



JAHRESBERICHT
2010

TITELBILD

*Ansicht des SCAI-Produktions-
clusters mit 48 Rechenknoten.*

INHALT

Vorwort	4
Das Institut im Profil	6
Das Institut in Zahlen	8
Forschung und Lehre	10
Die Fraunhofer-Gesellschaft	12
Mitgliedschaft in Verbänden der Fraunhofer-Gesellschaft	13
SCALights	14
Innovative Software für die industrielle Anwendung	22
Simulationsanwendungen	24
Mit Multiphysics näher an der Realität	26
Simulation der Interaktion des Lichtbogens mit Kunststoffen	29
Optimierung in der Strömungsmechanik	30
Effiziente Nutzung hochparalleler Systeme	32
Software »Wolf2PACK« erlaubt den Blick durch die atomare Lupe	34
Numerische Software	36
Kompression von Simulationsdaten beschleunigt die Produktentwicklung	38
DIFFU erkennt Zusammenhänge aus Simulationsdaten automatisch	40
Schwankungen in den Griff bekommen	42
Algebraische Mehrgitterverfahren	44
Löser für schnellere numerische Simulationen in der Flugzeugindustrie	45
Bioinformatik	46
Semantische Suche in biomedizinischen Fachtexten	48
Von Aneurysmen zu pädiatrischen Krankheiten	50
Neuroallianz-Konsortium forscht an der Medizin der Zukunft	51
Guter Geschmack wird messbar	52
Software für Sicherheit gentechnisch hergestellter Biopharmazeutika	54
Lösungen für das Management von Grid- und Cloud-Infrastrukturen	55
elasticLM – klarer Vorteil auch beim Rechnen in Wolken	56
Optimierung	58
Automatische Verschachtelung und Verschnittoptimierung	60
Mit PackAssistant dichter packen	62
Virtual Material Design	64
Numerische Simulation in der Nanotechnologie	67
Praktische Mathematik begeistert junge Leute	68
Publikationen	70
Graduierungsarbeiten	79
Lehrtätigkeiten	80
Informationen zur Anreise	82
Adressen, Impressum	83



Prof. Dr. Ulrich Trottenberg



Prof. Dr. Michael Griebel

Sehr geehrte Damen und Herren,

mit dem Jahr 2010 hat ein neues Kapitel in der Entwicklung des Fraunhofer-Instituts für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI begonnen: Prof. Dr. Michael Griebel von der Universität Bonn ist in die Institutsleitung eingetreten. In einer Übergangsphase wird er das SCAI gemeinsam mit Professor Ulrich Trottenberg leiten.

Professor Griebel wird die bisherigen erfolgreichen Arbeits- und Geschäftsfelder des Instituts kompetent weiterführen und ausbauen, zugleich aber mit neuen Forschungsthemen und neuen universitären Verbindungen – für Partner und Kunden sowie für Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter – viele neue Chancen eröffnen. Das Institut verfügt somit über eine Anbindung an zwei Lehrstühle, einen an der Universität zu Köln und einen an der Universität Bonn. Der Lehrstuhl an der Universität Bonn bedeutet eine enge Verbindung zum Institut für Numerische Simulation, zum Sonderforschungsbereich »Singuläre Phänomene und Skalierung in mathematischen Modellen« und zum Exzellenzcluster Mathematik – Hausdorff Center for Mathematics (HCM).

In diesem Zusammenhang hat im August 2010 die neue SCAI-Abteilung »Virtual Material Design« ihre Arbeit am Institut für Numerische Simulation aufgenommen. Es ist die erste Fraunhofer-Außenstelle an der Universität Bonn. Die Fraunhofer-Forscher an der Uni widmen sich der Simulation neuer Materialien auf der Nano-, Mikro- und Makro-Skala. Dabei nutzen sie Hochleistungs-Parallelrechner und moderne numerische Multiskalen-Methoden, die Quantenmechanik, Moleküldynamik und Kontinuumsmechanik verbinden. Weitere Geschäftsfelder, etwa auf dem Gebiet der Finanznumerik, sind in Planung.

