Optimierungsproblems zu finden. Dazu wird zuerst mit Design-of-Experiments-Techniken (DoE) ein kleiner Satz Simulationsexperimente bestimmt. Die Simulationsergebnisse verwendet DesParO zur Erzeugung eines nichtlinearen Metamodells, basierend auf radialen Basisfunktionen. Durch einen globalen Blick auf den Designraum kann der Benutzer das für seine Frage optimale Design finden. DesParO besitzt daher nicht die gängigen Nachteile automatischer Optimierungstools, wie etwa das »Hängenbleiben« in nur lokalen Optima, wie es typisch für Gradienten-basierte Methoden ist, oder aber sehr viele numerische Experimente, wie es bei Monte-Carlo-artigen Strategien notwendig ist.

Robuste Toleranzvorhersage

Eine erfolgreiche Optimierung mit einem Metamodell ist nur möglich,

wenn die Toleranzen berücksichtigt werden. Daher wird mit DesParOs Metamodell nicht nur der Wert der Zielfunktion approximiert, sondern auch die Toleranzgrenzen der Kriterien über Cross-Validierung bestimmt. Auch bei verrauschten Kriterien erlaubt dies, ein robustes, optimales Design im 3-Sigma-Konfidenzintervall zu erhalten.

Globale Sensitivitätsanalyse

Abhängigkeitsmuster zwischen den Optimierungskriterien und den Design-Parametern werden automatisch erkannt und mit Hilfe eines leicht zu interpretierenden farblichen Diagramms dargestellt. Das Diagramm zeigt die einflussreichsten Design-Parameter, die sensitivsten Optimierungskriterien und das »Vorzeichen« der Abhängigkeit: steigend (rot), fallend (blau) oder nicht-monoton (schwarz).

DesParO bietet eine intuitive grafische Benutzerschnittstelle.



Schnelle Interpolation und Visualisierung

DesParO erlaubt die Interpolation und hochaufgelöste Visualisierung des gefundenen robusten optimalen Designs, falls entsprechende Ergebnisdateien zur Verfügung stehen. Die Interpolation und Visualisierung ist sogar dann schnell berechnet und interaktiv erforschbar, wenn die Simulationsergebnisse auf feinen Finite-Elemente-Gittern mit über einer Million Gitterpunkten vorliegen.

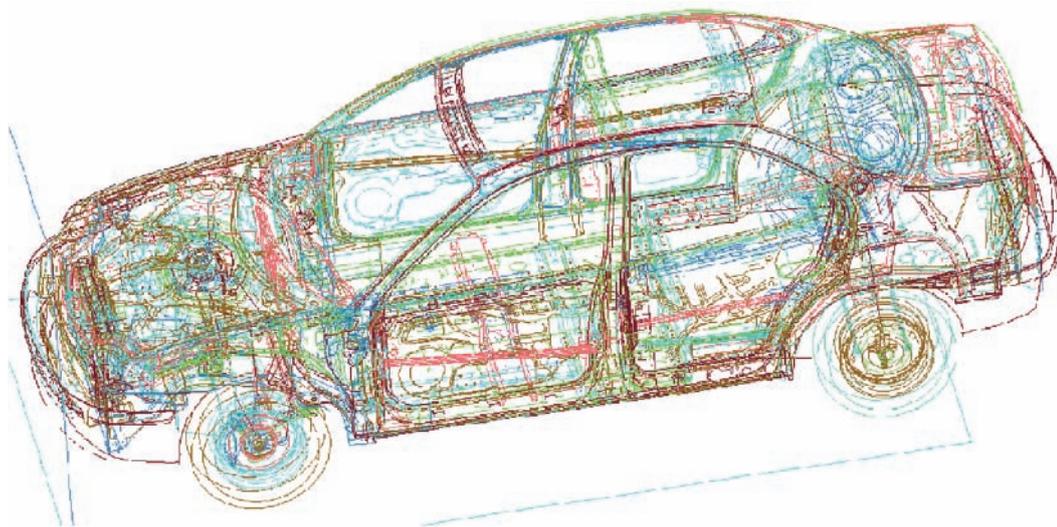
Ein Anwendungsbeispiel zur Design-Optimierung

DesParO wurde bereits für eine Reihe praktisch relevanter Optimierungsanwendungen erfolgreich eingesetzt, insbesondere aus dem Automobilbereich. Die Anwendungen können aktuell bereits eine große Zahl von Design-Parametern (bis zu 100) und Design-Kriterien (bis zu 50) enthalten.

Bei der Volkswagen AG war das Ziel eine Minimierung der Gesamtmasse des Autos durch Variation 15 gängiger Bauteile bei gleichzeitiger Berücksichtigung von elf Sicherheits- bzw. Komfortkriterien. Die Optimierung mit DesParO erlaubte eine signifikante Massenre-

duktion bei gleichzeitiger Einhaltung aller Nebenbedingungen. Gleichzeitig konnte die Zuverlässigkeit des Designs sichergestellt werden.

DesParO lässt sich mit beliebigen Simulationsprogrammen koppeln und bietet vor allem Möglichkeiten, mit relativ wenigen Berechnungen annähernd optimale Konfigurationen zu finden. Darüber hinaus werden parallele Simulationen unterstützt. Die Toolbox eignet sich daher besonders für Simulationsprogramme, die lange Rechenzeiten benötigen. Als Ergänzung zum Einsatz der Software bietet das Fraunhofer SCAI auch individuelle Unterstützung bei der Auswahl und dem Einsatz von Optimierungsstrategien.



Visualisierung der Design-Optimierung mit DesParO.

Ansprechpartner

» Dr. Tanja Clees
Telefon 02241 14-2983

» Dr. Lialia Nikitina
Telefon 02241 14-2312

» desparo@scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/desparo

ProMiner

Erkennung biomedizinischer Fachbegriffe in wissenschaftlichen Texten

Aktuelle Information über Gene, Krankheiten und die Wirkungsweise von Medikamenten und deren Inhaltstoffe finden sich zumeist nicht in Datenbanken, sondern in wissenschaftlichen Publikationen und Patenten. Zur automatischen Bereitstellung und Extraktion gilt es,

- die biomedizinischen und chemischen Fachbegriffe in den Texten zu erkennen und
- diese den entsprechenden Referenzen wie einer Gensequenz, einer chemischen Struktur oder einer Klasse von Krankheiten zuzuordnen (siehe Bild 1).

Die Forschung entwickelt das Wissen über Gene und die Klassifikation von Krankheiten ständig weiter. Zudem werden neue Wirkstoffe geschaffen. Aus diesem Grund müssen die Wörterbücher zum Erkennen der Fachbegriffe häufig aktualisiert werden. Erschwerend kommt hinzu, dass häufig kurze Akronyme zum Einsatz kommen. Diese Kunstworte bezeichnen oft eine Krankheit und ein Gen und sind deshalb mehrdeutig.

BioCreAtivE evaluation								
	Mouse		Fly		Yeast		Human	
BioCreAtivE	I (2004)		I (2004)		I (2004)		II (2006)	
	best automatic system	ProMiner™ system						
F-Measure	0,79	0,79	0,82	0,82	0,92	0,9	0,81	0,8

Tabelle 1: Im Wettbewerb bewies ProMiner seine Qualität in der Erkennung von Genen und Proteinen.

Lösung

Mit der SCAI-Software ProMiner ist es möglich, biologische, medizinische oder chemische Fachbegriffe in wissenschaftlichen Texten zu erkennen. Zur Erkennung der Begriffe verwendet ProMiner Wörterbücher. Die Software kann mit riesigen Vokabularien, Thesauri oder Ontologien arbeiten. Eine automatische Wörterbuch-Generierung, Korrektur von Einträgen und ein Aktualisierungsprozess ist in ebenfalls integriert.

Die Software löst mehrere fundamentale Probleme der Namenserkennung:

- Erkennung biomedizinischer Fachbegriffe und deren Schreibvarianten in Texten
- Abbildung von Synonymen auf Referenzbezeichnungen
- Kontext-abhängiger Ausschluss von Mehrdeutigkeiten (Disambiguierung) biomedizinischer Terme
- Auflösung domänenspezifischer Ungenauigkeiten bei der Nutzung biomedizinischer Namen

Die herausragende Qualität der Erkennung von Genen und Proteinen bewies ProMiner in internationalen Studien, den »critical assessments of text mining in biology« (BioCreAtivE I und II). Bei den menschlichen Genen und den Modellorganismen Maus und Drosophila konnte eine Erkennungsrate von 80 Prozent (F-score) erzielt werden und bei der Hefe eine Rate von 90 Prozent F-score (siehe Tabelle 1).

Die Ergebnisse der ProMiner-Suchen können in aggregierter Form in der Suchmaschine »SCAView« dargestellt werden. Verschiedene Anfragen sind möglich, zum Beispiel:

- Welche Gene/Proteine haben eine Rolle in einer bestimmten Krankheit?
- Welche Medikamente sind für eine Krankheit relevant?
- Welche chromosomalen Abschnitte und unterschiedliche Variationen dieser Abschnitte (Polymorphismen, SNPs) sind bei einer Krankheit beteiligt?
- Welche anderen Krankheiten kommen zusammen mit einer bestimmten Krankheit vor?

Genomwide-linkage and haplotype-association studies map **intracranial aneurysm** to **chromosome 7q11**. 804-19 Rupture of **intracranial aneurysms (IAs)** causes **subarachnoid hemorrhage**, a devastating condition with high morbidity and mortality. Angiographic and autopsy studies show that **IA** is a common disorder, with a prevalence of 3%-6%. Although **IA** has a substantial genetic component, little attention has been given to the genetic determinants. We report here a genomewide linkage study of **IA** in 104 Japanese affected sib pairs in which positive evidence of linkage on **chromosomes 5q22-31** (maximum LOD score [MLS] 2.24), **7q11** (MLS 3.22), and **14q22** (MLS 2.31) were found. The best evidence of linkage is detected at D7S2472, in the vicinity of the **elastin** gene (**ELN**), a candidate gene for **IA**. Fourteen distinct single-nucleotide polymorphisms (SNPs) were identified in **ELN**, and no obvious allelic association between **IA** and each SNP was observed. The haplotype between the intron-20/intron polymorphism of **ELN** is strongly associated with **IA** ($P=3.81 \times 10^{-6}$), and homozygous patients are at high risk ($P=.002$), with an odds ratio of 4.39. These findings suggest that a genetic locus for **IA** lies within or close to the **ELN** locus on **chromosome 7**.

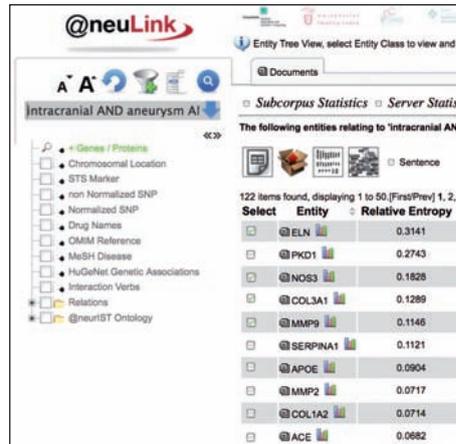
UMLS
 CUI: C0007766
 Concept: Intracranial Aneurysm
 Semantic Type: Disease or Syndrome

Entrez Gene
 GeneID: 2006
 Official Symbol: ELN
 Name: elastin

swissprot
 Accession number: P15502
 Protein Name: elastin

Bild 1: ProMiner erkennt biomedizinische und chemische Begriffe in Texten und hebt sie farbig hervor.

Wichtig beim Auffinden des Wissens ist der Stellenwert der gefundenen Information. Hier benutzt SCAI statistische Maße (Relative Entropie), um die Ergebnisse einer spezifischen Suche mit unspezifischen Suchen vergleichen und danach bewerten zu können. Eine Validierung dieser Strategie für die Krankheit »intracraniale Aneurysmen« zeigte, dass von 18 Genen, die in einem Review genannt werden, alle gefunden werden, 13 unter den Top 16 (siehe Bild 2).



Zusätzlich zur Entitätensicht mit Referenz zu den jeweiligen Datenbanken können die Dokumente mit den gefundenen Begriffen angezeigt werden (siehe Bild 3). Dies verschafft den Wissenschaftlern einen schnellen Überblick.

lauf; was im Falle von Medline auf einer Einprozessormaschine etwa einen Tag dauert (auf einem Cluster mit 30 Knoten reduziert sich dieser Zeitraum auf etwa eine Stunde).

Leistungsdaten

Ein effizienter Suchalgorithmus ist von großer Bedeutung. Geht es um Menschen, müssen mehr als 20 000 Referenzgen- und Referenzproteinbezeichnungen mit mehr als 270 000 Synonymen in den inzwischen mehr als 16 Millionen Zusammenfassungen der bibliographischen Datenbank »Medline« erkannt werden. Für andere Organismen bestehen ähnliche Herausforderungen. Die Software ProMiner sucht alle Namen in einem einzigen Durch-

Technische Spezifikation

Die Software ProMiner läuft auf Unix- und Linux-Systemen sowie auf Betriebssystemen von Microsoft. Da große Dokumentenmengen leicht auf mehrere Systeme verteilt werden können, wurde ProMiner mit einem eigenen Skript für verteiltes Rechnen ausge-

Bild 2: Die biomedizinischen Terminologien sind in suchbaren Hierarchien eingebettet und ermöglichen Abfragen in Kombination mit einer Volltextsuche.

Die Suche nach den Begriffen: »intracranial aneurysm« und »genetics« in der gesamten Datenbank von Medline und Auswahl der Kategorie Gene/Proteine findet 122 Gene, die nach relativer Entropie geordnet sind. Der Vergleich mit dem Review »Krischek, B. & Inoue, I. The genetics of intracranial aneurysms., J Hum Genet, 2006, 51, 587-594« zeigt, dass die dort genannten Gene im Ergebnis hohe Positionen einnehmen (nachträglich markiert).

stattet und lässt sich in die Architektur UIMA (Unstructured Information Management Architecture) integrieren. Eine Vielzahl etablierter Grid-Scheduler in verteilten Systemen können das Tool starten und kontrollieren.

Kooperationspartner

TEMIS S.A. integriert ProMiner in die BER-SkillCartridge zur Extraktion von Relationen zwischen verschiedenen Entitäten.

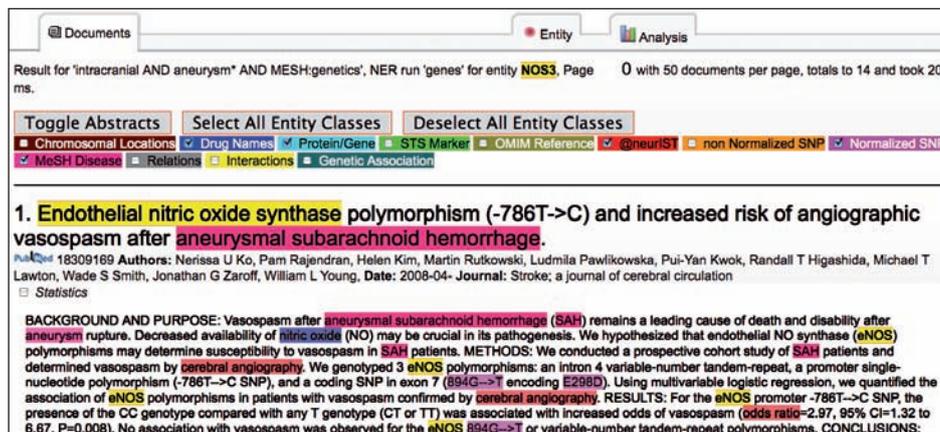


Bild 3: Dokumentenansicht in SCAIVIEW für das Gen NOS3 (gelbe Markierung). Der Nutzer kann verschiedene Begriffsklassen (Gene, Wirkstoffe, Marker) auswählen und farbig hervorheben.

Ansprechpartnerin

» Dr. Juliane Fluck
 Telefon 02241 14-2188
 juliane.fluck@scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/prominer

Situation

Das Publizieren chemischen Wissens über Moleküle und Reaktion in Form von Zeichnungen hat eine lange Tradition. Besonders bekannt geworden ist die Skizze von August Friedrich Kekulé, der die Struktur des Benzols als einen aus sechs Kohlenstoff-Atomen bestehenden symmetrischen Ring gezeichnet hat. Noch heute im elektronischen Zeitalter wird chemisches Wissen über Bilder vermittelt. Rastergrafiken lassen sich aus Lehrbüchern, Fachzeitschriften, Dissertationschriften und Patenten millionenfach extrahieren. Obwohl Chemiker heute in der Lage sind, diese Zeichnungen als echte chemische Objekte in

Dokumente der Textverarbeitung und in Webseiten einzubetten, bevorzugen sie die Veröffentlichung als Bild. Dies hat den Vorteil, dass Chemiker ohne Zusatzprogramme Zugriff auf die Informationen haben. Der große Nachteil ist jedoch, dass man nur sehr schlecht nach diesem Wissen recherchieren kann. Rechner verstehen Bilder nur als eine Ansammlung von Pixeln und können somit keine inhaltlich chemischen Suchanfragen wie: »Finde alle Bilder, die einen Benzolring enthalten« beantworten. Deshalb nutzen Chemiker für die Recherche hauptsächlich Spezialdatenbanken, zum Beispiel für Patentanfragen oder zur Suche nach Synthese und Reaktionswegen.

Software

In der Abteilung Bioinformatik hat eine Forschungsgruppe seit 2004 ein Programm entwickelt, welches chemische Zeichnungen zurück in chemische Objekte wandelt, die vom Rechner weiterverarbeitet werden können. Aufbauend auf die Arbeiten vergangener Jahre, wie der Entwicklung eines eigenständigen Vektorisierers, konnte man 2007 drei neue Module hinzufügen:

- Erstens ein Modul zur Optical Character Recognition (OCR), welches auch auf spezielle chemische Symbole trainiert werden kann, die ein Standard OCR Programm nicht beherrscht. Das Modul basiert auf einem instanzbasierten maschinellen Lernverfahren.

Bildschirmdarstellung von chemoCR. Im linken Fenster befindet sich das Eingabebild. Im rechten Fenster ist ein chemischer Editor zur Nachbearbeitung des Ergebnisses geöffnet.

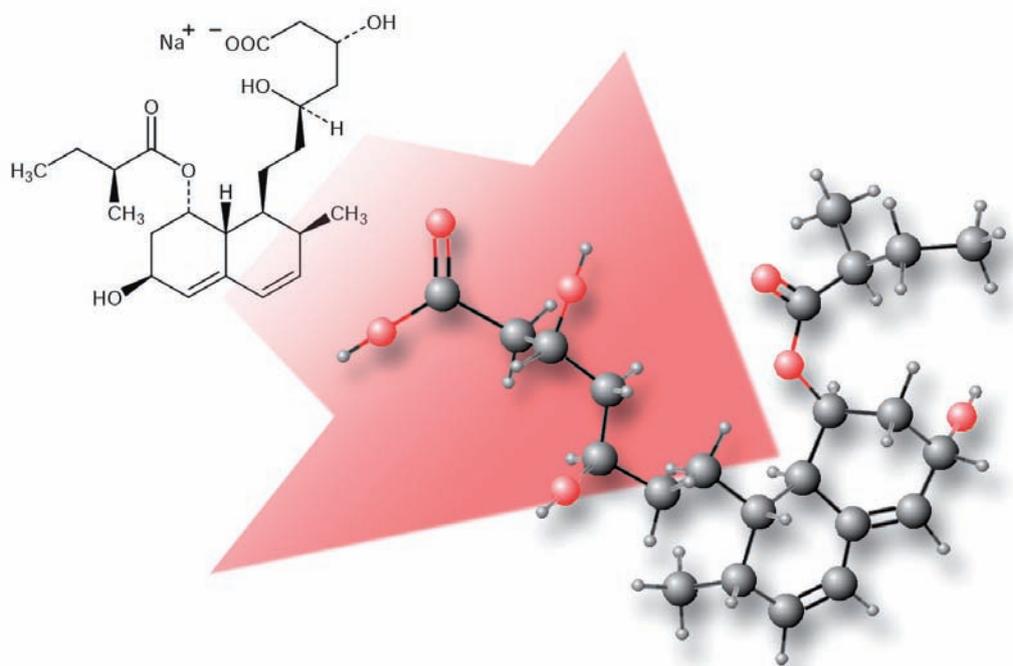
The screenshot displays the chemoCR software interface. The top window shows a complex chemical structure being reconstructed from an image. The bottom window shows a reaction scheme with three reactions:

- $\text{RO-CH(OH)-CH(OH)-OR} \xrightarrow{\text{OMe}^-}$
- $\text{RO-CH(OH)-CH(Me)-CH(OH)-OR} \xrightarrow{\text{Me}_2\text{CuLi}}$
- $\text{BnO-CH(OH)-CH(OBn)-CH(OH)-CO}_2\text{Me} \xrightarrow[2. \text{NaOMe}]{1. \text{H}_2 / \text{Pd}(\text{OH})_2/\text{C}}$

The right window shows the reconstructed molecule with a table of reconstruction parameters:

Reconstruction	Value
Input image	C:\Programmworkspace\CSR_workresults\temp0
Output File	C:\Programmworkspace\CSR_workresults\temp0
Formula (mass)	C ₂₈ H ₄₄ B ₂ L ₁ N ₁ O ₁₂ P ₂ S ₆ (4940.45)
Number of Atoms/Bonds	387 / 387
Number of fragments	33
Parameter Set	6_CAC_SPRINGER

Im linken Fenster befindet sich das Eingabebild – ein komplexes Reaktionsschema. Im rechten Bild sind die rekonstruierten Moleküle dargestellt. Reaktions symbole sind hervorgehoben.