An der Universität zu Köln befindet sich zum einen der Lehrstuhl Trottenberg, zum anderen unterhält Fraunhofer SCAI dort seit 2007 eine sehr erfolgreiche Außenstelle, welche

die Arbeiten der Abteilung »Numerische Software« bündelt und neue Kontakte zu Unternehmen im prosperierenden Großraum Köln herstellt.

Kennzeichen des Instituts SCAI ist nach wie vor eine starke Fokussierung auf die Entwicklung mathematischer und informatischer Algorithmen und darauf basierender Softwareprodukte, die über die scapos AG vermarktet werden.

Nach den sehr erfolgreichen Jahren 2006 bis 2008 hat die weltweite Wirtschaftskrise im Jahr 2009 auch SCAI nicht verschont. Zum Glück handelte es sich jedoch nur um einen kurzfristigen Umsatzrückgang. In Übereinstimmung mit der auflebenden Konjunktur sind die Erträge im Jahre 2010 wieder stark gestiegen, im Bereich der Wirtschaftserträge sogar auf einen Spitzenwert. Sie übertrafen mit 3,9 Millionen Euro noch den des bisherigen Rekordjahres 2008. Der Anteil der Wirtschaftserträge am Budget des Instituts lag bei rund 43 Prozent. Die Weiter- und Neuentwicklungen innovativer, forschungsintensiver Softwareprodukte werden auch die Perspektiven des Instituts in den nächsten Jahren bestimmen. Rund um das Produktgeschäft wird das Angebot an Dienstleistungen in Forschung und Entwicklung weiter ausgebaut.

Außerdem investiert das Institut massiv in seine Rechner-Infrastruktur, um seinen Kunden neue Dienstleistungen im High-Performance-Computing und Cloud Computing anbieten zu können. Kunden sollen außerdem einige der erfolgreichen Anwendungen über das Internet als »Software as a Service« direkt auf den Hochleistungsrechnern des Instituts ausführen können.

Seit dem Jahr der Mathematik 2008 engagiert sich SCAI im Zusammenhang mit der MINT-Initiative auch für einen modernen, lebensnahen Mathematikunterricht: In enger Kooperation mit der Universität zu Köln hat SCAI Module entwickelt, die junge Menschen für Mathematik und Naturwissenschaften begeistern sollen und gleichzeitig die Bedeutung der Mathe-

matik für die heutige und zukünftige Gesellschaft deutlich machen.

Aus aktuellen Anlass gibt es noch zwei besonders gute Nachrichten zu erwähnen: Erstens sind das SCAI und das Institut für Numerische Simulation (INS) im Dezember 2010 von NVIDIA als erstes offizielles deutsches CUDA-Forschungszentrum ausgewählt worden. Ziel der Arbeiten des Zentrums ist es, massiv parallele, zur Ausführung auf mehreren Grafikkarten hin optimierte Software zur Strömungssimulation und zur Simulation der Molekulardynamik zu entwickeln. Zweitens erhielt die SCAI-Abteilung »Optimierung« im März 2011 den renommierten und mit 25 000 Euro dotierten Innovationspreis für Klima und Umwelt (IKU). Die vom Bundesumweltministerium und dem Bundesverband der Deutschen Industrie e.V. (BDI) vergebene Auszeichnung würdigt die Ressourcen- und Energieeinsparungspotenziale der Softwareprodukte AutoNester (Automatische optimierte Anordnung von Schnittbildern auf Textilien, Leder und Blechen) und PackAssistant (optimierte Verpackung von Bauteilen in Containern).

Wir danken allen unseren Kunden und Partnern für Ihre Unterstützung und Zusammenarbeit und wünschen Ihnen eine spannende Lektüre!



Prof. Dr. Ulrich Trottenberg



Prof. Dr. Michael Griebel



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 simuliert und optimiert industrielle Anwendungen, entwickelt innovative mathematische und informatische Algorithmen und darauf basierende Softwareprodukte und Services für Produktentwurf, Prozessentwicklung und Produktion, und bietet Berechnungen auf Hochleistungscomputern. Ziele sind kürzere Entwicklungszeiten, kostengünstigere Experimente und optimierte Verfahrensabläufe. Ein methodisches Charakteristikum des Instituts ist dabei das enge Zusammenspiel zwischen Numerik, Optimierung, Stochastik und Informatik.