Ein weiterer Schwerpunkt ist die Pflege und Weiterentwicklung der Struktur- und Reaktionsdatenbank SPRESI, die online unter dem Portal SPRESIweb recherchiert werden kann und Zugriff auf fünf Millionen Strukturen und Reaktionen erlaubt.

Mit der neuen Version von chemoCR wurden die Softwareentwicklungen beider Partner zusammengeführt und in der graphischen Benutzeroberfläche von chemoCR integriert (s. Abbildungen). Gemeinsam bieten SCAI und InfoChem nun einen Service zur Prozessierung großer Datenbestände gescannter Zeichnungen an, der auch die Qualitätssicherung der Ergebnisse umfasst. Dieser Service wurde der Öffentlichkeit erstmals auf der ICIC (The International Conference in Trends for Scientific Information Professionals) in Sitges (Barcelona, Spanien) im Herbst 2007 vorgestellt.

Das aktuelle System besteht vollständig aus Javamodulen, die vom genutzten Betriebssystem unabhängig sind. Es erlaubt die massiv parallele Konvertierung von Bildern auf dem Grid sowohl unter Windows als auch unter UNIX. Der Arbeitsablauf von chemoCR kann sehr einfach um externe Software, wie die Toolbox von InfoChem, erweitert werden. So lassen sich die Ein- (TIFF, PNG, BMP) und Ausgabeformate (MOL, SDF) um weitere Formate über Konvertierungsroutinen ergänzen.

- Zweitens eine Protokolldatenbank, die den massiv parallelen Prozessierungsschritt von Millionen Bildern auf dem Grid protokolliert und überwacht.
- Und drittens ein Expertensystem, das jenes chemisches Wissen enthält, welches für die Konvertierung der Bilder nötig ist. Dieses Expertensystem wird zusammen mit dem strategischen Partner der InfoChem GmbH gepflegt und dahingehend erweitert, dass vor allem chemische Reaktionen analysiert werden können.

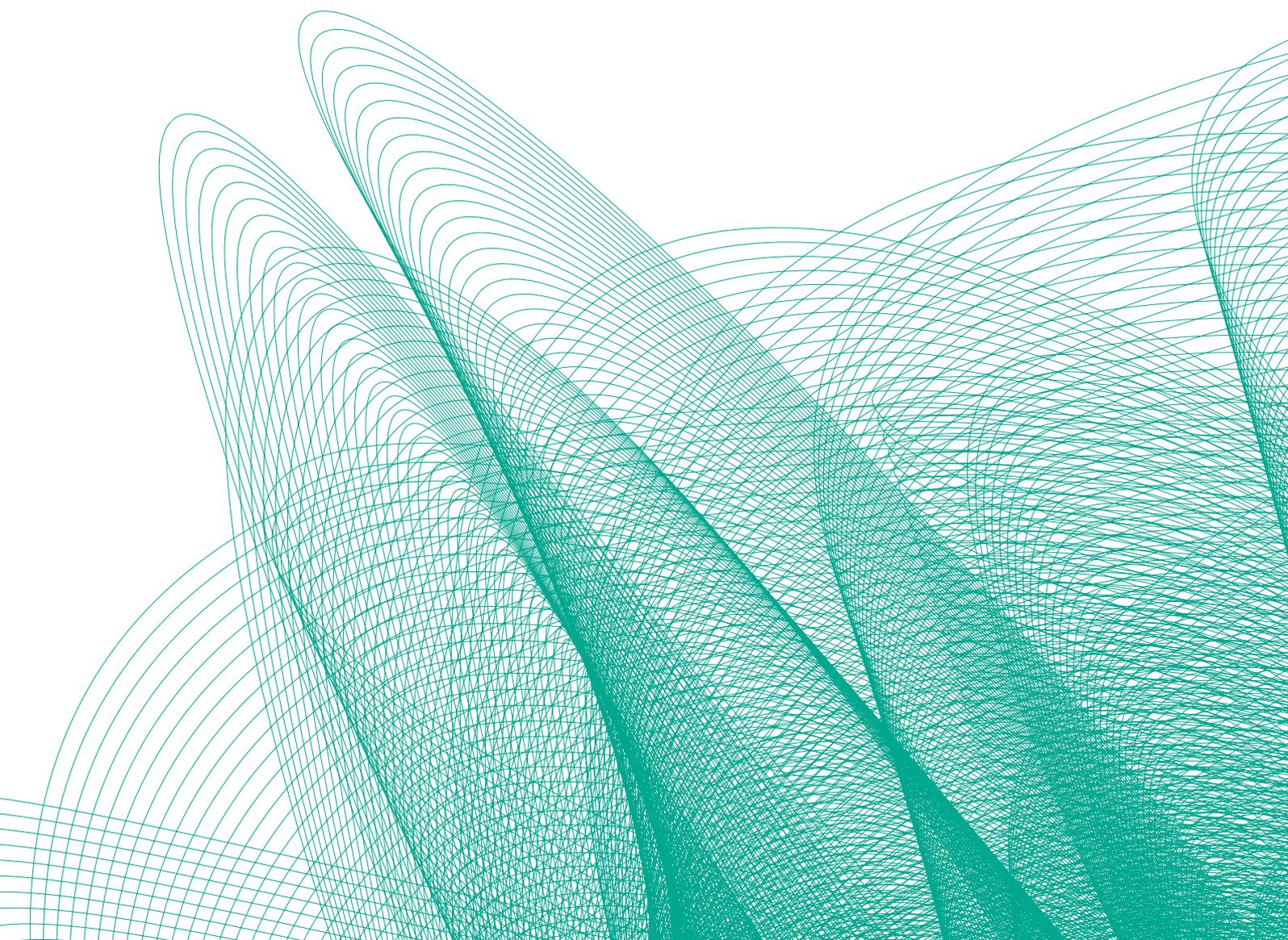
Kooperationspartner

Seit dem 2. Quartal 2007 kooperieren das Fraunhofer-Institut SCAI und InfoChem bei der Entwicklung und Vermarktung von chemoCR. Die InfoChem GmbH in München gehört zu den führenden Software-Anbietern für die chemische Struktur- und Reaktionsdatenverwaltung. Dabei liegen die Schwerpunkte in der Entwicklung und Vermarktung von Software für die effiziente Speicherung, Verwaltung, der Prozessierung sowie der Suche nach chemischen Strukturen und Reaktionen in großen Datenbeständen.

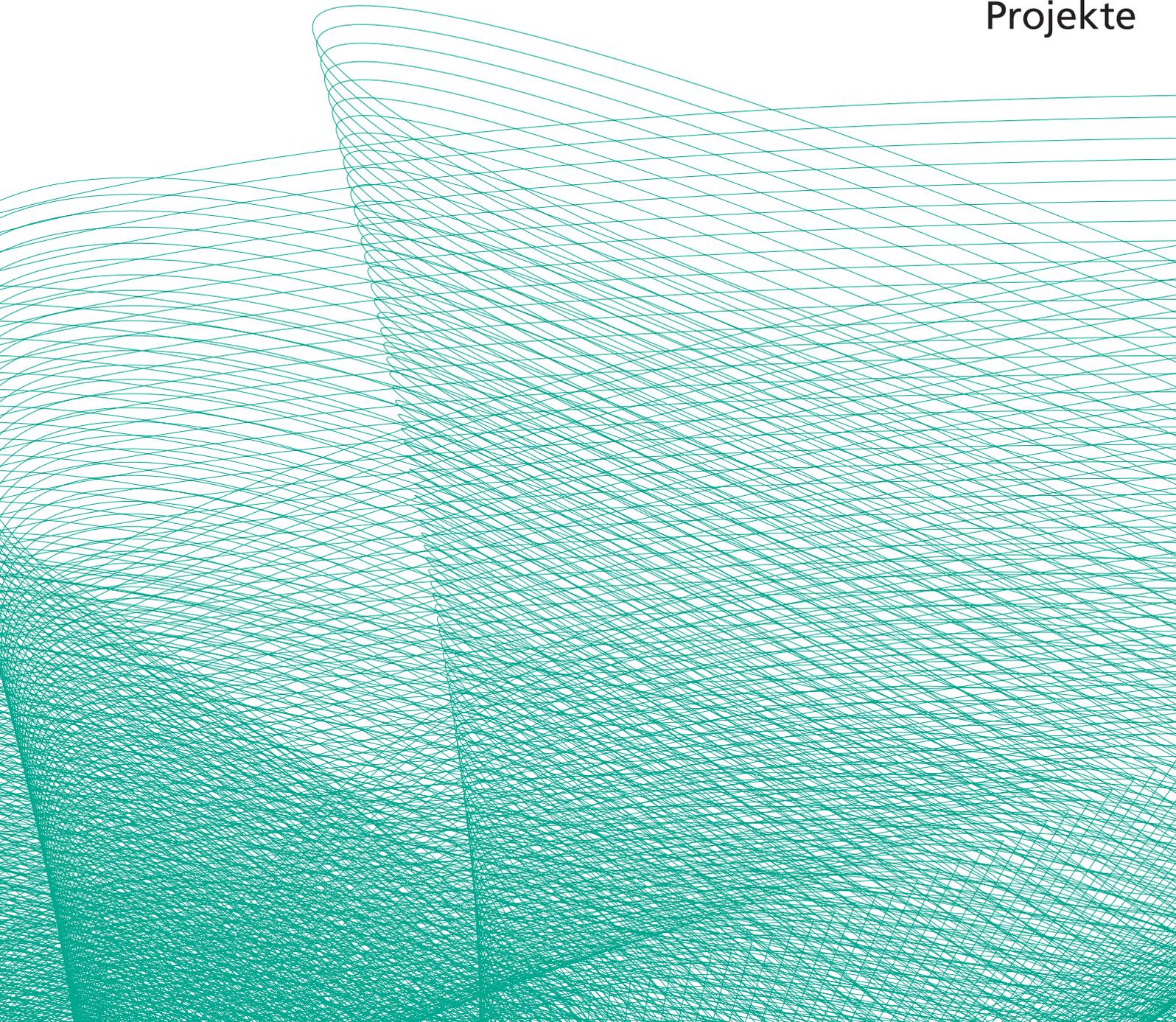
Ansprechpartner

» Dr. Marc Zimmermann
Telefon 02241 14-2276
marc.zimmermann@
scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/chemocr



Projekte



Grid Computing – Einführung

Arbeitsprozesse in Wirtschaft und Wissenschaft sind heute durch eine hohe Arbeitsteiligkeit gekennzeichnet. Projekte entstehen in Kooperation verschiedener Expertengruppen, die räumlich verteilt zusammenarbeiten. Wirtschaftsunternehmen binden Partner und Zulieferunternehmen in zunehmendem Maße in die Produktentwicklung ein. Auf der IT-Seite bedarf es zur Unterstützung solcher kooperativen Prozesse neuer Antworten und Lösungen. Wie kann man Ressourcen – Rechner, Daten, Software – im Unternehmen und über Unternehmensgrenzen hinweg anbieten? Wie lassen sich Kooperationsprozesse einfach und effizient organisieren und in einer IT-Umgebung abbilden? Wie lassen sich Probleme der Sicherheit, der Zugriffsbeziehung auf sensible Daten und der Authentifizierung von Nutzern verlässlich lösen?

Mit den Technologien des Grid Computing können Lösungen für diese Probleme geschaffen werden. Fraunhofer SCAI entwickelt in Projekten mit Wirtschaftsunternehmen und Partnern aus der Wissenschaft prototypische Lösungen. Zu den Angeboten des Instituts gehört es unter anderem

- vorhandene Grid-Technologien und Standards sowie Middleware-Systeme (GLOBUS, Unicore, gLite, GRIA uvm.) zu nutzen,

- auf den spezifischen Bedarf unserer Anwendungspartner zugeschnittene Erweiterungen zu entwickeln und
- den Nutzern Beratung und Training mit Grid-Software anzubieten.

SCAI ist in einer Vielzahl von Forschungs- und Entwicklungsprojekten zum Grid Computing engagiert, die das Bundesministerium für Bildung und Forschung und die Europäische Kommission fördern. Sie dienen einerseits der Entwicklung neuer Grid-Komponenten und Tools, andererseits dem Transfer von Grid-Technologien in die industrielle Praxis. In den folgenden Abschnitten werden einige dieser Projekte vorgestellt.

In der Fraunhofer-Gesellschaft bildet Grid Computing einen institutsübergreifenden Forschungsschwerpunkt. Im Projekt »Enterprise Grids« bündeln dabei die vier Fraunhofer-Institute für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI, für Arbeitswirtschaft und Organisation IAO, für Wirtschafts- und Technomathematik ITWM und für Rechnerarchitektur und Softwaretechnik FIRST ihre Grid-Kompetenzen mit dem Ziel, ein umfassendes Entwicklungs- und Beratungsangebot für Unternehmen bereit zu stellen und gemeinsam die Chancen und Möglichkeiten der Grid-Technologie zu demonstrieren (www.epg.fraunhofer.de).

Konzepte und Komponenten für das Grid Computing

Vorhandene Grid-Infrastrukturen und Werkzeuge, die meist aus reinen Forschungsumgebungen stammen, erfordern beim Transfer in eine industrielle Produktionslösung in vielfacher Hinsicht Anpassungen und Erweiterungen. Dies betrifft insbesondere Aspekte der Interoperabilität, der einfachen Bedienbarkeit und der sicheren Nutzung.

Die Arbeiten des Instituts beziehen sich dabei auf die Schwerpunkte:

- Management und Verwaltung dynamischer virtueller Organisationen
- Gewährleistung von Vertrauen und Sicherheit (Authentifizierungssysteme)
- Verbindliche Vereinbarung und Gewährleistung der Qualität von Diensten (Service Level Agreements)
- Nutzung kommerzieller Software in Grids und Lizenzmanagement

Die vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderte D-Grid-Initiative hat zum Ziel eine nationale Grid-Infrastruktur zu schaffen. Für diese Infrastruktur hat SCAI das Konzept für das Management Virtueller Organisationen entwickelt. Weitere aktuelle Beiträge beziehen sich auf die Interoperabilität der in D-Grid genutzten Middleware-Plattformen. In den Beiträgen des Instituts geht es dabei



speziell um Komponentenentwicklungen für UNICORE, welche die Interoperabilität zu Middleware-Plattformen wie GLOBUS und gLite sicherstellen.

Das vom BMBF geförderte Projekt VIOLA (Vertically Integrated Optical Testbed for Large Applications) konnte SCAI im Jahr 2007 erfolgreich abschließen. Darin entwickelte das Institut ein Grid-Scheduling-System, das Nutzeranforderungen im Grid verteilt, automatisch die Dienstgüte aushandelt und ein entsprechendes Service Level Agreement abschließt. Das System unterstützt außerdem die zeitlich koordinierte Nutzung mehrerer Ressourcen für eine Anwendung, wie etwa unterschiedliche PC-Cluster oder die Netzwerkverbindungen zwischen den Systemen. Dieser Grid-Scheduler dient zu weiteren Entwicklungen im europäischen Projekt PHOSPHORUS, in dem eine europaweite Grid-Infrastruktur mit optischen Netzen aufgebaut werden soll.

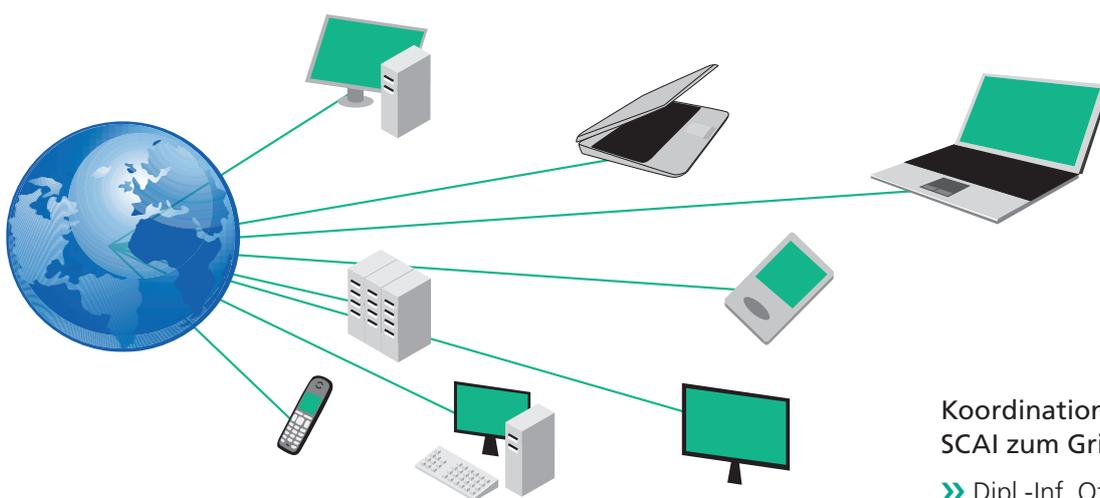
Unternehmen werden Grid-Infrastrukturen nur dann einsetzen, wenn

kommerzielle Software, zum Beispiel Simulationsprogramme aus Strömungs- und Strukturmechanik, im Grid genutzt werden können. Dazu bedarf es neuer Geschäfts- und Lizenzmodelle, die die Softwareanbieter akzeptieren und unterstützen und die eine Ausweitung des Geschäftes ermöglichen. Die Lizenzproblematik ist Gegenstand des von der Europäischen Kommission geförderten Projekts SmartLM. Um Aspekte des Lizenzmanagements im Grid geht es auch im von der Europäischen Kommission geförderten Projekt Business Experiments in Grid (BEinGRID). Fraunhofer SCAI ist an beiden Projekten wesentlich beteiligt und wird gemeinsam mit Softwarehäusern und IT-Dienstleistern prototypische Lösungen schaffen und evaluieren, die später in eine Produktentwicklung einfließen sollen.

Flaggschiff der Europäischen Grid-Projekte mit mehr als 70 Partnerinstitutionen ist das Integrationsprojekt Enabling Grids for E-science (EGEE), das vom Forschungszentrum CERN geleitet wird. Im Projekt ist eine europaweite Rechner-

und Datengrid entstanden, welches für Zwecke der Hochenergiephysik, aber ebenso für andere Wissenschaftsbereiche wie Geowissenschaften, Erdbeobachtung oder Bioinformatik genutzt wird. Das EGEE-Grid nutzt die spezielle Grid-Middleware gLite. SCAI betreibt in diesem Grid einen Knoten. Zu den Aufgaben des Instituts gehören Evaluierung und Test von Middleware-Komponenten sowie die Beratung und praktische Unterstützung von Nutzern, hier speziell aus den Geowissenschaften. EGEE hat die zweite Projektphase im April 2008 erfolgreich bestanden. Das Projekt geht damit in eine dritte Phase, an der sich SCAI verstärkt mit Anwendungen beteiligen wird.

Eine Weiterentwicklung des Grid Computing ist das Cloud Computing. Dabei beziehen Anwender eine Software und die dazu notwendige Hardware über Anbieter. Anwendungen und Daten befinden sich also in übertragenem Sinne in einer Wolke (Cloud), über eine Anzahl entfernter Systeme verteilt.



Koordination der Arbeiten des SCAI zum Grid Computing:

» Dipl.-Inf. Ottmar Krämer-Fuhrmann
Telefon 02241 14-2202
ottmar-kraemer-fuhrmann@
scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/grid

Grid Computing – Praxisprojekte

D-Grid-Initiative

Deutsche Wissenschaftler haben im Jahre 2003 einen strategischen Bericht veröffentlicht, der die aktuelle Situation und die möglichen Einflüsse des Grid Computing auf die Forschung in Deutschland untersuchte. Sie empfahlen in ihrem Bericht eine langfristige, strategische Forschungs- und Entwicklungsinitiative im Grid Computing. Daraufhin initiierte das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) im März 2004 die deutsche D-Grid-Initiative mit dem Ziel, in den nächsten fünf Jahre Projekte im Grid Computing, im e-Learning und in der Wissensvernetzung mit bis zu 100 Millionen Euro zu fördern.