Der Jahresetat des Fraunhofer-SCAI beträgt rund zehn Millionen Euro. Die Vernetzung in nationalen und internationalen Forschungsprojekten sichert die Ausrichtung der Angebote an führenden Standards.

Verbindungen zur universitären Forschung bestehen über die Lehrstühle der Institutsleiter Prof. Dr. Ulrich Trottenberg an der Universität zu Köln und Prof. Dr. Michael Griebel an der Universität Bonn.

Institutsleitung	Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, Prof. Dr. Michael Griebel	02241 14-2760
Geschäftsfelder		
Simulationsanwendungen	Dr. Johannes Linden, Klaus Wolf (stv.), Dr. Anton Schüller (stv.)	02241 14-2910
Numerische Software	Clemens-August Thole, Dr. Klaus Stüben (stv.)	02241 14-2739
Bioinformatik	Prof. Dr. M. Hofmann-Apitius, Dr. Marc Zimmermann (stv.)	02241 14-2802
Optimierung	Dr. Ralf Heckmann	02241 14-2810
Virtual Material Design	Dr. Jan Hamaekers	02241 14-2463
Zentrale Bereiche		
Planung und Controlling	Carl Vogt	02241 14-2692
Marketing und Kommunikation	Michael Krapp	02241 14-2935
IT-Infrastruktur	Horst Schwichtenberg	02241 14-2577
Außenstelle Bonn	Dr. Jan Hamaekers	0228 733173
Außenstelle Köln	Clemens-August Thole	0221 4706082



1 Kuratoriumssitzung vom 30. Oktober 2009, von links:

O. Krämer-Fuhrmann (SCAI), Dr. B. Thomas (stv. Vors. Kuratorium SCAI, Continental AG), Dr. Volker Tippmann (Fraunhofer-Gesellschaft, Forschungsplanung), Prof. Dr. Michael Griebel (Institut für Numerische Simulation Universität Bonn), Prof. Dr. Marion Schick (Fraunhofer-Vorstand Personal und Recht), Dr. Tanja Clees (SCAI), Carl Vogt (SCAI), Prof. Dr. Norbert Szyperski (Vorsitzender Kuratorium SCAI, InterScience GmbH, Universität zu Köln), Dr. Daniel Keesman (Kurator SCAI, August Faller KG), Stephan Springstube (SCAI), Clemens August Thole (SCAI), Prof. Dr. Ulrich Trottenberg (Institutsleiter des Fraunhofer SCAI), Prof. Dr. Dr. h.c. Tassilo Küpper (Kurator SCAI, Universität zu Köln), Eva-Maria Frauenholz (Fraunhofer-Gesellschaft), Prof. Dr. M. Hofmann-Apitius (SCAI), Dr. Claus Axel Müller (Kurator SCAI, Gauss Centre for Supercomputing).

Kuratorium

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

Dr. B. Thomas, stellvertretender Vorsitzender
Continental AG

Touraj Gholami, *BMW AG*

Dr. Daniel Keesman, *August Faller KG*

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

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

Dr. Claus Axel Müller
Gauss Centre for Supercomputing e. V.

Dr. Stefan Reimann-Andersen (seit 2010)

Spin-Off

Die scapos AG wurde auf Initiative des Fraunhofer-Instituts für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI Anfang 2009 gegründet, um Marketing und Vertrieb der SCAI-Produkte zu verstärken. Die scapos AG, an der die Fraunhofer-Gesellschaft beteiligt ist, bietet ihre Dienstleistungen darüber hinaus auch anderen Fraunhofer-Instituten und Forschungsorganisationen an.