Die D-Grid-Initiative vereinigt eine Vielzahl von Anwendungsprojekten. Sie dienen dazu, den Bedarf verschiedener wissenschaftlicher Bereiche aufzunehmen und exemplarisch auf eine hierfür neu geschaffene Grid-Infrastruktur umzusetzen. Die ersten D-Grid-Projekte starteten im September 2005 mit dem Entwickeln einer verteilten Ressourcenplattform für Hochleistungsrechnen, große Mengen von Daten und entsprechende Dienstleistungen. *Grid-Communities* testen diese globale Infrastruktur inzwischen mit ihren rechen- und datenintensiven Anwendungen aus der Hochenergiephysik, Astrophysik, alternative Energien, Medizin, Lebenswissenschaften, Erdwissenschaften (z.B. Klima), Ingenieurwissenschaften und wissenschaftliche Bibliotheken.

SCAI ist an mehreren Projekten der D-Grid-Initiative beteiligt. Der Schwerpunkt liegt dabei auf dem Computational Engineering. Im Folgenden werden die Projekte *InGrid*, *PartnerGrid* und *ProGRID* genauer vorgestellt.

» www.d-grid.de

InGrid

Im Projekt InGrid entstehen Grid-Lösungen für drei zentrale Themen rechenintensiver ingenieurwissenschaftlicher Anwendungen:

- gekoppelte Multiskalenprobleme
- gekoppelte multidisziplinäre Probleme
- verteilte Optimierung / Simulation

Dabei werden fünf Anwendungsgebiete exemplarisch behandelt: Gießereitechnik, Umformtechnik, Grundwasserströmung sowie Turbinensimulation unter spezieller Berücksichtigung von Fluid-Struktur-Interaktion.

Die Ziele des Projektes können wie folgt zusammengefasst werden:

- Unterstützung des virtuellen Prototypings mittels Internet-basierter kollaborativer Methoden, Abbildung typischer Workflows auf eine Grid-Umgebung, Einbindung fachspezifischer Datenquellen und Erstellung von Portalen für Einsatzszenarien.
- Entwicklung eines wissensbasierten Systems zur Optimierung von Arbeitsabläufen und Unterstützung von Entscheidungsprozessen.
- Entwicklung von Kooperations-, Geschäfts-, Sicherheits- und Vertrauensmodellen für ingenieurwissenschaftliche Anwendungen.

Das Projekt positioniert sich sowohl in der Grundlagenforschung als auch in der anwendungsnahen Forschung zur Etablierung einer Grid-basierten, vernetzten Softwareinfrastruktur für das ingenieurwissenschaftliche Arbeiten.

SCAI ist mit seiner Softwareentwicklung MpCCI beteiligt, die im Projekt als Grid-Service für multidisziplinäre Simulationen weiter entwickelt wird. InGrid ist im Sommer 2008 abgeschlossen.

» www.ingrid-info.de

PartnerGrid

Die Projekte PartnerGrid und ProGRID erweitern die Ziele von InGrid und rücken den Gedanken des kooperativen Arbeitens in verteilten Arbeitsgruppen und Unternehmen in den Vordergrund. Für die Umsetzung von Grid-Technologie in marktfähige Lösungen ist die Unterstützung kooperativer Arbeitsprozesse im Engineering ein Schlüsselaspekt.

Das Projekt PartnerGrid nutzt die von Fraunhofer SCAI und Deutschem Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) ursprünglich für den Schiffbau entwickelte RCE-Plattform (Reconfigurable Computing Environment), um kooperatives Arbeiten zu ermöglichen. RCE wird um Komponenten ergänzt, die es erlauben, in einfacher und flexibler Weise Ressourcen aus dem D-Grid zu nutzen. Ein spezieller Fokus liegt auf den Aspekten Sicherheit von Daten und Anwendungen sowie auf Geschäftsprozessen bis zur Rechnungslegung.

Die Projektarbeiten werden an zwei industriellen Szenarien orientiert und evaluiert:

1. Gießereitechnik – Kooperation von Auftraggeber, Gießerei und Ingenieurdienstleister
2. Metallverarbeitende Industrie – Planung und Simulation von Umformprozessen

Beteiligt sind außerdem Softwareunternehmen und Dienstleister sowie potenzielle Endnutzer als assoziierte Partner. Das Projekt legt besonderen Wert auf die Nutzung von Grid-Technologie durch kleine und mittelständische Unternehmen, die keine eigene komplexe IT-Infrastruktur aufbauen und dauerhaft betreiben können.

» www.partnergrid.de

ProGRID

ProGRID entwickelt eine Softwareinfrastruktur mit Grid-Services für die kooperative Produktentwicklung. Adressiert werden dabei vor allem folgende Aspekte:

- durchgängige und konsistente Verfügbarkeit von produkt- sowie prozessrelevanten Daten in allen Entwicklungsphasen: Design, Konstruktion, Simulation, Test und Produktion
- realitätsnahe Simulation und numerische Optimierung der Produkteigenschaften und der Produktanwendung unter Berücksichtigung von Zuverlässigkeit
- durchgängige Verkettung von Anwendungs- und Simulationskomponenten einschließlich Datentransfers zwischen einzelnen Anwendungsschritten
- fehlertolerante Ausführung komplexer verteilter Arbeitsabläufe

In ProGRID arbeitet das Fraunhofer SCAI mit dem Fraunhofer-Institut für Produktionsanlagen und Konstruktionstechnik IPK in Berlin und den Unternehmen science+computing AG (Tübingen), FE-Design GmbH (Karlsruhe), Wilhelm Karmann GmbH (Osnabrück), INTES GmbH (Stuttgart), PD Tec GmbH (Karlsruhe), sowie weiteren assoziierten Partnerfirmen zusammen. Die Beiträge des SCAI liegen in der Schnittstelle zum D-GRID sowie in der Entwicklung von Grid-Services zur verteilten Optimierung multikriterieller Simulationsanwendungen aus dem Automobilentwurf und zur Datenreduktion von Simulationsergebnissen.

Anhand von fünf Anwendungsszenarien sollen in Kürze die Vorteile der neuen Grid-Infrastruktur für die virtuelle Produktentwicklung gezeigt werden.

» www.progrid.de

BEinGRID

Im europäischen Integrationsprojekt Business Experiments in Grid (BEinGRID) erarbeiten die Projektpartner 18 Fallstudien für Grids in unterschiedlichen Branchen. Das Institut ist an zwei dieser Projekte beteiligt. Partner sind Unternehmen aus der Automobilzuliefer- und Schiffbauindustrie, Ingenieur- und IT-Dienstleister sowie Forschungseinrichtungen.

In einer der Fallstudien geht es darum, die Wettbewerbsfähigkeit kleiner und mittlerer Unternehmen bei der Metallumformung zu stärken. Umformsimulationen helfen, aufwändige reale Tests einzusparen. Doch moderne Simulationsprogramme zu lizenzieren, Hochleistungsrechner anzuschaffen und Fachleute einzustellen übersteigt die finanziellen Möglichkeiten vieler Mittelständler. Durch Grid-Technik können sie jedoch per Webbrowser auf Programme, Rechenleistung und Know-how zugreifen. Grid-Technik hilft somit, im Wettbewerb um die technologisch beste und günstigste Lösung zu bestehen.

Eine weitere Fallstudie widmet sich Grid-Techniken im Schiffbau. Die Werften produzieren Unikate und kleinste Serien von hoher Komplexität in kürzester Zeit und müssen zudem ihre Produkte technologisch stetig weiter entwickeln. Große Innovationsschritte sind aber mit finanziellen Risiken für die Werften und ihre Zulieferer verbunden. Doch der Verdrängungswettbewerb verbietet einen Ausgleich solcher Wagnisse durch höhere Preise. Grid-Technik ermöglicht Werften und Zulieferern den Zugriff auf Simulationsprogramme und Rechenleistung. Zudem unterstützt das Grid die Zusammenarbeit aller am Entwurf des virtuellen Schiffs Beteiligten.

» www.beingrid.eu

CoreGRID – Network of Excellence

CoreGRID ist ein von der EU co-finanziertes Projekt mit 42 Partnern aus 18 Ländern. Das Ziel des Network of Excellence (NoE) ist die wissenschaftliche und technologische Exzellenz in den Grid- und Peer-to-Peer-Technologien in Europa zu erhalten und auszubauen. CoreGRID hat eine Laufzeit von 48 Monaten. Das NoE arbeitet wie ein europäisches Forschungslabor mit sechs Instituten:

- Wissens- und Datenmanagement
- Programmiermodell
- Architekturbelange: Skalierbarkeit, Zuverlässigkeit, Anpassungsfähigkeit
- Grid-Informationsdienste, Ressource- und Workflow-Monitoringdienste
- Resource-Management und -Scheduling
- Problemlösungsumgebungen, Werkzeuge and Grid-Systeme

CoreGRID ist die zentrale europäische Instanz für Grid- und Peer-to-Peer-Forschung. Die Kooperation bietet:

- gemeinsame Projekte von Forschungsgruppen in den Instituten
- gemeinsame Nutzung von Testbeds
- Zugang zu einer gemeinsamen Kommunikationsinfrastruktur
- Förderprogramme zur Mobilität von Forschern und Doktoranden.

CoreGRID widmet sich auch der Service Oriented Architecture (SOA) sowie den Service Oriented Infrastructures (SOI).

Das Fraunhofer SCAI ist:

- Leiter des Task 6.8 Service Level Agreements im Institut für »Resource Management und Scheduling«
- Leiter der Aktivitäten im Testbed
- Gesamtleiter des Arbeitsbereichs für Zusammenarbeit von Projekten
- Mitglied im Leitungsausschuss

» www.coregrid.eu

SIMDAT

Data Mining und Grid Computing für industrielle Anwendungen

Grid-Technologien für Schlüsselindustrien

Im Projekt SIMDAT (Data Grids for Process and Product Development) werden grundlegende Techniken für das Grid Computing entwickelt. Sie zielen darauf, komplexe Aufgaben in unterschiedlichen Branchen zu lösen. Dabei kommen Technologien aus sieben Forschungsgebieten zum Einsatz: Integrierte Grid-Infrastrukturen, verteilter Datenzugriff, Management virtueller Organisationen, Workflow, Ontologien, Dienste-Integration und Knowledge Discovery.

Die Anwendungsfelder der in SIMDAT entwickelten und eingesetzten Software sind:

- die Verbesserung der Sicherheit von Automobilen
- die Optimierung des Fahrkomforts (Reduzierung von Vibrationen und Geräuschen im Fahrzeuginnenraum)
- der Entwurf eines geräuscharmen Flugzeug-Landeklappensystems mit hohem Auftrieb
- die schnellere und zielgerichtete Entdeckung innovativer pharmazeutischer Wirkstoffe
- die Verbesserung von Klima- und Wetteranalysen und -prognosen

In der ersten Projektphase wurden Grid-Infrastrukturen aufgebaut und mittels Grid-Technologien Zugang zu verteilten Datenquellen geschaffen. In den folgenden Phasen des Projekts – Interoperabilität und Knowledge Discovery – wurden der Stand der Technik analysiert und Konzepte entwickelt, die Ausgangspunkt für die Definition verschiedener Prototypen waren, die zurzeit implementiert werden. Gegenstand der abschließenden Phase ist es, verschiedene Demonstratoren für reale Anwendungen in unterschiedlichen Bereichen der Industrie zu entwickeln, die anschließend von den industriellen Partnern evaluiert werden.

Erfolgreiche Präsentation der SIMDAT-Ergebnisse

Im November 2007 präsentierte SIMDAT seine Beiträge auf einem gemeinsamen Workshop mit Audi in Ingolstadt. Thema war die Transformation des Paradigmas der lokalen Nutzung von Daten und Rechenleistung hin zu einer Virtualisierung und Verteilung von Ressourcen: »Bridging between Engineering and Information Technology. Open Workshop on Data Integration and Collaborative Product Design«. An der Veranstaltung nahmen 75 Vertreter europäischer Automobil- und Flugzeughersteller sowie Softwareentwickler teil, darunter BAE Systems, Airbus Germany, Airbus UK, Airbus France sowie Magna Steyr, AUDI AG, VW, Ford, Opel, Renault, Daimler, BMW und Seat.

Audi hatte verschiedene Softwareentwickler sowie Ingenieurbüros gebeten, zum Workshop eine Lösung für ein komplexes Ingenieur-Design-Szenario zu entwickeln und vorzustellen, einschließlich CAD (Computer Aided Design) und CAE (Computer Aided Engineering). Die zu lösende technische Aufgabe umfasste unter anderem:

- Management und Prozesskoordination zwischen verteilten Teams
- Datenintegration zwischen Produktdatenmanagement (PDM) und Simulationsdatenmanagement (SDM)
- die Einbeziehung von Zulieferern
- den sicheren Internet-Datenaustausch

IT Innovation, das Forschungsinstitut der University of Southampton, und Fraunhofer SCAI demonstrieren, wie die Entwicklungen im Projekt SIMDAT kollaboratives Produktdesign unterstützen.

Die SIMDAT-Partner IT Innovation, Fraunhofer SCAI, MSC.Software und Ontoprise stellten mit ihrem gemeinsam entwickelten Meshing

(Netzgenerierungs)-Prototypen eine serviceorientierte Infrastruktur vor. Die Lösungen zum Produktdatenmanagement von MSC.Software und Ontoprise wurden mittels GRIA (Grid Resources for Industrial Applications)-Sicherheits- und Management-Services integriert, die den Austausch zwischen PDM und SDM sowie die Simulationsprozesse realisieren.

Die Infrastruktur zur Integration der Datenmodelle und Produktkonfigurationen nutzt außerdem semantische Technologien: Für die semantische Wiedergabe der CAD- und CAE-Daten wurde die Software OntoBroker von Ontoprise eingesetzt. Der Datentransfer erfolgte durch GRIA und OGSA-DAI (Open Grid Services Architecture Data Access and Integration), die von Fraunhofer SCAI zur Integration der verschiedenen Daten-Management-Systeme verwendet wurden. Der Service verwendet Webservice- und Grid-Standards, um die Anforderungen für Interoperabilität zur Integration verschiedener Bereiche zu unterstützen. Mittels Standardmethoden für den Datentransfer konnten die Zulieferer ihre Daten direkt an das Datenmanagementsystem der Firma MSC übertragen.

Der wesentliche Aspekt dieses SIMDAT-Prototypen besteht in der Auslagerung von Aufgaben zur Erzeugung von FE (Finite Elemente)-Netzen. Die Vorteile des Outsourcings spezieller Aufgaben sind Innovationspotenzial, Kosteneffizienz und höhere Flexibilität – gerade Automobilhersteller blicken zunehmend in Richtung Internet und Webservices, wenn sie ihre kollaborativen Produktdesign-Prozesse auslagern.

Auf dem Workshop bei Audi gelang eine erfolgreiche Live-Demonstration der in SIMDAT entwickelten Infrastruktur. Die Vorführung zeigte, wie sich die Integration von Zulieferdaten beschleunigen lässt, indem man den Business-

to-Business-Prozess mit automatisierten Service-Level-Agreements und dynamischen Authentifizierungs- und Verschlüsselungsmechanismen verbindet.

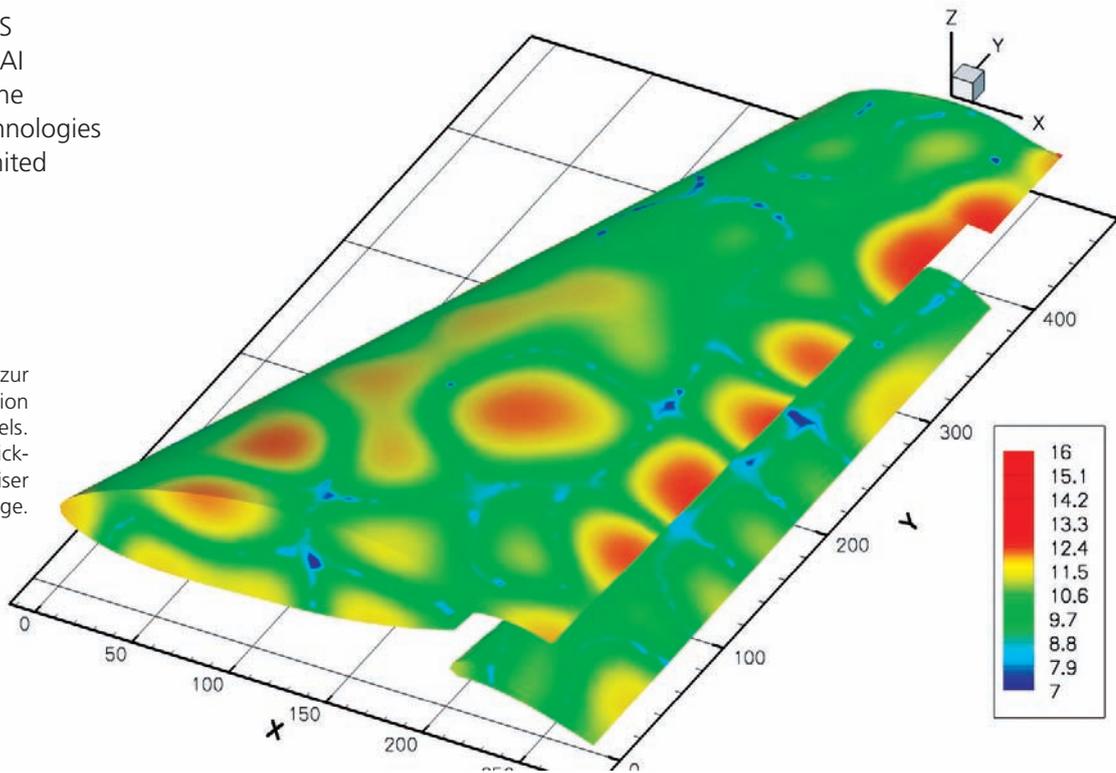
Partner:

- AUDI AG
- BAE Systems Limited
- DWD
- EADS
- EMBL
- ESI Group
- EUMETSAT
- ECMWF
- Fraunhofer IAIS
- Fraunhofer SCAI
- GlaxoSmithKline
- IDESTYLE Technologies
- InforSense Limited
- Inpharmatica

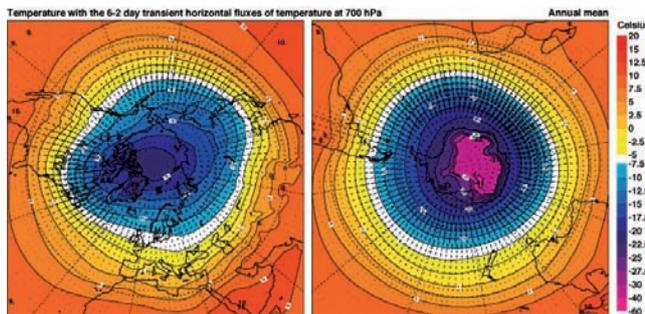
- Intel GmbH
- IT Innovation
- LMS International N.V./Noesis Solutions (third party)
- Météo France
- MSC Software GmbH
- NEC Europe Ltd.
- Ontoprise GmbH
- Oracle Deutschland GmbH
- Regienov (Renault)
- UK Met Office
- Universität Karlsruhe
- Université Libre de Bruxelles
- University of Southampton

Das Fraunhofer-Institut SCAI koordiniert das von der Europäischen Kommission im Programm »Information Society Technologies« mit elf Millionen Euro geförderte Projekt SIMDAT. Die Projektlaufzeit ist September 2004 bis Oktober 2008.

Grid Computing zur Akustik-Simulation eines Flugzeugflügels. Ziel ist die Entwicklung möglichst leiser Flugzeuge.



Neue Möglichkeiten für Meteorologen: Die im Projekt SIMDAT entwickelte Software VGISC integriert meteorologische Informationen verschiedener Wetterdienste über Ländergrenzen hinweg in einem System.



Ansprechpartner

» Dipl.-Math. Clemens-August Thole
 Telefon 02241 14-2739
 clemens-august.thole@scai.fraunhofer.de

» www.simdat.eu

Grid Computing als Basis für die personalisierte Medizin

Die moderne Medizin wird gegenwärtig durch zwei Entwicklungen in ihrem Kern verändert:

- Ergebnisse der Forschung in der Molekularen Biologie und der Genomforschung wirken sich direkt aus auf die Diagnostik und auch die therapeutischen Ansätze.
- Der Einsatz von Informationstechnologien eröffnet ganz neue Möglichkeiten, aus den vorhandenen, umfangreichen Datenbeständen der Medizin zu lernen (mittels Data Mining) und biomechanische Vorgänge im Computer zu berechnen (Simulation).

Eines der in diesem Kontext verfolgten Hauptziele ist ein auf den einzelnen Patienten ausgerichtetes Management seiner Erkrankung im Sinne einer personalisierten Medizin. Die Herausforderungen, die sich in diesem Zusammenhang auf Seiten der Informationstechnologie stellen, sind signifikant: Wie in kaum einer anderen Disziplin liegen die für eine personalisierte Medizin relevanten Daten geographisch verteilt vor, sind heterogen in ihrer Struktur und dürfen in der Regel aufgrund des Datenschutzes nur unter hohen Sicherheitsauflagen gehandhabt werden.

Individualisierte Abschätzung des Rupturrisikos von Intracranialen Aneurysmen

Intracraniale Aneurysmen (IA) sind Aussackungen von Arterien im Gehirn. Eine recht große Zahl von Menschen, etwa ein bis vier Prozent der Mitteleuropäer, hat diese Art von ballonförmigen Aussackungen im Gehirn und ist damit vollkommen symptomfrei. Die Prävalenz dieser Veränderung von Blutgefäßen im Gehirn ist also vergleichsweise hoch. In seltenen Fällen (bei circa 0,3 Prozent der Patienten mit IA) jedoch kommt es zur Ruptur, also zum Platzen des IA. Die Inzidenz dieser

Erkrankung ist also sehr niedrig; jedoch kann dieses Ereignis dramatische Folgen haben:

- Fast ein Drittel der Patienten mit einem geplatzten IA sterben an der Hirnblutung, die auf die Ruptur folgt.
- Ein weiteres Drittel kann durch Operationen zwar gerettet werden, trägt aber bleibende Schäden davon.
- Das verbleibende Drittel überlebt eine Ruptur mit anschließender Operation ohne erkennbare Folgen.

Wir befinden uns beim IA also in einem Dilemma: einer hohen Prävalenz und niedrigen Inzidenz der Ruptur stehen den fatalen Folgen eines Ruptur entgegen. Das Risiko eines Patienten mit asymptomatischem IA ist demnach »irgendwie« hoch; nur weiß man nicht, bei welchem konkreten Patienten das Risiko eine präventive Behandlung nahelegt und bei wem man nicht präventiv eingreifen muss.

Präventive Behandlung von Intracranialen Aneurysmen

Wird – zum Beispiel im Zuge einer tomographischen Untersuchung von Patienten nach einem Autounfall – das Vorhandensein eines IA festgestellt, so bestehen für den behandelnden Kliniker drei Behandlungsoptionen:

1. Abklemmen des IA im Zuge eines neurochirurgischen Eingriffs (»clipping«)
2. Verödung des IA durch einen Gefäßkatheder (»coiling«)
3. Nichts tun, das IA nicht behandeln

Bislang werden Entscheidungen über die Behandlung aufgrund von zwei oder drei Faktoren getroffen: Lage und Größe des IA sowie Alter und Geschlecht des Patienten sind relevante Faktoren, die die Entscheidung des Arztes beeinflussen. Ob diese Kriterien vollständig das individuelle Risiko beschreiben, ist nicht bekannt.

Generierung und Validierung von Krankheitsmodellen

Für die individualisierte Abschätzung des Risikos einer Ruptur müssen die hierfür relevanten Risikofaktoren gefunden werden. Welche Faktoren also sind es, die für diesen Zweck berücksichtigt werden müssen?

In der Medizin werden derartige Fragen im Zuge klinischer Studien beantwortet, die unter großem Aufwand die relevanten Daten zu einer Krankheit erfassen, strukturieren und auswerten. Im Prinzip liegen diese Daten auch im klinischen Alltag vor, nur sind sie dort nicht strukturiert und systematisch erfasst.

Grid Computing für die personalisierte Medizin

Ziel des von der Europäischen Kommission geförderten Projekts @neurIST ist es, mit Hilfe einer Grid-Infrastruktur das individuelle Rupturrisiko für IA-Patienten direkt im klinischen Alltag zu bestimmen. Hierfür werden im Grid alle relevanten Daten integriert und das Wissen aus der wissenschaftlichen Literatur sowie den intern verfügbaren, klinischen Daten zusammengeführt. Es folgen rechenintensive Simulationen auf dem Grid. Dabei nutzen die Forscher im Projekt @neurIST die Grid-Infrastruktur, um anonymisierte Patientendaten auszutauschen und anhand der Bilder von Gehirngefäßen den Blutfluss und das Rupturrisiko eines IA zu berechnen. Mitarbeiter des SCAI arbeiten daran, die wissenschaftliche Literatur zu diesem Krankheitsbild automatisch zu analysieren. Sie haben speziell die an der Entstehung von IA beteiligten Gene und ihre Allel-Varianten im Visier. Moderne Verfahren des maschinellen Lernens werden mit regelbasierten Ansätzen und schnellen Suchalgorithmen kombiniert, um die Vielfalt biomedizinischer Begriffe

in wissenschaftlichen Publikationen zu identifizieren. Das von SCAI entwickelte System erlaubt jetzt schon, mit hoher Zuverlässigkeit alle im Krankheitskontext relevanten Faktoren wie Gene und Proteine, Genvarianten sowie Medikamente zu identifizieren und reicht im Hinblick auf die Qualität der Informationsextraktion an humanes Expertenwissen heran.

Andere Partner im @neurIST-Konsortium arbeiten daran, die bekannten Risikofaktoren in medizinische Behandlungsrichtlinien («clinical guidelines») umzusetzen, die von einem compu-

tergestützten Expertensystem genutzt werden können.

@neurIST wird am Ende der vierjährigen Projektlaufzeit ein Grid-basiertes System liefern, welches klinische Daten sinnvoll integriert und aggregiert, den Stand der Wissenschaft in der wissenschaftlichen Literatur automatisch analysiert sowie medizinische Evidenzen und Fakten automatisch in ein klinisches Expertensystem einbringt, welches die Abschätzung des individuellen Risikos für IA-Patienten in der Klinik wie auch beim niedergelassenen Arzt unterstützt.

Automatische Identifizierung von Genvarianten, die in der wissenschaftlichen Literatur mit Intracranialen Aneurysmen assoziiert wurden. Aufgrund des fulminanten Zuwachses an wissenschaftlichen Publikationen (ca. 3000 Publikationen pro Tag) ist es Biologen und Medizinern nicht mehr möglich, dem Stand der Wissenschaft ohne Unterstützung durch Computer in der ganzen Breite zu folgen. Technologie von Fraunhofer SCAI hilft, die Flut an wissenschaftlichen Publikationen zu beherrschen.

The screenshot shows the @neuLink interface with the following data table:

Select	Entity	Relative Entropy	Reference Doc Count	Doc Count	Date Reported	Links
<input type="checkbox"/>	ELN	0.3141	6314	21	2008-03-	
<input type="checkbox"/>	PKD1	0.2743	727	13	2007-10-	
<input type="checkbox"/>	NOS3	0.1828	7084	14	2008-04-	
<input type="checkbox"/>	COL3A1	0.1289	302	6	2003-09-	
<input type="checkbox"/>	MMP9	0.1146	7839	10	2008-04-	
<input type="checkbox"/>	SERPINA1	0.1121	8399	10	2004-12-	
<input type="checkbox"/>	APOE	0.0904	10386	9	2006-05-	
<input type="checkbox"/>	MMP2	0.0717	7656	7	2008-	
<input type="checkbox"/>	COL1A2	0.0714	1807	5		
<input type="checkbox"/>	ACE	0.0682	14036	8		
<input type="checkbox"/>	TIMP2	0.0659	2442	5		

A magnifying glass highlights a zoomed-in view of the table with the following data:

Select	Entity	Re
<input checked="" type="checkbox"/>	ELN	
<input type="checkbox"/>	PKD1	
<input checked="" type="checkbox"/>	NOS3	

Ansprechpartner

» Dr.-Ing. Christoph M. Friedrich
 Telefon 02241 14-2502
 friedrich@scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/bio

RCE

Reconfigurable Computing Environment

Im Schiff- und im Automobilbau arbeiten örtlich verteilte Entwicklungsabteilungen gemeinsam am Entwurf technischer Systeme. Dazu benötigen sie informationstechnische Unterstützung zur Lösung wiederkehrender Probleme wie:

- Authentifizierung der Nutzer
- sicheren und effizienten Zugriff auf verteilte Daten
- Auffinden von Services und die Zusammenstellung von Workflows
- Interoperabilität mehrerer Betriebssysteme
- automatische Softwareaktualisierung

Eine solche modulare Softwarelösung bietet das Reconfigurable Computing Environment (RCE). Die serviceorientierte Integrationsplattform unterstützt gemeinsame Entwurfsprozesse.

Alleine durch Konfiguration der einzelnen Komponenten können komplette verteilte Systeme aufgebaut werden. Durch eine offene Softwarearchitektur ist sichergestellt, dass beliebige Anwendungen in das RCE integriert werden können. Mit SESIS^{1,2} liegen erste Anwendungen im Schiffbau vor, aus dem das RCE entstanden ist. Der Einsatz im Automobilbau ist in der Entwicklung.

Die Software ist eine gemeinsame Entwicklung des Fraunhofer-Instituts SCAI und des Instituts für Simulations- und Softwaretechnik im Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Köln-Porz.

Die Architektur des RCE

Die Software RCE ist in Java³ geschrieben und läuft daher auf vielen Betriebssystemen: vom Windows-Laptop über den Unix-Arbeitsplatz bis zum Linux-Cluster.

Die Architektur von RCE basiert auf einer konsequenten Umsetzung des modularen Konzeptes von Eclipse⁴. Eine minimale Laufzeitumgebung (OSGi⁵) erlaubt es, dynamisch und kontrolliert Service-Anwendungen zur Laufzeit zu starten, zu aktualisieren und auch wieder entfernen zu können. Dabei werden Abhängigkeiten zwischen den Plug-ins automatisch aufgelöst.

Alle Funktionen des Werkzeugkastens RCE sind demnach als einzelne Komponenten realisiert. Durch einen offenen Erweiterungsmechanismus können zusätzliche Komponenten hinzu geladen werden, etwa individuelle Anwendungen, graphische Benutzerschnittstellen oder Eclipse-Plug-ins. Hierdurch ist es möglich, ein auf die Bedürfnisse des Nutzers zugeschnittenes individuelles System flexibel aufzubauen.

Grundlegende Systemfunktionen

RCE bietet grundlegende Funktionen, die eine verteilte Softwareumgebung benötigt, um Daten sicher auszutauschen und Anwendungen auf entfernten Rechnern ausführen zu können:

- Ein Datenmanagement, welches den Zugriff auf Dateisysteme und Datenbanken ermöglicht. Eine integrierte Versionsverwaltung sorgt für eine kontrollierte Weiterentwicklung der Datenbestände.
- Ein Kommunikationssystem, welches den Datenaustausch zwischen verschiedenen RCE-Instanzen ermöglicht. Je nach Entfernung zwischen den Kommunikationspartnern und deren

Sicherheitsanforderungen werden verschiedene Kommunikationsprotokolle (wie RMI oder SOAP) eingesetzt.

- Eine integrierte Rechteverwaltung kontrolliert den Zugriff auf alle Systemressourcen, was eine missbräuchliche Verwendung verhindert. Die Zugriffsrechte müssen vom Besitzer einer Ressource vergeben werden, damit dieser jederzeit die Kontrolle über die Verwendung seiner Daten und Programme behält.
- Ein Service Broker ermöglicht das Auffinden von Anwendungen im RCE-Netzwerk. Somit können sie auf entfernten Rechnern gestartet werden, ohne dass die mit den entsprechenden Rechten ausgestatteten Nutzer sich darum kümmern müssen, auf welchen Rechnern die Daten oder die Software liegen. Über eine Grid-Schnittstelle lassen sich zum Beispiel auch rechenintensive Berechnungen und Simulationen auf Hochleistungsrechner kommerzieller Service Provider auslagern.
- Ein Update-Mechanismus sorgt dafür, dass sich ein laufendes RCE-System bei der Freigabe neuer Software-Versionen leicht auf den aktuellen Stand bringen lässt.

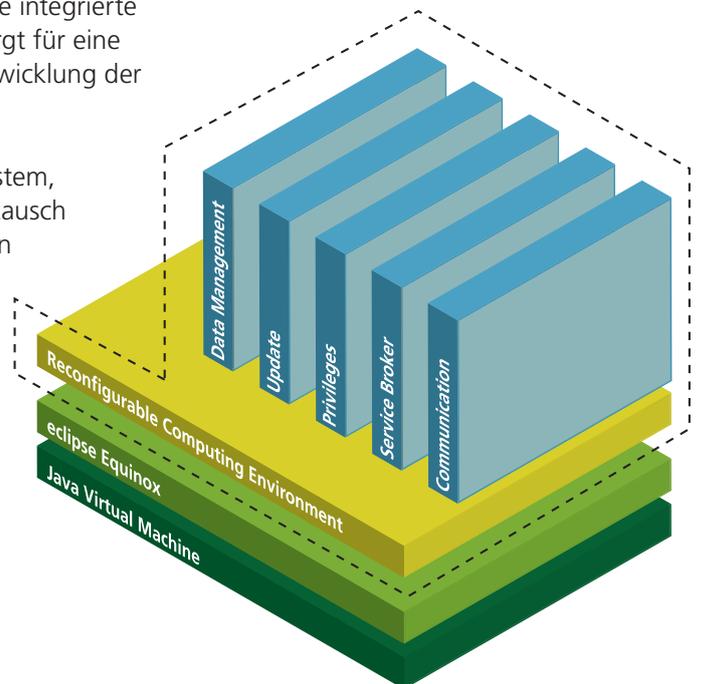
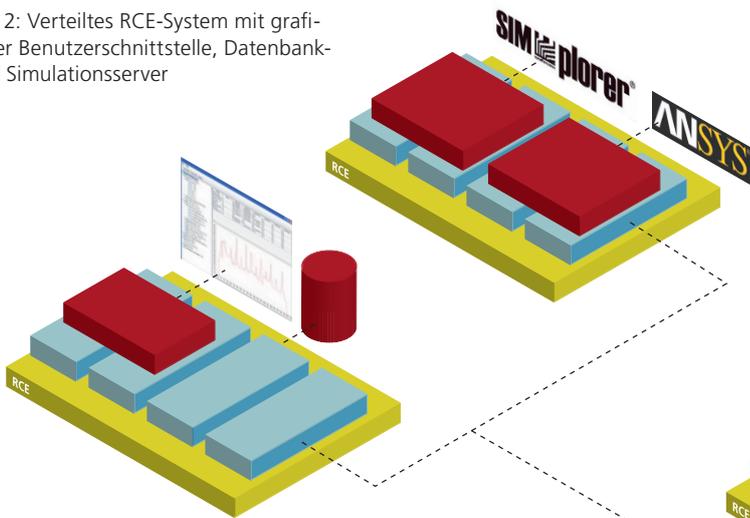


Bild 1: Das grundlegende System des RCE

Bild 2: Verteiltes RCE-System mit grafischer Benutzerschnittstelle, Datenbank- und Simulationsserver



Erweiterbarkeit

RCE kann durch Plug-ins beliebig erweitert werden. Insbesondere können bestehende Anwendungen mit Wrapper-Technologien in das System integriert werden. Auch lassen sich Programme, die in anderen Programmiersprachen (wie C, C++ oder Fortran) entwickelt wurden, über eine Schnittstelle integrieren, sodass Investitionen in bereits vorhandene Softwaresysteme erhalten werden.

Nutzen

Die grundlegenden Funktionen des RCE decken viele Anforderungen ab, die allen Softwaresystemen gemeinsam sind, die über mehrere Rechner verteilt werden sollen. Das RCE ermöglicht eine einfache Integration vielfältiger Funktionen, wie den Zugriff auf Datenbanken und Simulationsprogramme über graphische Benutzerschnittstellen am Arbeitsplatz eines Ingenieurs. Der Entwickler eines auf RCE basierenden verteilten Systems muss sich weder um die Verteilung noch um die Kommunikation oder die Durchsetzung der Zugriffsrechte kümmern.

Das RCE ist über Firmengrenzen hinweg einsetzbar, um die Zusammenarbeit zwischen Entwicklerteams zu ermöglichen.

In solchen Szenarien müssen lediglich die Recherverwaltung und das Kommunikationssystem entsprechend konfiguriert werden. So ist auf einfache Weise durchsetzbar, dass Partnerunternehmen ein (wahlweise lesender oder ändernder) Zugriff auf Datengruppen ermöglicht wird und dass Daten zwischen den Firmen verschlüsselt übertragen werden.

Einsatzbereiche

Die Software RCE entsteht im Projekt SESIS, das vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie gefördert wird. Darin entwickeln Partner aus Schiffbauindustrie und Informationstechnik gemeinsam ein integriertes schiffbauliches Entwurfs- und Simulationssystem. SESIS führt wichtige informationstechnische Innovationen in den schiffbaulichen Entwurfsprozess ein, um die Zusammenarbeit zwischen Entwicklerteams der Werft und Zulieferern über eine sichere Netzinfrastruktur zu ermöglichen. Die offene Systemarchitektur ermöglicht die Integration vorhandener Softwarelösungen in die Architektur des RCE, sodass bereits genutzte Entwurfssysteme weiter verwendet werden können.

Weitere Informationen zum Einsatz des Systems im schiffbaulichen Entwurfsprozess gibt die Homepage des Projekts SESIS¹.

Das RCE wird ferner im vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Projekt »PartnerGrid«⁶ eingesetzt, in dem eine

Softwareplattform für die Metall verarbeitende Industrie entwickelt wird. Diese Plattform ermöglicht die unternehmensübergreifende Zusammenarbeit von Auftraggebern,

Zulieferern und Dienstleistern

in einer virtuellen Organisation. PartnerGrid setzt Grid-Technologien ein und schließt die Lücke zwischen den im D-Grid⁷ verfügbaren generischen Middleware-Schichten und den Anforderungen der kooperierenden Unternehmen

Referenzen

- 1 SESIS – Schiffentwurfs- und Simulationssystem, www.sesis.de
- 2 Schiffbauliche Funktionalität in SESIS, CMT Hamburg, 01/2008
- 3 Java, java.sun.com
- 4 eclipse, www.eclipse.org
- 5 OSGi – Open Services Gateway Initiative, www.osgi.org
- 6 PartnerGrid, Kooperative Grid-Lösungen für industrielle Anwendungen, www.partner-grid.de
- 7 D-Grid – die Deutsche Grid-Initiative, www.d-grid.de

Ansprechpartner

» Dipl.-Inf. Ottmar Krämer-Fuhrmann
 Telefon 02241 14-2202
ottmar-krämer-fuhrmann@scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/rce

Vorlaufforschung

Projekte der Vorlaufforschung am Fraunhofer SCAI

Das Fraunhofer-Institut SCAI engagiert sich in zahlreichen Projekten der Vorlaufforschung, um Problemlösungen vorzubereiten, die in fünf oder zehn Jahren für Wirtschaft und Gesellschaft aktuell werden. Gegenstand der Projektarbeiten sind explorative Forschung und Entwicklung im Vorfeld von Produktentwicklung und Vermarktung. In enger Zusammenarbeit mit den Partnern aus Wirtschaft und Wissenschaft entstehen Prototypen, die nach Anforderungen von Industrie- und Anwendungspartnern realisiert und von diesen getestet werden.

Mit Instituten der Fraunhofer-Gesellschaft kooperiert SCAI in Förderprogrammen des Fraunhofer-Vorstands: Marktorientierte, strategische Vorlaufforschung (MAVO) und Wirtschaftsorientierte, strategische Allianzen (WISA). Diese Projekte dienen der gemeinsamen Vorlaufforschung der Fraunhofer-Institute und der Entwicklung gemeinsamer Forschungs- und Entwicklungsangebote für die Wirtschaft.

Mit Instituten der Max Planck-Gesellschaft (MPG) bestehen zudem strate-

gische Kooperationsprojekte, die der Vernetzung grundlagenorientierter Forschung und industrieller Anwendungsforschung dienen. Im Zuge solcher Projekte baut SCAI bestehende Arbeitsgruppen thematisch aus und legt die Grundlage für neue industrierelevante Anwendungsfelder und Arbeitsgruppen – zum Beispiel die Arbeitsgruppe Computational Chemical Engineering.

Auf den folgenden Seiten finden Sie eine Auswahl aktueller Projekte.

F Kooperations
Problemlösungen
explorativ

Learning and Inference Platform (LIP)

Plattform für maschinelles Lernen

Das maschinelle Lernen ist eine Schlüsseltechnologie in der Entwicklung intelligenter Systeme. Eine bedeutende Rolle spielt dabei die Fähigkeit, Prozesse und Anwendungen datengetrieben zu automatisieren und zu optimieren. Dies gilt insbesondere vor dem Hintergrund immer komplexer werdender und oftmals nur schwer modellierbarer Zusammenhänge. Bereits heute verspricht die Intelligenz von Software, Produkten und Prozessen einen erheblichen Wettbewerbsvorteil.

Zu diesem gemeinsamen Projekt von Fraunhofer- und Max-Planck-Gesellschaft haben sich vier Fraunhofer- und vier Max-Planck-Institute zusammengeschlossen um die Zusammenarbeit der beiden Forschungsgesellschaften zu vertiefen.