scapos AG
Schloss Birlinghoven
53754 Sankt Augustin

Telefon 02241 14-2820
Fax 02241 14-2817

info@scapos.com
www.scapos.com

Externe Erträge

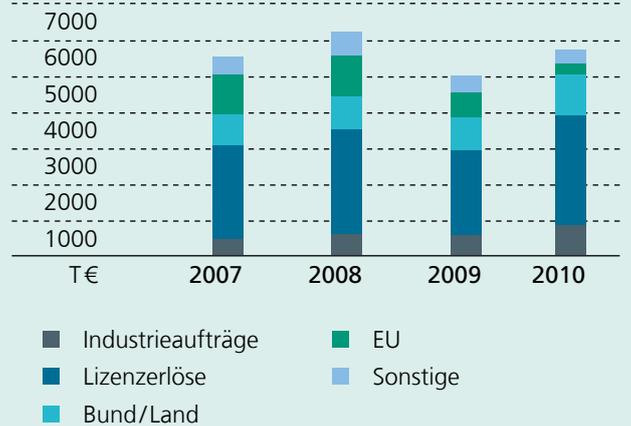
Das Fraunhofer SCAI hat im Jahr 2010 die bislang höchsten Wirtschaftserträge erzielt. Mit 3,9 Millionen Euro lagen sie noch über denen des bisherigen Spitzenjahres 2008. Der Anteil der Wirtschaftserträge am Budget des Instituts lag damit bei rund 43 Prozent.

Spitzenerträge erzielte die Vermarktung der Softwareprodukte AutoNester (Automatische Anordnung von Schnittbildern auf Stoffbahnen), PackAssistant (optimierte Verpackung von Bauteilen in Behälter), MpCCI (Software zur Kopplung führender industrieller Simulationsprogramme), SAMG (Softwarepaket zur hocheffizienten numerischen Lösung großer, dünnbesetzter Matrixprobleme) und FEMZIP (Software zur Kompression numerischer Simulationsergebnisse).

Anteil der Wirtschaftserträge am Budget



Externe Erträge

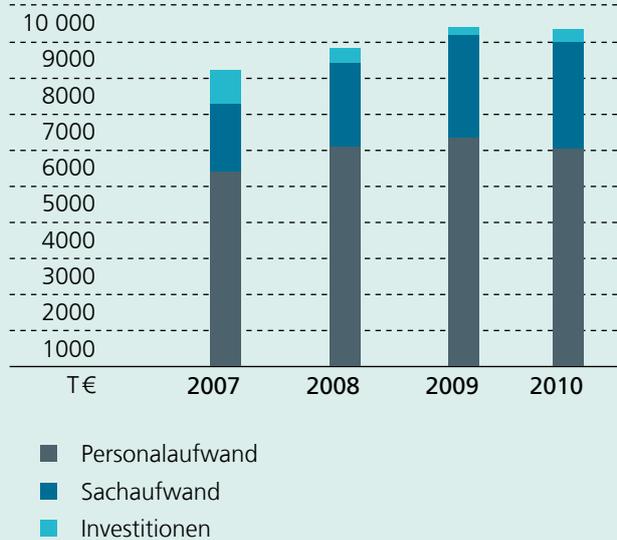


Aufwand

Der Betriebsaufwand des Instituts steigert sich seit dem Jahr 2005 kontinuierlich. Auch im Jahr 2010 stieg der Gesamtaufwand. Bei relativ konstanten Ausgaben für Personal erhöhten sich die Sachkosten.

Gegenüber dem Jahr 2009 haben sich die Investitionen mehr als verdoppelt. Unter anderem wurden neue Komponenten für Hochleistungsrechner angeschafft.

Aufwand



Personal

Ende 2010 beschäftigte das Institut rund 90 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, 30 wissenschaftliche Hilfskräfte, fünf Doktoranden sowie sechs Auszubildende. SCAI plant die Zahl der Stellen bis 2012 deutlich zu erhöhen, unter anderem durch den Eintritt von Professor Griebel in die Institutsleitung und durch die neue Abteilung »Virtual Material Design« an der Universität Bonn.