Die folgenden Institute sind beteiligt:

- Fraunhofer FIRST, Berlin
- Fraunhofer SCAI, Sankt Augustin
- Fraunhofer IAIS, Sankt Augustin
- Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern
- Friedrich Miescher Laboratory of the Max Planck Society, Tübingen
- Max Planck Institute for Biological Cybernetics, Tübingen
- Max Planck Institute for Informatics, Saarbrücken
- Max Planck Institute for Molecular Genetics, Berlin

Die Themen sind weit gestreut und umfassen zum Beispiel:

- Mustererkennung und Computersehen
- Informations- und Wissensmanagement
- Data Mining und Business Analytics

- Electronic Commerce und Marktanalyse
- Mensch-Maschine-Schnittstellen inklusive Brain-Computer Interfaces
- Biomedical Engineering und Bioinformatik
- Medizinische Datenanalyse
- Datenvisualisierung und Computergraphik
- Prognose von Material und Produkteigenschaften
- Nichtlineare Systemidentifikation
- Neuronale Regelung

Ansprechpartner

» Dr. Christoph M. Friedrich
Telefon 02241 14-2502
friedrich@scai.fraunhofer.de

» lip.fml.tuebingen.mpg.de

ationsprojekte
mlösungen
rative Forschung

HLIBpro

Effiziente Lösung hierarchischer Matrizen

Moderne Simulationssoftware benötigt hocheffiziente numerische Strategien, um genaue Lösungen in ökonomisch vertretbarer Zeit zu liefern. Die Theorie hierarchischer Matrizen ermöglicht die Lösung vieler industrieller Anwendungsprobleme mit fast optimalem Aufwand.

Die Softwarebibliothek HLIBpro beruht auf der Technik der hierarchischen Matrizen (H-Matrizen). In vielen Fällen vermag sie, große, aus industriellen Anwendungen stammende lineare Gleichungssysteme mit fast optimaler Leistung zu lösen. Sie ist besonders zur Lösung linearer Gleichungssysteme geeignet, die durch Diskretisierung von Integral- und elliptischen Differentialgleichungen entstehen (Innen- und Außenraumprobleme). Bisher hat man diese Technik bereits in vielen Anwendungen erfolgreich getestet:

- Simulation von Mikrostrukturen und elektrischen Schaltkreisen in der Automobilindustrie
- Populationsdynamik, bei Partikel-Methoden für inkompressible Strömungen, in der Medizin (kognitive Neurowissenschaft)
- die Untersuchung von Induktionsprozessen (Induktionsheizung)

Hauptzielgruppe von HLIBpro sind Softwarefirmen, die numerische Simulationspakete entwickeln. Obwohl HLIBpro erst im Jahre 2007 in einer ersten grundlegenden Version auf den Markt kam, hat das Fraunhofer SCAI bereits für mehrere Anwendungsbereiche Lizenzen vergeben. So ist HLIBpro bereits Bestandteil einer kommerziellen Simulationssoftware für elektromagnetische Anwendungen. Hier lässt sich die Softwarebibliothek vor allem bei Berechnungen im niedrigen und mittleren Frequenzbereich sehr effizient einsetzen. Typische Anwendungen sind

etwa elektromagnetische Eigenschaften von Antennen (siehe Bild 1 und 2), Kondensatoren und Sensoren.

Ein weiterer Bereich, in dem HLIBpro bereits eingesetzt wird, ist die Simulation elektromagnetischer Schaltkreise. Hier sind die durch Diskretisierung entstehenden (vollbesetzten) Systemmatrizen oft so riesig, dass sie selbst in den größten heute verfügbaren Arbeitsspeichern von Computern keinen Platz finden. Mit HLIBpro können selbst solche Probleme mit (fast) linearer Effizienz gelöst werden.

Systemgröße (Zahl der Unbekannten)	Regulärer Speicherbedarf (MB)	Reduzierter Speicherbedarf der HLIBpro	CPU Zeit (sec)
2000	122	1,15 (0,94%)	0,9
4000	488	2,30 (0,47%)	2,0
8000	1953	4,60 (0,24%)	4,2
16 000	7812	9,20 (1,12%)	9,3
32 000	31 250	18,40 (1,06%)	18,9
64 000	125 000	36,81 (0,03%)	40,4

Tabelle 1: HLIBpro: Rechenzeit und Speicherbedarf zur Lösung eines Stokes-Problems mit der Randlelementmethode

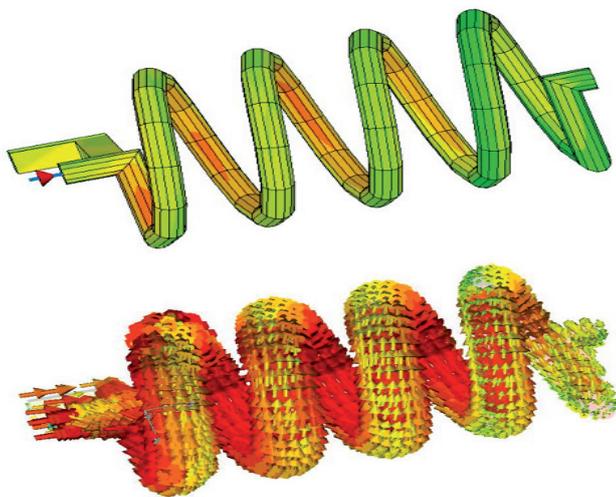


Bild 1: Oberflächenstrom und Feldbild einer Helix-Antenne

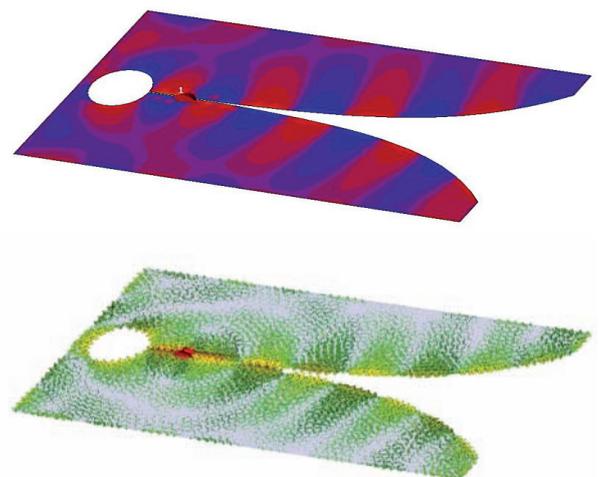


Bild 2: Oberflächenstrom und Feldbild einer Vivaldi-Antenne

Hierarchische Matrizen (H-Matrizen)

Das Fraunhofer-Institut SCAI hat HLIBpro gemeinsam mit dem Max-Planck-Institut für Mathematik in Leipzig entwickelt. HLIBpro beruht auf der Theorie der hierarchischen Matrizen (H-Matrizen), die von Wolfgang Hackbusch im Jahr 1999 erstmalig vorgestellt wurde. Diese Theorie hat die Basis für eine Technik geschaffen, um sogar vollbesetzte Matrizen durch ein bestimmtes speicherreduziertes Format darzustellen (der sogenannten »low-rank approximation«). Viele Typen schwach und

vollbesetzter Matrizen, die bei der Diskretisierung von Integralgleichungen und elliptischen Randwertproblemen entstehen, lassen sich sehr gut durch H-Matrizen approximieren. Tabelle 1 demonstriert die Leistungsfähigkeit von HLIBpro an einem Modellbeispiel.

Durch diese spezielle H-Matrix-Darstellung (schematisch dargestellt in Bild 3) können Operationen zwischen Matrizen und Vektoren, sowie Matrixinversionen mit fast linearem Aufwand ausgeführt werden. Sogar Matrixgleichungen kann man mit ähnlichem Aufwand

lösen. HLIBpro besitzt alle notwendigen Routinen zur Aufstellung des H-Matrix-Formats, zur Durchführung sämtlicher Matrixoperationen, sowie Algorithmen für die LU- und Cholesky-Zerlegungen. Schließlich bietet HLIBpro verschiedene direkte und iterative Löser (GMRes, MinRes, CG, BiCGstab, Richardson).

HLIBpro ist eine optimale Ergänzung zur Software SAMG (siehe Seite 38), mit der sich andere Klassen von Matrizen effizient behandeln lassen.

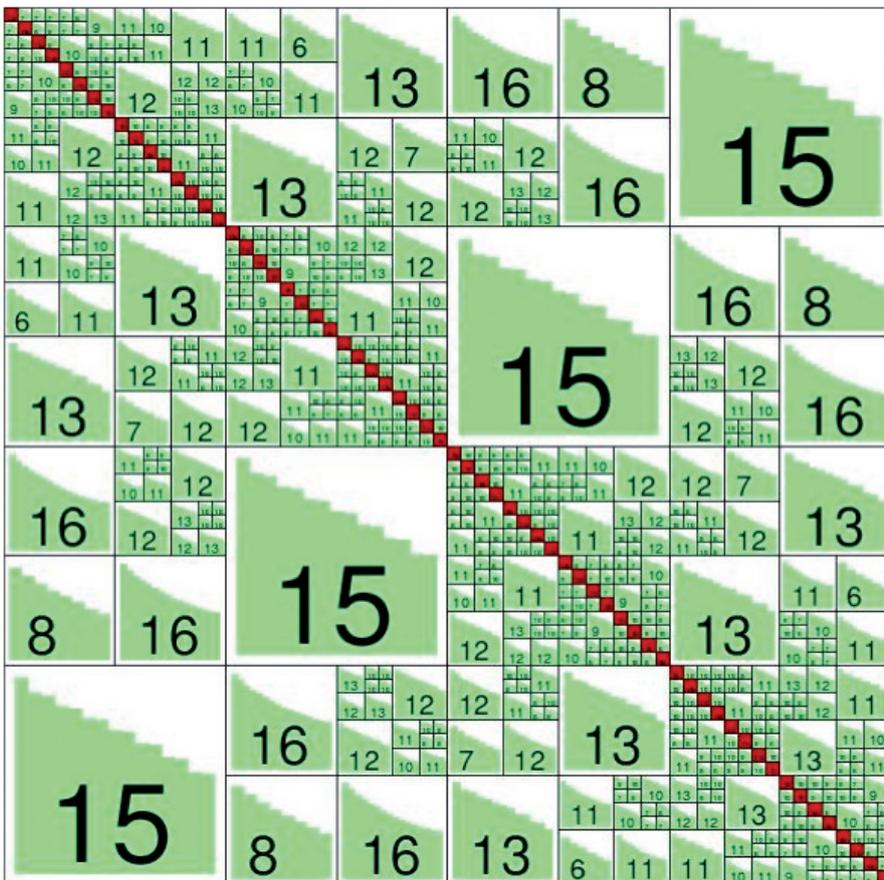


Bild 3: Typische hierarchische Blockstruktur einer H-Matrix. Jeder grün eingefärbte Block ist im speicherreduzierten Format dargestellt, wobei die Nummern dem Grad der Reduzierung entsprechen.

Ansprechpartnerin

» Dr. Tatiana S. Samrowski
 Telefon 02241 14-2747
 tatiana.samrowski@scai.fraunhofer.de

» www.scai.fraunhofer.de/hlibpro

ESPresSo++

ESPresSo++ treibt die Simulation von Polymeren in der Industrie an

Polymere, zum Beispiel Kunststoffe oder Plaste, sind kettenförmige, organische Moleküle, die aus Tausenden ständig wiederkehrenden, kleinsten Baugruppen (Monomere) bestehen. Je nach Monomertypen und deren Vernetzung besitzen Polymere die verblüffende Fähigkeit, sich als Ganzes völlig unterschiedlich zu verhalten. Allein der Austausch eines einzigen Monomertyps kann etwa dazu führen, dass sich ein festes Polymer in ein flüssiges, oder ein sprödes Polymer in ein geschmeidiges verwandelt. Im täglichen Leben kennen wir sie daher als so verschiedenartige Materialien wie Autoreifen, Klebstoffe oder CDs. Warum aber können Polymere eine solche Vielzahl verschiedener Eigenschaften besitzen?

Computersimulationen auf molekularem Niveau helfen, solche Fragen zu beantworten und tragen so zur schnellen Materialentwicklung bei. Sie erfordern jedoch viel Spezialwissen und Entwicklungszeit. Nicht zuletzt deshalb fehlt der Industrie bislang effiziente Software. In einer strategischen Partnerschaft wollen Max-Planck- und Fraunhofer-Gesellschaft nun den Markt bedienen.

In einem gemeinsamen Projekt arbeiten das Max-Planck-Institut für Polymerforschung (MPIP) und das Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen (SCAI) an der Entwicklung einer Software zur Simulation von Polymeren. Bis zum Frühjahr 2010 soll die bereits am MPIP vorhandene Software ESPResSo (Extensible Simulation Package for Research on Soft Matter) zu einem universellen Simulationspaket für den Einsatz auf Hochleistungscomputern weiterentwickelt werden. ESPResSo++ soll mit seinem speziellen Funktionsumfang eine

konkurrenzlose Software zur Vorhersage von Materialeigenschaften werden.

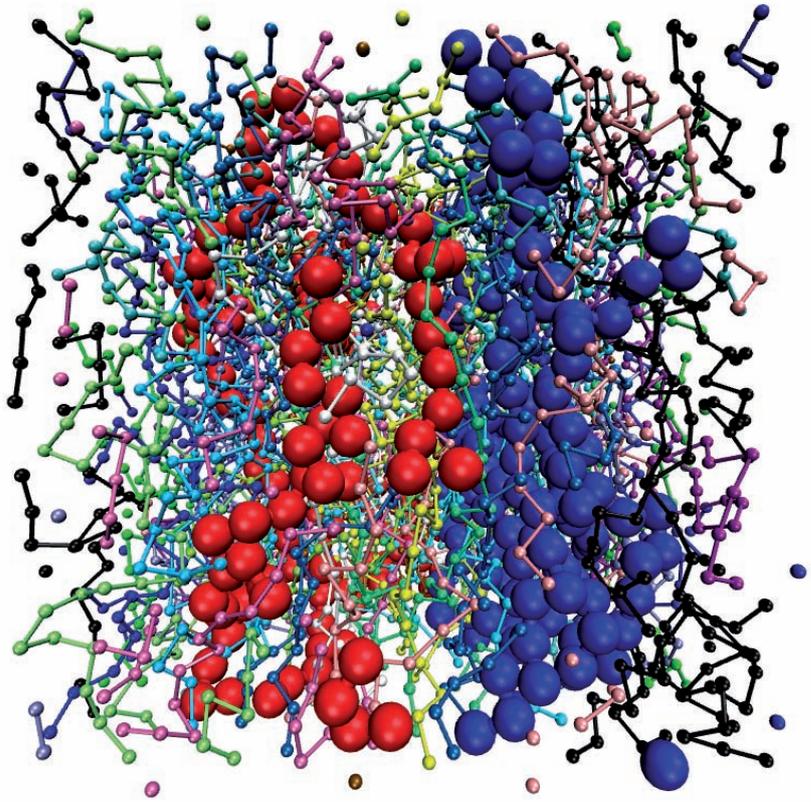
Die Berechnung physikalischer und chemischer Eigenschaften von Werkstoffen liefert mikroskopische Detailkenntnisse, die wiederum ein besseres Verständnis und eine Vorhersage des makroskopischen Verhaltens dieser Stoffe erlauben. Damit wird eine wesentlich schnellere und effizientere Materialentwicklung in der chemischen Industrie ermöglicht. Das Programmpaket ESPResSo++ wird dabei als Open-Source-Software angeboten, um die globale Wissenschafts-

gemeinschaft bei künftigen Weiterentwicklungen einzubeziehen. Dies wird es gleichzeitig SCAI ermöglichen, von neuesten Methodenentwicklungen zu profitieren und diese als Dienstleister für Berechnungen von industriellen Fragenstellungen direkt an Kunden weiterzugeben.

Ansprechpartner

» Dr. Dirk Reith
Telefon 02241 14-2746
dirk.reith@scai.fraunhofer.de

» www.espresso-pp.de



Modell einer Polymerschmelze, zwei Polymere (rot und blau) sind hervorgehoben.

CAROD

Computer Aided Robust Design

Das Ziel des Fraunhofer-Projektes CAROD (Computer Aided Robust Design) ist die quantitative und qualitative Erfassung unsicherer Herstellungs- und Einsatzbedingungen und ein verbesserter Entwurfsprozess, der Toleranzen in Materialeigenschaften und Produktionsprozessen von Beginn an berücksichtigt.

Die Schwerpunkte der Methodenentwicklung zur Behandlung von Unsicherheiten und Toleranzen im virtuellen Produktentwicklungsprozess sind:

- Modellreduktion zur schnelleren Berechnung einzelner Simulationsergebnisse
- Bestimmung einflussreicher Variationen von Parametern zur Reduktion der nötigen Anzahl von Monte-Carlo-Experimenten
- Einsatz statistischer Versuchsplanung (z.B. Taguchi) zur Simulation nicht kontrollierbarer Streufaktoren

CAROD umfasst ferner auch die Materialcharakterisierung sowie die Auslegung und Entwicklung von Demonstratoren und strebt so eine ganzheitliche Behandlung dieses Themas an. Als vermarktbare Ergebnis entstehen aufeinander abgestimmte Werkzeuge, die in die CAD-Umgebung industrieller Hersteller eingebettet werden können.

Hauptziele des Projekts sind die Entwicklung neuer Methoden auf den Gebieten:

- Statistische Charakterisierung von Streuungen durch Experiment und Simulation
- Effiziente numerische Methoden für das Robust Design
- Verbesserung von Postprocessing-Methoden und Optimierungsstrategien
- Demonstration anhand konkreter Anwendungen

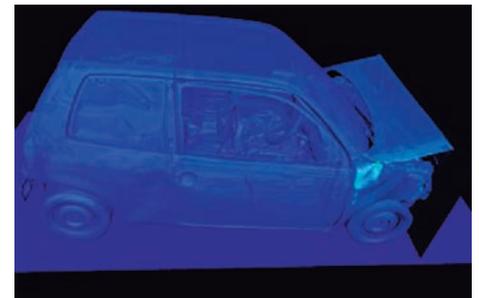
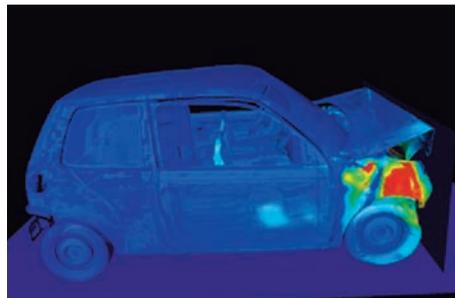
Anwendungsszenarien

Die neuen Methoden werden an folgenden konkreten Anwendungen getestet:

- Crash-Verhalten von Karosseriekomponenten
- Multiaxialer Prüfstand
- Laserschneidmaschine

Beteiligte Fraunhofer-Institute

- Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI, Sankt Augustin (Projektleitung)
- Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM, Kaiserslautern
- Fraunhofer-Institut für Integrierte Schaltungen IIS / Außenstelle Entwurfsautomatisierung EAS
- Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik IWM, Freiburg
- Fraunhofer-Institut für Fertigungstechnik und Angewandte Materialforschung IFAM, Bremen
- Fraunhofer-Institut für Betriebsfestigkeit und Systemzuverlässigkeit LBF, Darmstadt
- Fraunhofer-Institut für Lasertechnik ILT, Aachen
- Fraunhofer-Allianz Numerische Simulation von Produkten und Prozessen NUSIM

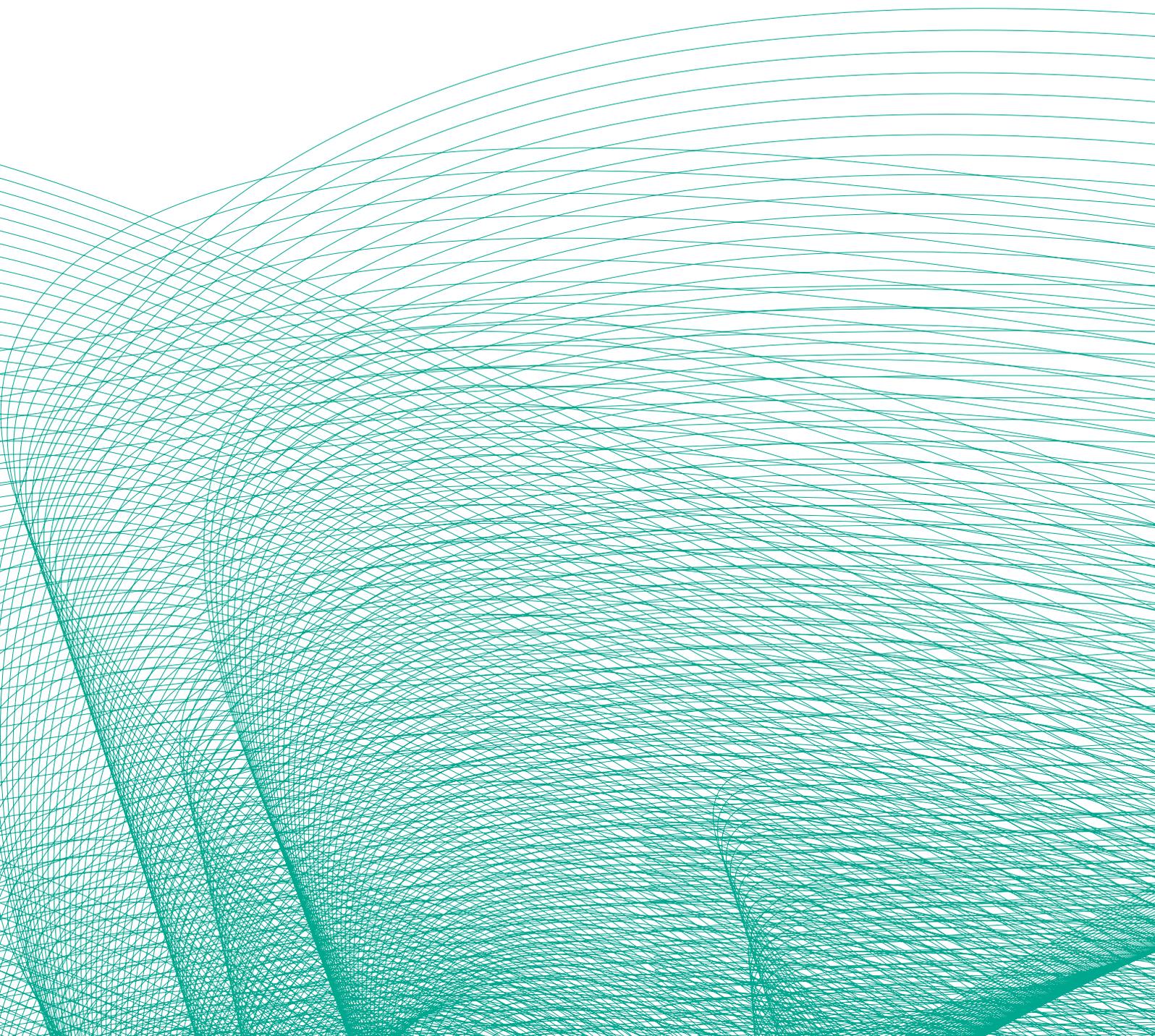


Anwendungsszenario Crash: Von der Analyse großer Schwankungen im Ausgangsmodell zur Entwicklung eines Robust Designs (Volkswagen AG)

Ansprechpartnerin

» Dr. Tanja Clees
 Telefon 02241 14-2983
 tanja.clees@scai.fraunhofer.de

» www.carod.fraunhofer.de



The background of the page is a complex, abstract pattern of thin, light green lines. These lines are arranged in a way that suggests a network or a web of connections, with some lines being more prominent than others. The overall effect is a sense of dynamic movement and interconnectedness. The lines are most dense in the lower half of the page and become sparser towards the top.

Hochschulkooperationen und Vernetzung in der Fraunhofer-Gesellschaft

Forschung und Lehre an der Universität zu Köln

Die Abteilung Numerische Software hat neue Räume in der Gyrhofstraße 8b, gegenüber dem Mathematischen Institut der Universität zu Köln bezogen. Damit ist die Fraunhofer-Gesellschaft als Europas führende Organisation für angewandte Forschung erstmals auch in Köln vertreten.

In der Außenstelle sind zurzeit 15 Mitarbeiter und Studierende tätig. Der Pavillon wurde im Jahre 2006/2007 mit Mitteln des Landes NRW erweitert. Der Standort ermöglicht eine besonders enge Kooperation mit der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Caren Tischendorf (Numerische Mathematik, Differential-Algebra) vom Mathematischen Institut, die im selben Gebäude angesiedelt ist.

Die zusätzliche Anbindung des Fraunhofer SCAI an die Universität zu Köln über den Lehrstuhl für Angewandte Mathematik / Wissenschaftliches

Rechnen von Institutsleiter Prof. Dr. Ulrich Trottenberg hat sich ebenfalls sehr positiv entwickelt. Dies drückt sich unter anderem in der großen Anzahl der an diesem Lehrstuhl allein seit 2006 entstandenen Diplomarbeiten aus.

Forschungsthemen und Produkte der Abteilung Numerische Software

- Data Mining und Grid Computing für komplexe Simulationsanwendungen (SIMDAT)
- Multikriterielle Optimierung (DesParO)
- Mathematische Verfahren zum hocheffizienten Lösen linearer Gleichungssysteme für Simulationsanwendungen: Algebraische Mehrgitterverfahren (SAMG), Hierarchische Matrizen (HLIBpro)
- Stabilitätsanalyse und Robust Design (DIFFCrash)
- Kompression von Ergebnissen aus Crash- und Wettersimulationen (FEMZIP)

Bonn-Aachen International Center for Information Technology

Das B-IT ist eine gemeinsame Einrichtung der Universität Bonn, der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen, der Fachhochschule Bonn-Rhein Sieg und der Institute des Fraunhofer-Institutszentrums Schloss Birlinghoven. Die Abteilung Bioinformatik des Fraunhofer SCAI beteiligt sich in dieser Kooperation am internationalen Studiengang »Life Science Informatics« (LSI). Seit ihrer Gründung im Jahre 2003 arbeiten die oben genannten Partner am B-IT zusammen; der Abteilung Bioinformatik ist an der Gestaltung des LSI-Studiengangs beteiligt.

Ziel des Engagements im Curriculum des LSI ist es, junge, angehende Wissenschaftler für Aspekte der angewandten Life-Science-Informatik zu begeistern. Absolventinnen und Absolventen des B-IT bieten wir die Möglichkeit zur Promotion. Mit der Berufung des Abteilungsleiters Martin Hofmann-Apitius zum Professor für Praktische Informatik an die Universität Bonn wurden im Jahr 2006 die Voraussetzungen geschaffen, die am SCAI in Forschung und Entwicklung bearbeiteten Inhalte auch im Umfeld der universitären Lehre in Masterarbeiten und Dissertationen zu vertreten. Die Anbindung der Abteilung Bioinformatik an das B-IT hat für beide Seiten Vorteile, was sich unter

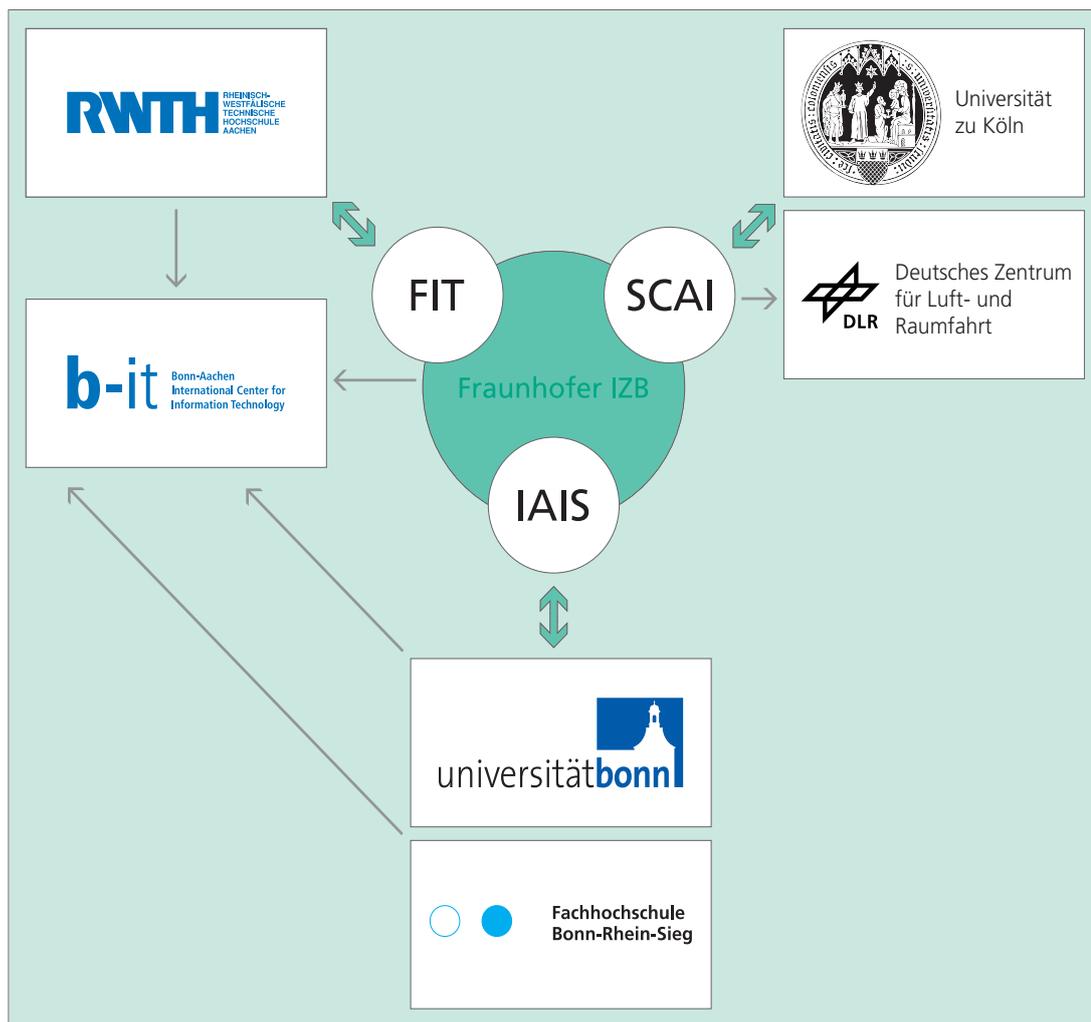
anderem auch aus dem Engagement von SCAI-Mitarbeitern in der Betreuung von Master- und Doktorarbeiten und der deutlich gestiegenen Zahl von Publikationen der Abteilung ableiten lässt.

Studierenden geben wir schon frühzeitig die Möglichkeit, in Projekten am SCAI mitzuarbeiten. Dies führte im von der Europäischen Kommission geförderten Projekt »@neurIST« zu Publikationen, die direkt mit den erzielten Ergebnissen der Masterarbeiten verbunden waren.

Über die Mitarbeit im B-IT ist es inzwischen gelungen, die Abteilung enger an andere universitäre Initiativen heranzuführen und in lokale Konsortien einzubringen. So ist die Abteilung Bioinformatik Partner in der vom Ministerium für Innovation, Wissenschaft, Forschung und Technologie des Landes NRW geförderten Forschungsschule »Bonn-Aachen International Research School on Applied Informatics (B-IT Research School)«. Darüber hinaus beteiligt sich die Abteilung Bioinformatik an dem von Wissenschaftlern der Universität Bonn koordinierten Projekt »NeuroPharma«

» www.b-it-center.de

Regionale Forschungspartnerschaften des Fraunhofer SCAI



Das Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI ist eines der Institute des Fraunhofer-Institutszentrums Schloss Birlinghoven IZB. Die Institute des IZB sind durch strategische Forschungspartnerschaften mit den Hochschulen und Forschungseinrichtungen der Region verbunden.

Direkte Verbindungen über die Lehrstühle der Institutsleiter bestehen mit folgenden Universitäten:

- Universität zu Köln (Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, Fraunhofer SCAI)
- Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn (Prof. Dr. Stefan Wrobel, Fraunhofer-Institut für Intelligente Analyse und Informationssysteme IAIS)
- Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen (Prof. Dr. Matthias Jarke, Fraunhofer-Institut für Angewandte Informationstechnik FIT).

Darüber hinaus kooperiert das Institutszentrum strategisch, personell und in gemeinsamen Projekten mit dem Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT), dem Forschungszentrum Jülich (FZJ) und der Fachhochschule Bonn-Rhein-Sieg. Eine besonders enge Kooperation besteht zudem zum Institut für Simulations- und Softwaretechnik des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Köln, ebenfalls geleitet von Prof. Dr. Ulrich Trottenberg.

» www.izb.fraunhofer.de

Fraunhofer-Verbund IuK

Mit seinen 16 Instituten deckt der Fraunhofer-Verbund Informations- und Kommunikationstechnik (IuK) die gesamten Wertschöpfungsketten nahezu aller Branchen ab – von der Medizin über die Medienindustrie und das produzierende Gewerbe bis hin zum Finanzwesen. Die insgesamt fast 2800 Mitarbeiter der 16 Institute sowie ein Jahresbudget von mehr als 168 Millionen Euro machen den IuK-Verbund zum größten Forschungsverbund Europas.

Der IuK-Verbund ist zentrale Anlaufstelle für Industriekunden und Medien auf der Suche nach dem richtigen Ansprechpartner. Die Bündelung der Kompetenzen aller IuK-Institute ermöglicht branchenspezifische, ganzheitliche und maßgeschneiderte IT-Lösungen, kompetente Technologieberatung sowie Vorlaufforschung für neue Produkte und Dienstleistungen. Bei Kooperationsprojekten werden die Verwertungsrechte je nach Wunsch des Unternehmens individuell gestaltet. Regelmäßige Wirtschafts-Summits bringen Industrie, Forschung und Politik zu bestimmten Themen an einen Tisch und bilden so eine Plattform für kontinuierlichen Wissenstransfer.

» www.iuk.fraunhofer.de

Fraunhofer-Allianz Grid Computing

Die Fraunhofer-Allianz Grid Computing besteht seit Anfang des Jahres 2005 und ist ein Verbund von derzeit acht Fraunhofer-Instituten, die sich in Forschungs- und Industrieprojekten mit unterschiedlichen Themen des Grid Computing, Utility Computing und On-Demand-Computing befassen. In der Allianz bündeln die beteiligten Institute ihre Kompetenzen, um Kunden und Forschungspartnern gegenüber eine zentrale Anlaufstelle in Fragen der Vernetzung und optimierten Nutzung verteilter IT-Ressourcen anzubieten. Leistungen umfassen neben Rechnern und Software auch Sensoren, Messgeräte sowie produktive Systeme.

» www.grid.fraunhofer.de

Themenverbund Verkehr

Im Fraunhofer-Themenverbund Verkehr bündeln seit März 2003 sechzehn Fraunhofer-Institute ihre verkehrsrelevanten Kompetenzen. 2004 und 2006 wurde der Verbund um weitere Institute verstärkt, so dass dieser nunmehr 20 Mitglieder umfasst.

Die Mitglieder des Verbundes haben sich zum Ziel gesetzt, geeignete technische und konzeptionelle Lösungen für öffentliche und industrielle Auftraggeber zur Anwendungsreife zu entwickeln.

Durch eine enge, themenbezogene Zusammenarbeit können im Verkehrsbereich für die Kunden ganzheitliche System- und Verbundlösungen sowie neue Anwendungsbereiche durch Know-how-Transfer erschlossen werden. Diese Auswahl und Bündelung unterschiedlicher Kompetenzen stellt sicher, dass bedarfsgerechte Lösungen für den Kunden angeboten werden können.

Durch internationale Forschungsprogramme sind die Mitgliedsinstitute weltweit mit verkehrsrelevanten Wirtschafts- und Forschungsunternehmen vernetzt. Die Geschäftsstelle des Verbundes hilft, die richtigen Partner zu finden.

» www.verkehr.fraunhofer.de

Themenverbund Numerische Simulation von Produkten, Prozessen

Im Themenverbund bündeln zwanzig Fraunhofer-Institute ihre Kompetenzen, die sich mit der Entwicklung und Verbesserung von Simulationsverfahren beschäftigen. Das Ziel der Allianz ist es, institutsübergreifende Aufgaben aufzugreifen und als Ansprechpartner für öffentliche und industrielle Auftraggeber die Interessen der Institute im Verbund zu vertreten. Insbesondere die Bündelung der Kompetenzen aus dem IuK-Bereich mit dem Werkstoff- und Bauteil-Know-how sowie mit der Oberflächen- und Produktionstechnik verspricht innovative Ergebnisse.

» www.nusim.fraunhofer.de

Die Fraunhofer-Gesellschaft

Forschung für die Praxis ist die zentrale Aufgabe der Fraunhofer-Gesellschaft. Die 1949 gegründete Forschungsorganisation betreibt anwendungsorientierte Forschung für die Wirtschaft und zum Vorteil der Gesellschaft. Vertragspartner und Auftraggeber sind Industrie- und Dienstleistungsunternehmen sowie die öffentliche Hand. Im Auftrag von Ministerien und Behörden des Bundes und der Länder werden zukunftsrelevante Forschungsprojekte durchgeführt, die zu Innovationen im öffentlichen Nachfragebereich und in der Wirtschaft beitragen.

Die Wirkung der angewandten Forschung geht über den direkten Nutzen für die Kunden hinaus: Mit ihrer Forschungs- und Entwicklungsarbeit tragen die Fraunhofer-Institute zur Wettbewerbsfähigkeit der Region, Deutschlands und Europas bei. Sie fördern Innovationen, stärken die technologische Weiterentwicklung, verbessern die Akzeptanz moderner Technik und sorgen auch für Information und Weiterbildung des dringend benötigten wissenschaftlich-technischen Nachwuchses.

Ihren Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern bietet die Fraunhofer-Gesellschaft die Möglichkeit zur fachlichen und persönlichen Entwicklung für anspruchsvolle Positionen in ihren Instituten, in anderen Bereichen der Wissenschaft, in Wirtschaft und Gesellschaft. Studentinnen und Studenten an Fraunhofer-Instituten eröffnen sich wegen der praxisnahen Ausbildung und Erfahrung hervor-

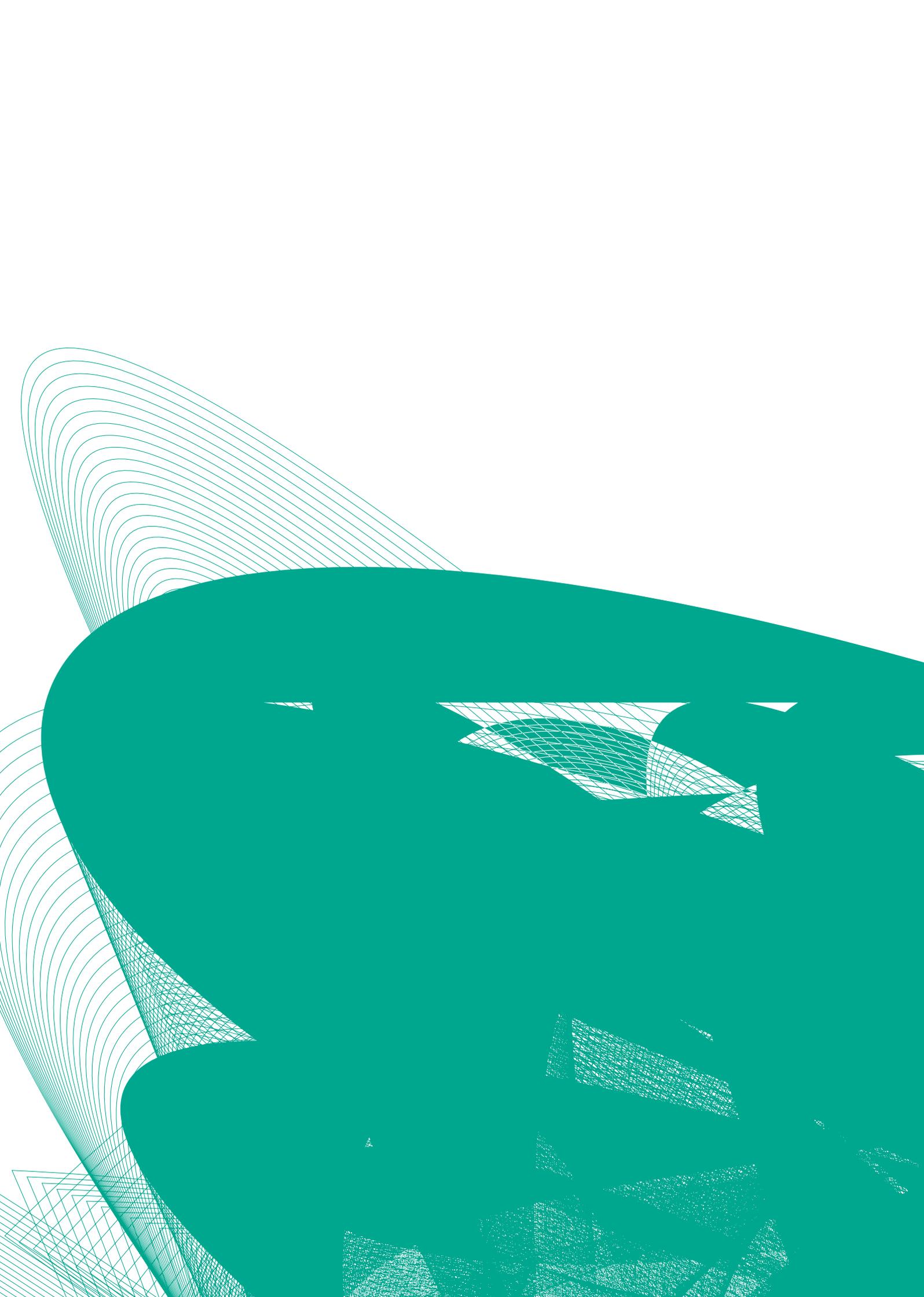
ragende Einstiegs- und Entwicklungschancen in Unternehmen.