Personalentwicklung





FORSCHUNG UND LEHRE

Institut für Numerische Simulation (INS), Universität Bonn

Das INS ist ein mathematisches Forschungsinstitut mit den Schwerpunkten Wissenschaftliches Rechnen sowie Numerische Analysis und Numerische Simulation. Das Institut versteht sich als Brücke zwischen Mathematik und Informatik. Es entwickelt in seiner Forschungsarbeit Werkzeuge zur numerischen Simulation in Natur- und Ingenieurwissenschaften, Geowissenschaften, Medizin, Life Sciences sowie Wirtschaft und Finanzindustrie. www.ins.uni-bonn.de

Mathematisches Institut, Universität zu Köln

An der Universität zu Köln befindet sich zum einen der Lehrstuhl Trottenberg, zum anderen unterhält Fraunhofer SCAI dort seit 2007 eine Außenstelle, die die Arbeiten der Abteilung Numerische Software bündelt. Themen der Abteilung NUSO sind unter anderen die Entwicklung von Methoden und Software zur Analyse, Auswertung und Optimierung von Simulationsergebnissen. Die universitäre Lehre ist eng mit den Themen der Außenstelle verzahnt. Mit der Forschungsgruppe von Prof. Dr. Caren Tischendorf besteht eine enge Kooperation in mehreren Forschungsprojekten. www.mi.uni-koeln.de

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

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



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.

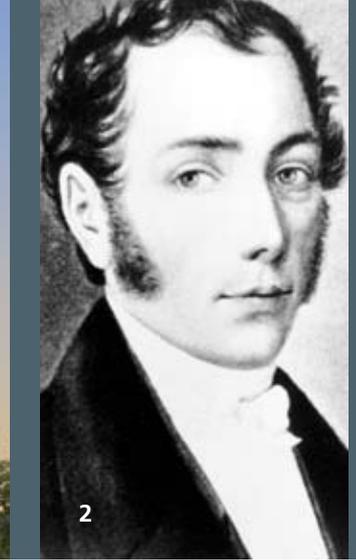
Direkte Verbindungen über die Lehrstühle der Institutsleiter bestehen mit folgenden Universitäten:

- Universität zu Köln: Prof. Dr. Ulrich Trottenberg
- Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn: Prof. Dr. Michael Griebel

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



1



2

DIE FRAUNHOFER-GESELLSCHAFT

Forschen für die Praxis ist die zentrale Aufgabe der Fraunhofer-Gesellschaft. Die 1949 gegründete Forschungsorganisation betreibt anwendungsorientierte Forschung zum Nutzen der Wirtschaft und zum Vorteil der Gesellschaft. Vertragspartner und Auftraggeber sind Industrie- und Dienstleistungsunternehmen sowie die öffentliche Hand.

Die Fraunhofer-Gesellschaft betreibt in Deutschland derzeit mehr als 80 Forschungseinrichtungen, davon 60 Institute. Mehr als 18 000 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, überwiegend mit natur- oder ingenieurwissenschaftlicher Ausbildung, bearbeiten das jährliche Forschungsvolumen von 1,65 Milliarden Euro. Davon fallen 1,40 Milliarden Euro auf den Leistungsbereich Vertragsforschung. Über 70 Prozent dieses Leistungsbereichs erwirtschaftet die Fraunhofer-Gesellschaft mit Aufträgen aus der Industrie und mit öffentlich finanzierten Forschungsprojekten. Knapp 30 Prozent werden 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.

Internationale Niederlassungen sorgen für Kontakt zu den wichtigsten gegenwärtigen und zukünftigen Wissenschafts- und Wirtschaftsräumen.

Mit ihrer klaren Ausrichtung auf die angewandte Forschung und ihrer Fokussierung auf zukunftsrelevante Schlüsseltechnologien spielt die Fraunhofer-Gesellschaft eine zentrale Rolle im Innovationsprozess Deutschlands und Europas. 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 Leistungsfähigkeit, verbessern die Akzeptanz moderner Technik und sorgen für Aus- 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, an Hochschulen, in Wirtschaft und Gesellschaft. Studierenden eröffnen sich an Fraunhofer-Instituten wegen der praxisnahen Ausbildung und Erfahrung hervorragende Einstiegs- und Entwicklungschancen in Unternehmen.