Die Fraunhofer-Gesellschaft betreibt derzeit mehr als 80 Forschungseinrichtungen, davon 56 Institute, an 40 Standorten in ganz Deutschland. 13 000 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, überwiegend mit natur- oder ingenieurwissenschaftlicher Ausbildung, bearbeiten das jährliche Forschungsvolumen von 1,3 Milliarden Euro. Davon fallen mehr als 1 Milliarde Euro auf den Leistungsbereich Vertragsforschung. Zwei Drittel dieses Leistungsbereichs erwirtschaftet die Fraunhofer-Gesellschaft mit Aufträgen aus der Industrie und mit öffentlich finanzierten Forschungsprojekten. Nur ein Drittel wird von Bund und Ländern als Grundfinanzierung beigesteuert, damit die Institute Problemlösungen erarbeiten können, die erst in fünf oder zehn Jahren für Wirtschaft und Gesellschaft aktuell werden.

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

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

» www.fraunhofer.de



Anhang



Ausgewählte Publikationen

Algorri, Maria-Elena; Zimmermann, Marc; Friedrich, Christoph M.; Akle, Santiago; Hofmann-Apitius, Martin: **Reconstruction of Chemical Molecules from Images**. In: Engineering in Medicine and Biology Society u.a.: 29th Annual International Conference of the IEEE Engineering in Medicine and Biology Society: EMBC 2007, August 22-26, 2007, Lyon, France; in conjunction with the biennial conference of the Société Française de Génie Biologique et Médical (SFGBM)

Arbona, A.; Benkner, S.; Engelbrecht, G.; Fingberg, J.; Hoffmann, M.; Kumpf, Kai; Lonsdale, G.; Woehrer, A.: **A service-oriented grid infrastructure for biomedical data and compute services**. In: IEEE transactions on nanobioscience 6 (2007), 2, S.136-141

Baturin, J.M.; Goebel, M.; Klimenko, S.V.; Leonov, A.V.; Nikitin, Igor N.; Nikitina, L.D.; Serebrov, A.A.; Urazmetov, V.F.: **Virtual Storytelling as Innovative Educational Technology**. In: Moscow Institute for Physics and Technology/ Chair of System Integration and Management: Annals of SIM. Moscow: ICPT, 2007

Clees, Tanja; Ganzer, Leonhard: **An efficient algebraic multi-grid solver strategy for adaptive implicit methods in oil reservoir simulation**. In: Society of Petroleum Engineers: SPE Reservoir Simulation Symposium 2007: February 26-28, 2007, Houston, Texas, USA. SPE, 2007

Drotz, Alain; Gruber, Ralf; Keller, Vincent; Thiémond, Michela; Tolou, Ali; Tran, Trach-Minh; Cristiano, Kevin; Kuonen, Pierre; Wieder, Philipp; Wäldrich, Oliver; Ziegler, Wolfgang; Manneback, Pierre; Schwiigelshohn, Uwe; Yahyapour, Ramin; Kunszt, Peter; Maffioletti, Sergio; Sawley, Marie-Christine; Witzig, Christoph; CoreGrid – European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for Large Scale Distributed, GRID and Peer-to-Peer Technologies; Institute on Resource Management and Scheduling: **Application-oriented scheduling for HPC Grids**. CoreGrid, 2007 (CoreGrid technical report TR-0070)

Eickermann, Thomas; Frings, Wolfgang; Wäldrich, Oliver; Wieder, Philipp; Ziegler, Wolfgang; Institute on Resource Management and Scheduling; Core-

Grid – European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for Large Scale Distributed, GRID and Peer-to-Peer Technologies: **Co-allocation of MPI Jobs with the VIOLA Grid MetaScheduling Framework**. 2007, (CoreGrid technical report TR-0081)

Eickermann, Thomas; Frings, Wolfgang; Wäldrich, Oliver; Wieder, Philipp; Ziegler, Wolfgang: **Co-allocation of MPI Jobs with the VIOLA Grid MetaScheduling Framework**. In: German e-Science Conference 2007: GES 2007, May 2-4, 2007, Baden-Baden. 2007, 10 S.

Faroughi, Arash; Faroughi, Roozbeh; Wieder, Philipp; Ziegler, Wolfgang; CoreGrid–European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for Large Scale Distributed, GRID and Peer-to-Peer Technologies: Attributes and VOs: **Extending the UNICORE authorisation capabilities**. 2007 (CoreGrid technical report TR-0097)

Figuerola, S.; Ciulli, N.; Leenheer, M. de; Demchenko, Y.; Ziegler, W.; Binczewski, A.: **PHOSPHORUS: Single-step on-demand services**. In: Wang, Jianli (Hrsg.) u.a.; Society of Photo-optical Instrumentation Engineers: Network Architectures, Management, and Applications V: SPIE Asia-Pacific Optical Communications (APOC), Wuhan, China, Nov. 1-5, 2007; Bellingham, Wash.: SPIE, 2007, 16 S. (Proc. of SPIE 6784)

Fluck, Juliane; Mevissen, T.H.; Dach, H.; Oster, M.; Hofmann-Apitius, Martin: **ProMiner: Recognition of Human Gene and Protein Names Using Regularly Updated Dictionaries**. In: Hirschmann, Lynette (Hrsg.) u.a.: Proceedings of the Second BioCreative Challenge Evaluation Workshop: April 23-25, 2007, Madrid, S. 149-151

Gietz, Peter; Grimm, Christian; Groeper, Ralf; Haase, Martin; Makedanz, Siegfried; Pfeiffenberger, Hans; Schiffers, Michael; Ziegler, Wolfgang: **Trust Issues in Shibboleth-Enabled Federated Grid Authentication and Authorization Infrastructures Supporting Multiple Grid Middlewares**. In: e-Science 2007: 3rd IEEE International Conference on e-Science and Grid Computing, Bangalore, India, December 10-13, 2007. New York, NY: IEEE

- Grimme, Christian; Lepping, Joachim; Papaspyrou, Alexander; Wieder, Philipp; Yahyapour, Ramin; Oleksiak, Ariel; Wäldrich, Oliver; Ziegler, Wolfgang; CoreGrid–European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for Large Scale Distributed, GRID and Peer-to-Peer Technologies; Institute on Resource Management and Scheduling: **Towards a standards-based Grid Scheduling Architecture**. CoreGrid, 2007 (CoreGrid technical report TR-0123)
- Gruber, Ralf; Keller, Vincent; Thiémond, Michela; Wäldrich, Oliver; Wieder, Philipp; Ziegler, Wolfgang; Manneback, Pierre: **Integration of Grid Cost Model into ISS/VIOGA Meta-scheduler Environment**. In: Lehner, Wolfgang (Hrsg.) u.a.: Euro-Par 2006 workshops: parallel processing: CoreGRID 2006, UNICORE Summit 2006, petascale computational biology and bioinformatics, Dresden, Germany, August 29- September 1, 2006. Berlin [u.a.]: Springer, 2007, S. 215-224
- Harmandaris, Vagelis A.; Reith, Dirk; Vegt, Nico F. A. van der; Kremer, Kurt: **Comparison between coarse-graining models for polymer systems: two mapping schemes for polystyrene**. In: Macromolecular chemistry and physics 208 (2007), 19-20, S. 2109-2120
- Hülsmann, Marco; Friedrich, Christoph M.: **Comparison of a novel combined ECO strategy with different multiclass algorithms together with parameter optimization methods**. In: Perner, Petra (Hrsg.): Machine learning and data mining in pattern recognition: 5th international conference, MLDM 2007, Leipzig, Germany, July 18-20, 2007; proceedings. Berlin [u.a.]: Springer, 2007, S. 17-31
- Jacq, Nicolas; Breton, Vincent; Chen, Hsin-Yen; Ho, Li-Yung; Hofmann, Martin; Lee, Hurng-Chun; Legré, Yannick; Lin, Simon C.; Maaß, Astrid; Medernach, Emmanuel; Merelli, Ivan; Milanesi, Luciano; Rastelli, Giulio; Reichstadt, Matthieu; Salzemann, Jean; Schwichtenberg, Horst; Sridhar, Mahendrakar; Kasam, Vinod; Wu, Ying-Ta; Zimmermann, Marc: **Grid-Enabled High Throughput Virtual Screening**. In: Dubitzky, Werner (Hrsg.) u.a.: Distributed, high-performance and Grid computing in computational biology: international workshop, GCCB 2006, Eilat, Israel, Jan. 2007. Berlin [u.a.]: Springer, 2007, S. 45-59
- Jacq, Nicolas; Breton, Vincent; Chen, Hsin-Yen; Ho, Li-Yung; Hofmann, Martin; Kasam, Vinod; Lee, Hurng-Chun; Legré, Yannick; Lin, Simon C.; Maaß, Astrid; Medernach, Emmanuel; Merelli, Ivan; Milanesi, Luciano; Rastelli, Giulio; Reichstadt, Matthieu; Salzemann, Jean; Schwichtenberg, Horst; Wu, Ying-Ta; Zimmermann, Marc: **Virtual screening on large scale grids**. In: Parallel computing 33 (2007), 4/5, S. 289-301
- Jacq, Nicolas (Hrsg.); Müller, Henning (Hrsg.); Blanquer, Ignacio (Hrsg.); Legré, Yannick (Hrsg.); Breton, Vincent (Hrsg.); Hausser, Dominique (Hrsg.); Hernández, Vicente (Hrsg.); Solomonides, Tony (Hrsg.); Hofmann-Apitius, Martin (Hrsg.): **From Genes to Personalized HealthCare: Grid Solutions for the Life Sciences – Proceedings of HealthGrid 2007**. Amsterdam [u.a.]: IOS Press, 2007 (Studies in health technology and informatics 126)
- Klie, Hector; Wheeler, Mary Fanett; Clees, Tanja; Stüben, Klaus: **Deflation AMG Solvers for Highly Ill-Conditioned Reservoir Simulation Problems**. In: Society of Petroleum Engineers: SPE Reservoir Simulation Symposium 2007: February 26-28, 2007, Houston, Texas, USA. SPE, 2007
- Klinger, Roman; Rudolph, Günter: **Automatic Composition of Music with Methods of Computational Intelligence**. In: WSEAS transactions on information science and applications 4 (2007), 3, S. 508-515
- Klinger, Roman; Furlong, Laura I.; Friedrich, Christoph M.; Mevissen, Heinz-Theodor; Fluck, Juliane; Sanz, Ferran; Hofmann-Apitius, Martin: **Identifying Gene Specific Variants in Biomedical Text**. In: Jour. of bioinformatics and computational biology 5 (2007), 6, S. 1277-1296
- Klinger, Roman; Friedrich, Christoph M.; Fluck, Juliane; Hofmann-Apitius, Martin: **Named Entity Recognition with Combinations of Conditional Random Fields**. In: Hirschmann, Lynette (Hrsg.) u.a.: Proceedings of the Second BioCreative Challenge Evaluation Workshop: April 23-25, 2007, Madrid, 2007, S. 89-91

Krämer-Fuhrmann, Ottmar: **RCE and SESIS – Service-Oriented Integration Environment for Collaborative Engineering.** In: ERCIM News (2007), 70, S. 30-31

Kumpf, Kai; Mevissen, Theo; Wäldrich, Oliver; Ziegler, Wolfgang; Ginzel, Sebastian; Weuffel, Thomas: **Multi-Cluster Text Mining on the Grid using the D-Grid UNICORE environment.** In: German e-Science Conference 2007: GES 2007, May 2-4, 2007, Baden-Baden

Kumpf, Kai; Mevissen, Theo; Wäldrich, Oliver; Ziegler, Wolfgang; Ginzel, Sebastian; Weuffel, Thomas; Wieder, Philipp; CoreGrid–European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for Large Scale Distributed, GRID and Peer-to-Peer Technologies; Institute on Resource Management and Scheduling: **Multi-Cluster Text Mining on the Grid using the D-Grid UNICORE environment.** CoreGrid, 2007 (CoreGrid technical report TR-0109)

Larson, Gregory; Deryl, Snyder; Vanden Abeele, David; Clees, Tanja: **Application of single-level, pointwise algebraic, and smoothed aggregation multigrid methods to direct numerical simulations of incompressible turbulent flows.** In: Computing and visualization in science (2007)

Missier, Paolo; Wieder, Philipp; Ziegler, Wolfgang: **Semantic Support for Meta-scheduling in Grids.** In: Talia, Domenico (Hrsg.) u.a.: Knowledge and Data Management in Grids. New York, NY [u.a.]: Springer, 2007, S. 169-183 (CoreGrid series 3)

Pichot, Antoine; Wieder, Philipp; Ziegler, Wolfgang; Wäldrich, Oliver; CoreGrid–European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for Large Scale Distributed, GRID and Peer-to-Peer Technologies; Institute on Resource Management and Scheduling: **Dynamic SLA-negotiation based on WS-Agreement.** CoreGrid, 2007 (CoreGrid technical report TR-0082)

Raoult, Baudouin; Thole, Clemens-August; Gärtel-Zafiris, Ute: **Grid technology makes weather forecasts without boundaries a reality.** In: ERCIM News (2007), 70, S. 58-59

Rasheed, Hassan; Gruber, Ralf; Keller, Vincent; Wäldrich, Oliver; Ziegler, Wolfgang; Wieder, Philipp; Kuonen, Pierre; Sawley, Marie-Christine; Maffioletti, Sergio; Kunszt, Peter; CoreGrid–European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for Large Scale Distributed, GRID and Peer-to-Peer Technologies; Institute on Resource Management and Scheduling: **IANOS: An Intelligent Application Oriented Scheduling Middleware for a HPC Grid.** CoreGrid, 2007 (CoreGrid technical report TR-0110)

Rümpler, Christian; Reichert, Frank; Berger, Frank; Stammberger, Hartwig; Terhoeven, Peter: **Simulation and verification of the arc behaviour in quenching chambers with splitter plates.** In: 17th Symposium on Physics of Switching Arc. Brno: Letohrad, 2007, S. 181-184

Rümpler, Christian; Zacharias, Albert: **Simulation of the switching arc for a motor protective circuit breaker.** In: Wolf, Klaus Dieter (Hrsg.); Fraunhofer-Institut Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI: 8th MpCCI User Forum 2007: Feb. 13-14, 2007, Proceedings. Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2007. S. 62-69

Rümpler, Christian; Reichert, Frank; Stammberger, Hartwig; Terhoeven, Peter; Berger, Frank: **Simulation und Verifikation des Lichtbogenlaufverhaltens in Löschkammerkonstruktionen.** In: Schöpf, Thomas (Hrsg.); Energietechnische Gesellschaft/Fachbereich Kontaktverhalten und Schalten: Kontaktverhalten und Schalten: 19. Fachtagung Albert-Keil-Kontaktseminar vom 26.-28. September 2007 an der Universität Karlsruhe. Berlin, Offenbach: VDE-Verlag, 2007, S. 121-130 (VDE-Fachbericht 63).

Schwarz, Fritz: **Algorithmic Lie theory for solving ordinary differential equations.** Boca Raton, Fla. [u.a.]: Chapman & Hall/CRC, 2007 (Pure and applied mathematics 291)

Schwarz, Fritz; Grigoriev, Dima: **Loewy and Primary Decomposition of 3D-Modules.** In: Advances in applied mathematics 38 (2007), 4, S.526-541

Seidel, Jan; Wäldrich, Oliver; Ziegler, Wolfgang; Wieder, Philipp; Yahyapour, Ramin; CoreGrid–European Research Network on Foundations, Software Infrastructures and Applications for Large Scale Distributed, GRID and Peer-to-Peer Technologies; Institute on Resource Management and Scheduling: **Using SLA for resource management and scheduling—a survey**. CoreGrid, 2007 (CoreGrid technical report TR-0096)

Stüben, Klaus; Clees, Tanja; Klie, Hector; Lou, Bo; Wheeler, Mary Fanett: **Algebraic multi-grid methods (AMG) for the efficient solution of fully implicit formulations in reservoir simulation**. In: Society of Petroleum Engineers: SPE Reservoir Simulation Symposium 2007: February 26-28, 2007, Houston, Texas, USA. SPE, 2007

Thole, Clemens-August; Nikitina, Lialia; Nikitin, Igor; Steffes-lai, Daniela; Roel, Kersten; Bruns, Jürgen: **Constrained optimization with DesParO**. In: 2007 Conference, Virtual Product Development (VPD) in Automotive Engineering: March 21-22, 2007, Lake Chiemsee/Munich, Germany. PayerConsulting, 2007

Thole, Clemens-August; Nikitin, Igor; Nikitina, Lialia; Riepl, Mareike: **DesParO: Interactive Environment for Multiobjective Parametric Optimization in Automotive Design**. In: Joint EUROPT-OMS Meeting 2007: 2nd Conference on Optimization Methods & Software and 6th EUROPT Workshop on Advances in Continuous Optimization, July 4-7, 2007, in Prague, Czech Republic. EurOpt, 2007

Thole, Clemens-August; Nikitina, Lialia; Nikitin, Igor: **Multiobjective Optimization with DesParO**. In: OPTIMUS Worldwide Users Meeting: June 25-26, 2007, Leuven, Belgium; proceedings. Noesis Solutions, 2007

Trottenberg, Ulrich: Siehe nächste Seite.

Wäldrich, Oliver; Ziegler, Wolfgang; Papaspyrou, A.; Wieder, P.; Yahyapour, R.; CoreGrid; Institute on Resource Management and Scheduling: **Novel Approaches for Scheduling in D-Grid – Towards an Interoperable Scheduling Framework**. CoreGrid, 2007 (CoreGrid technical report TR-0122)

Weidmann, Ernst-Peter; Bauer, Walter; Maihöfer, Martin; Scholl, Uwe: **A new CFD and thermal analysis method based on MpCCI**. In: Wolf, Klaus Dieter (Hrsg.); Fraunhofer-Institut Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI: 8th MpCCI User Forum 2007: February 13-14, 2007, Sankt Augustin; Proceedings. Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2007, S. 18-27

Weuffel, Thomas: **Anbindung des Meta Scheduling Service an die UNICORE 5 Resource Broker Schnittstelle**. Sankt Augustin, Fachhochschule Bonn-Rhein-Sieg, 2007

Wieder, Philipp; Wäldrich, Oliver; Ziegler, Wolfgang; CoreGrid; Institute on Resource Management and Scheduling: **Advanced Techniques for Scheduling, Reservation and Access Management for Remote Laboratories and Instruments**. CoreGrid, 2007 (CoreGrid technical report TR-0078)

Wolf, Armin; Zimmermann, M.; Hofmann-Apitius, Martin: **Alternative to consensus scoring: a new approach toward the qualitative combination of docking algorithms**. In: Journal of chemical information and modeling—Online 47 (2007), 3, S. 1036-1044

Wolf, Klaus: **News around MpCCI Development and Projects**. In: Wolf, Klaus Dieter (Hrsg.); Fraunhofer-Institut Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI: 8th MpCCI User Forum 2007: February 13-14, 2007, proceedings. Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2007, S.10-17

Wolf, Klaus Dieter (Hrsg.); Fraunhofer-Institut Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI: **8th MpCCI User Forum 2007: Proceedings**. Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2007

Zimmermann, Marc; Maaß, Astrid; Schwichtenberg, Horst; Wolf, Antje; Jacq, Nicolas; Breton, Vincent; Hofmann-Apitius, Martin: **Design of New Plasmepsin Inhibitors: a Virtual High Throughput Screening Approach on the EGEE Grid**. In: Journal of chemical information and modeling 47 (2007), 5, S. 1818-1828

Vorträge im SCAI-Kolloquium Wissenschaftliches Rechnen

**Beiträge von Ulrich Trottenberg
mit Bezug zum Jahr der Mathematik 2008:**

**Mathematik ist Technologie – ein Beitrag zur
Innovations-Initiative aus Fraunhofer-Sicht**
(Hrsg., mit H. Neunzert). Fraunhofer-Institut
ITWM, Fraunhofer-Institut SCAI 2007

Mathematik ist Technologie. Essay, Fraunhofer-
Magazin 01/2008, Zeitschrift für Forschung,
Technik und Innovation, München

Das SUPRENUM-Projekt, ein Rückblick.
Und:
**Zeitfenster Höchstleistungsrechnen, am
Beispiel des Großforschungsprojekts
SUPRENUM 1984-1989.** In: Die Informatikfor-
schung in Deutschland (B. Reuse, Hrsg.), Springer
2008

Multigrid for Industrial Applications (mit T.
Clees). In: Notes on Numerical Fluid Mechanics
and Multidisciplinary Design (NNFM), Vol. 100,
(E. Hirschel, Hrsg), Springer 2008

**Rechnen für Fortschritt und Zukunft –
Innovationen brauchen Mathematik** (mit D.
Prätzel-Wolters). In: Jahresbericht 2007 der
Fraunhofer-Gesellschaft, München 2007

**Mathematics for Everyday Life – Introduction
to the Special Theme** (mit J. Väänänen).
In: ERCIM News 73, 2008

**Mit Algorithmen zur Produktreife (Exploiting
algorithms for production maturity).** In: Wirt-
schaftsstandort Region Köln/Bonn, Europäischer
Wirtschaftsverlag 2008

Mathematik – Schlüssel zu Innovationen (mit
D. Prätzel-Wolters). Beilage zum Fraunhofer-Ma-
gazin/Jahr der Mathematik 04/2008, Zeitschrift
für Forschung, Technik und Innovation, München

**Begeisterung durch Anwendungen und
Algorithmen.** In: MNU – Der mathematische und
naturwissenschaftliche Unterricht, 61/4, 2008

Prof. Dr. Gabriel Wittum: **Modellierung und
Simulation von Prozessen aus Wissenschaft und
Technik.** Universität Heidelberg (24. Januar 2007)

Prof. Rene de Borst: **Trends in computatio-
nal failure mechanics: multiple scales, multi-
physics and discontinuities.** TU Delft (7.02.2007)

Dr. Thomas Soddemann: **DEISA – Distributed
European Infrastructure for Supercomput-
ing Applications.** Rechenzentrum der MPG in
Garching (7. März 2007)

Prof. Dr. Ulrich Ruede: **High End Computing for
Large Scale Simulations.** Universität Erlangen-
Nürnberg (12. März 2007)

Prof. Dr. Norbert Kroll: **Numerische Strömungs-
simulation: Aktuelle Entwicklungen und An-
wendungen im Institut für Aerodynamik und
Strömungstechnik des DLR.** Braunschweig
(19. März 2007)

Prof. Dr. Ralf Hiptmair: **Preconditioning Tech-
niques for H (curl, omega) – Elliptic Boundary
Value Problems.** ETH Zürich (16. April 2007)

Prof. Dr. Folkmar Bornemann: **Thema mit Varia-
tionen: Nichtlineare PDEs, Modelle und
Numerik.** TU München (25. April 2007)

Prof. Dr. Kurt Kremer: **Generic Model for Fluid
Bilayer Membranes and Block Copolymers.**
Max Planck Institut für Polymerforschung Mainz
(30. Mai 2007)

Prof. Dr. Ulrich Langer: **Computational Electro-
magnetics: From the Simulation to the
Optimization.** Universität Linz (11. Juni 2007)

Prof. Dr. Claus-Dieter Munz: **Discontinuous
Galerkin Verfahren hoher Ordnung für Evoluti-
onsgleichungen.** Universität Stuttgart (18.06.2007)

Prof. Dr. Roland Faller: **Multiscale Modelling
of structure and phase behavior in soft
condensed matter.** University of California, Davis
USA (11.07.2007)

Mathias Pütz: **Supercomputing in der nächsten
Generation – aus Sicht der IBM.** IBM Deutsch-
land, Mainz (4. September 2007)

Graduierungsarbeiten

Diplomarbeiten an der Universität zu Köln

Anghel, Michaela: **Untersuchung zur Diskretisierung und zum Einsatz von algebraischen Mehrgitterverfahren bei den Maxwellgleichungen.**

Förster, Malte: **Untersuchungen ausgewählter algebraischer Mehrgittervarianten auf der Basis von Cluster-Vergrößerungsstrategien.**

Kaiser, Olga: **AMG in der Erdölreservoirsimulation – Vergleich und Bewertung von Lösungsansätzen.**

Kniedler, Florian: **Verlustfreie Kompression von Fließkommazahlen.**

Kraus, Jiri: **Konvergenzuntersuchungen in der numerischen Wettervorhersage.**

Lidzba, Josua: **Kompression der Geometrie und der Konnektivitäten von Crashdaten unter Verwendung des Verfahrens »Topological Surgery«.**

Oeckerath, André: **RBF-basierte Interpolation zwischen Finite-Element-Gittern in der Crash-Umform-Simulation.**

Rettenmeier, Matthias: **Zwei Strategien zur verlustfreien Kompression von Simulationsergebnissen.**

Riepl, Mareike: **Pareto-Front-Bestimmung bei mehrdimensionalen Optimierungsproblemen der Fahrzeugentwicklung.**

Rosenthal, Susanne: **Vergleich und Bewertung verschiedener aktueller AMG-Ansätze.**

Schneiders, Felix: **Numerische Konvergenzuntersuchungen am Lokal-Modell des Deutschen Wetterdienstes.**

Steffes-lai, Daniela: **Echtzeit-Toleranzanalyse eines RBF-Metamodells mit Anwendung in der Fahrzeugentwicklung.**

Faroughi, Arash; Faroughi, Roozbeh: **Integration von VO-Management-Technologien in UNICORE.** (Fachhochschule Köln)

Kral, Peter: **Chemical Structure Recognition via an expert system guided graph exploration.** (Universität München)

Lenzen, Christoph: **Gekoppelte Simulation von Rissbildung: mit Extended Finite Elements und Moleküldynamik.** (Universität Bonn)

Master-Arbeiten am Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT)

Gattermayer, Tobias: **SCAView: Annotation and Visualization System for Knowledge Discovery.**

Gündel, Michaela: **ArrayProcess: Work Flow for Microarrays.**

Ou, Chia-Hao: **Extension of chemoCR: from reconstruction of chemical molecules to reconstruction of whole chemical reactions.**

Shahid, Mohammad: **Large Scale Virtual High Throughput Screening (vHTS) on an Optical High Speed Testbed.**

Faroughi, Arash: **Integration von VO-Management Technologien in UNICORE.** (Fachhochschule Gummersbach)

Bachelor-Arbeiten an der Fachhochschule Bonn-Rhein-Sieg in Sankt Augustin

Ginzel, Sebastian: **Runtime Prediction von Textmining-Applikationen im Grid am Beispiel von ProMiner.**

Haupt, Carina: **Entwicklung eines Validierungs-Modul für CSR: Praxisprojektbericht.**

Weuffel, Thomas: **Anbindung des MetaScheduling Service an die UNICORE 5 Resource Broker Schnittstelle.**

Lehrtätigkeiten

Fluck, Juliane; Friedrich, Christoph M.; Hofmann-Apitius, Martin: **Life Science Knowledge Discovery**. Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT), Sommersemester 2007

Hofmann-Apitius, Martin: Vorlesung und Übung **Biological Databases**. Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT), Wintersemester 2007/08

Hofmann-Apitius, Martin: **Seminar Current Topics in Life Science Informatics**. Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT), Sommersemester 2007 / Wintersemester 2007/08

Hofmann-Apitius, Martin; Corinna Kolárik: Praktikum **Life Science Informatics Software**. Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT), Wintersemester 2007/08

Hofmann-Apitius, Martin; Wolf, Antje: Blockpraktikum **Introduction to Computational Chemistry**. Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT), Wintersemester 2007/08

Lob, Marc: **Informatik I für Elektrotechnik**. Fachhochschule Bonn-Rhein-Sieg, Sommersemester 2007 / Wintersemester 2007/08

Lob, Marc: **Mathematik I für Elektrotechnik**. Fachhochschule Bonn-Rhein-Sieg, Sommersemester 2007

Lorentz, Rudolph: **Vorlesung Datenkompression**. Universität zu Köln, Sommersemester 2007

Maaß, Astrid: Vorlesung **Grundlagen der Biochemie für Biomathematiker**. Fachhochschule Koblenz-Remagen, Wintersemester 2007/08

Reith, Dirk: **Einführung in die statistische Mechanik**. Fachhochschule Koblenz-Remagen, Sommersemester 2007

Reith, Dirk: **Modellbildung und Simulation mechatronischer Systeme**. Fachhochschule Bonn-Rhein-Sieg, Wintersemester 2007/08

Trottenberg, Ulrich; Clees, Tanja; Wienands, Roman: **Seminar über algebraische Mehrgit-terverfahren**. Universität zu Köln, Sommersemester 2007

Trottenberg, Ulrich; Lorentz, Rudolph; Wienands, Roman: **Seminar über mathematische Bildverarbeitung**. Universität zu Köln, Wintersemester 2007/08

Trottenberg, Ulrich; T. Küpper, R. Seydel, C. Tischendorf: **Oberseminar Numerische und angewandte Mathematik**. Universität zu Köln, Wintersemester 2007/08

Trottenberg, Ulrich: **SCAI-Kolloquium Wissenschaftliches Rechnen**. Universität zu Köln, Wintersemester 2007/08

Trottenberg, Ulrich: **Anleitung zu wissenschaftlichen Arbeiten**. Universität zu Köln, Wintersemester 2007/08

Trottenberg, Ulrich: **Vorlesung und Übung Algorithmische Mathematik**. Universität zu Köln, Sommersemester 2007

Wienands, Roman: **Vorlesung und Übung Iterative Lösung großer Gleichungssysteme**. Universität zu Köln, Wintersemester 2007/08

Wienands, Roman: **Vorlesung und Übung Finite Elemente**. Universität zu Köln, Sommersemester 2007

Zimmermann, Marc; Wolf, Antje: **Computer-Aided Medicinal Chemistry**. Bonn-Aachen International Center for Information Technology, Sommersemester 2007

Mitarbeit in Gremien

Trottenberg, Ulrich:

- Vorsitzender des Institutsleiterrates des Fraunhofer-Institutszentrums Schloss Birlinghoven
- Mitglied des Koordinierungskreises des BMBF für das Jahr der Mathematik 2008
- Mitglied des Scientific Advisory Committees der »T-Systems Solutions for Research GmbH«
- Mitglied des Steering Committee der Networked European Software and Services Initiative (NESSI)
- Beirat des C.F. Gauss Minerva Center for Scientific Computation, Vorsitzender
- Techn.-wissenschaftlicher Beirat der PALLAS GmbH, Vorsitzender
- ERCIM Board of Directors
- Wissenschaftlicher Beirat des Potsdam-Instituts für Klimafolgenforschung (PIK)
- Nationaler Koordinierungsausschuss des Wissenschaftsrats zur Beschaffung und Nutzung von Höchstleistungsrechnern
- Vorstand des Kuratoriums der Wissenschaftspressekonferenz

Friedrich, Christoph M.:

- Program Committee World Conference on Computational Intelligence 2008 (WCCI 2008), Joint Conference IJCNN 08, FUZZ-IEEE 08 and CEC 08
- Program Committee Bionetics 2007
- Program Committee IEEE World Congress on Computational Intelligence 2007 (CEC 2007)
- Program Committee 5th International Workshop on Biological Data Management (BIDM 2007)
- Program Committee IEEE Symposium on Computational Intelligence in Bioinformatics and Computational Biology 2007 (CIBCB 2007)
- Mitglied IEEE Bioinformatics and Bioengineering Technical Committee (IEEE BBTC)

Hofmann-Apitius, Martin:

- Program Committee Healthrid 2007, Geneva
- Program Committee Healthgrid 2008, Chicago

Krapp, Michael:

- ERCIM-News, Editorial Board
- Deutscher Journalisten-Verband (DJV)
- Presseclub Bonn
- Bonner Medienclub

Stüben, Klaus:

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

Ziegler, Wolfgang:

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

Informationen zur Anreise

Mit dem Auto

Von Norden: Fahren Sie auf der A 59 bis Abfahrt 41, Bonn-Beuel Ost. Dort biegen Sie rechts auf die B 56 und fahren bis Sankt Augustin-Hangelar.

Von Nordosten: Fahren Sie auf der B 56 bis Sankt Augustin-Hangelar.

Von Süden: Fahren Sie auf der A 3 bis zum Autobahnkreuz 5, Bonn/Siegburg. Von dort biegen Sie auf die A 560 bis zur Ausfahrt 3, Siegburg. Dort biegen Sie auf die B 56 und fahren bis Sankt Augustin-Hangelar.

Von Westen: (A 59, Ausfahrt 41, Beuel-Ost) Fahren Sie auf der B 56 bis Sankt Augustin-Hangelar.

An der Ampelkreuzung Bonner Straße/ Konrad-Adenauer-Straße (Wegweiser nach Schloss Birlinghoven und Bonn-Hoholz) biegen Sie in die Konrad-Adenauer-Straße. Die Einfahrt zum Schloss Birlinghoven befindet sich nach drei Kilometern auf der linken Seite.

Mit der Bahn

Vom Hauptbahnhof Bonn beträgt die Fahrzeit mit dem Taxi etwa 20 Minuten.

Mit der Buslinie 634 (Richtung Hoholz) ab Platz B3 fahren Sie bis zur Endstation Schloss Birlinghoven. Die Linie fährt meist alle 20 Minuten, die planmäßige Fahrzeit beträgt 35 Minuten.

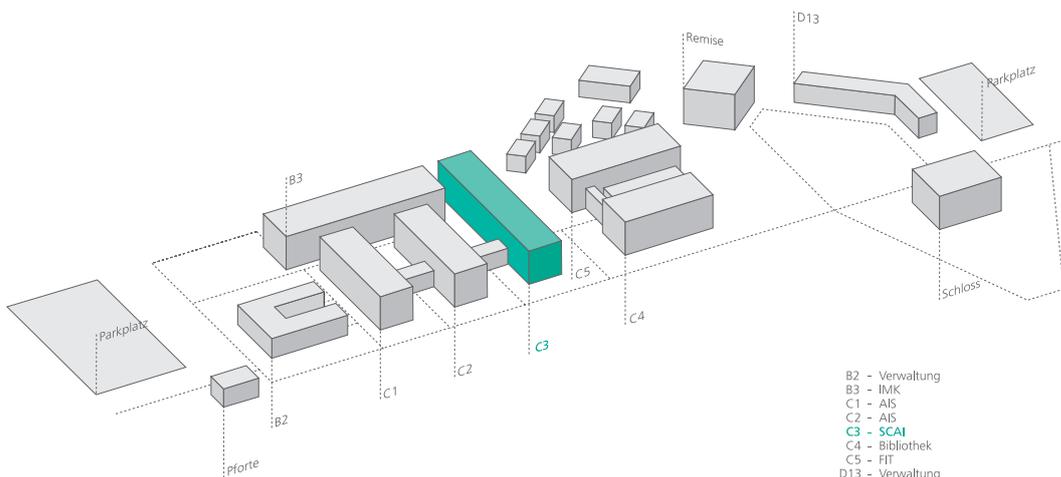
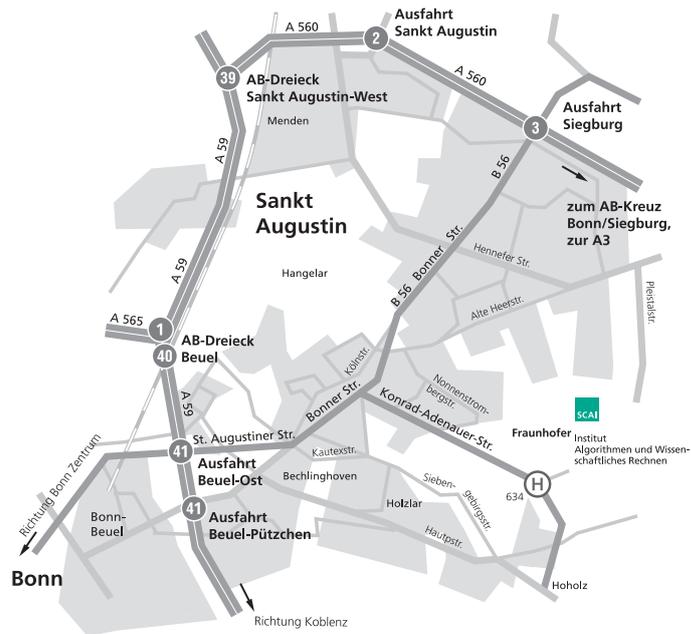
Vom ICE-Bahnhof Siegburg/Bonn beträgt die Fahrzeit mit dem Taxi etwa 20 Minuten.

Mit dem Flugzeug

Vom Flughafen Köln/Bonn beträgt die Fahrzeit per Taxi etwa 25 Minuten.

Mit dem Bus 670 fahren Sie nach Bonn Hauptbahnhof. Der Bus fährt wochentags alle 20 Minuten, die planmäßige Fahrzeit beträgt 30 Minuten. Weiter siehe »Bahn«.

Von den Flughäfen Düsseldorf oder Frankfurt fahren Sie per InterCity oder ICE nach Bonn Hauptbahnhof oder ICE-Bahnhof Siegburg/Bonn. Weiter siehe »Bahn«.



Adressen

Fraunhofer-Institut für Algorithmen und
Wissenschaftliches Rechnen SCAI

Schloss Birlinghoven
53754 Sankt Augustin

Telefon 02241 14-2500
Fax 02241 14-2460

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

Institutsleitung

Prof. Dr. Ulrich Trottenberg
(Institutsleiter)

Telefon 02241 14-2760
Fax 02241 14-2460

ulrich.trottenberg@scai.fraunhofer.de

Dr. Johannes Linden
(stellvertretender Institutsleiter)

Telefon 02241 14-2910
Fax 02241 14-2102

johannes.linden@scai.fraunhofer.de

Planung und Controlling

Dipl.-Math. Carl Vogt

Telefon 02241 14-2692
Fax 02241 14-2095

carl.vogt@scai.fraunhofer.de

Marketing und Kommunikation

Dipl.-Journ. Michael Krapp

Telefon 02241 14-2935
Fax 02241 144-2935

michael.krapp@scai.fraunhofer.de

Impressum

© 2008

Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissen-
schaftliches Rechnen SCAI, Sankt Augustin

Alle Rechte vorbehalten.

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

Warennamen werden ohne Gewährleistung der
freien Verwendbarkeit benutzt.

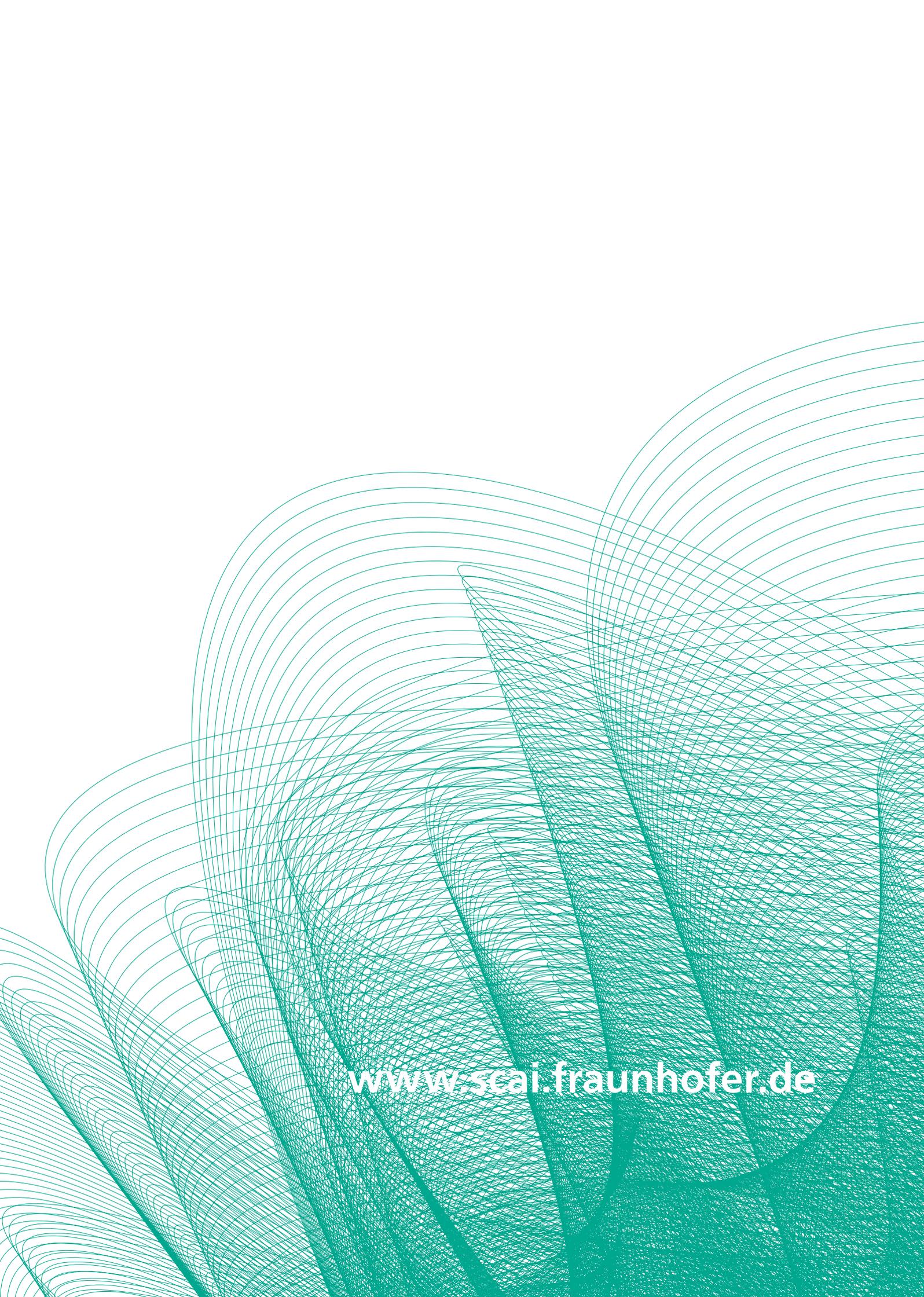
Der Herausgeber bedankt sich bei den Kooperati-
onspartnern für die überlassenen Bilder.

Redaktion

Dipl.-Journ. Michael Krapp
Ralf Strobel

Gestaltung

Dipl.-Des. Till Martensmeier
Bianca Backert



www.scai.fraunhofer.de