1 *Das »Fraunhofer-Haus« – die Zentrale der Fraunhofer-Gesellschaft in München.*

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

Vorstand:

Prof. Dr.-Ing. habil. Prof. e.h. mult. Dr. h. c. mult.

Hans-Jörg Bullinger

(Präsident)

Prof. Dr. rer. nat.

Ulrich Buller

Prof. (Univ. Stellenbosch)

Dr. rer. pol. Alfred Gossner

Fraunhofer-Gesellschaft zur Förderung der angewandten Forschung e.V.

Hansastraße 27c

80686 München

www.fraunhofer.de



MITGLIEDSCHAFT IN VERBÜNDEN DER FRAUNHOFER-GESELLSCHAFT

Fraunhofer-Allianz Numerische Simulation

In der Fraunhofer-Allianz »Numerische Simulation von Produkten, Prozessen« bündeln zwanzig Fraunhofer-Institute ihre Kompetenzen, die sich mit der Entwicklung und Verbesserung von Simulationsverfahren beschäftigen. Die Simulation von Produkten und Prozessen spielt heute eine entscheidende Rolle in allen Phasen des Lebenszyklus eines Produkts, von der modellgestützten Materialentwicklung über die Simulation des Herstellprozesses bis zum Betriebsverhalten und der Platzierung des Produkts am Markt.

www.nusim.fraunhofer.de

Fraunhofer-Allianz Cloud Computing

Unternehmen, die Cloud Technologien einsetzen möchten, finden in der 2010 gegründeten Fraunhofer-Allianz Cloud Computing sowohl in industriellen als auch in wissenschaftlichen Forschungsk Kooperationen Lösungen aus einer Hand. Die Allianz bündelt die Kompetenzen des Fraunhofer SCAI und fünf weiterer Institute.

www.cloud.fraunhofer.de

Fraunhofer-Verbund IuK-Technologie

Der IuK-Verbund entwickelt Strategien und Visionen für mittelfristige Forschungsschwerpunkte. Mitgliedsinstitute werden bei Technologietransfer und Forschungsmarketing unterstützt. Durch internationale Forschungsprogramme sind die IuK-Institute weltweit mit Unternehmen und wissenschaftlichen Einrichtungen vernetzt.

www.iuk.fraunhofer.de



SCAILIGHTS

Gründung der scapos AG (1)

Das Fraunhofer SCAI gründet mit Beteiligung der Fraunhofer-Gesellschaft die scapos AG. Der Name »scapos« steht für »scientific applications, optimization and simulation« und verweist auf die Software-Produkte des SCAI. Die neue Firma soll unter anderem den Vertrieb ausbauen und auch anderen Instituten ihre Dienstleistungen im Marketing anbieten. »Das Fraunhofer SCAI ist seit vielen Jahren mit seiner einzigartigen Software aus Simulation und Optimierung überaus erfolgreich am Markt vertreten«, sagt Institutsleiter Prof. Dr. Ulrich Trottenberg. »Mit der Gründung der scapos AG möchten wir unsere Spitzenstellung in der Entwicklung und Vermarktung von Software innerhalb Fraunhofer weiter ausbauen. Dadurch, dass der Vertrieb aus dem Institut ausgelagert wird, entstehen neue Forschungsspielräume für SCAI.«

Dipl.-Math. Karl Solchenbach, zuvor Direktor für Cluster Computing bei Intel, übernimmt das Amt des Vorstands der AG. Vorsitzender des Aufsichtsrates ist Prof. Dr. Ulrich Trottenberg. Stellvertretender Vorsitzender ist Professor Dr. Dr. h.c. Norbert Szyperski, ehemaliger Vorstandsvorsitzender der GMD – Forschungszentrum Informationstechnik GmbH und Vorsitzender des SCAI-Kuratoriums.

Ab April 2011 übernimmt Dr. Guy Lonsdale, zuvor General Manager der Software & Services Research Division bei NEC, das Amt des Vorstands.

01.2009

Jarke übernimmt von Trottenberg den Vorsitz des Fraunhofer-Institutszentrums (2)

Nach drei Jahren im Amt übergibt Prof. Dr. Ulrich Trottenberg den Vorsitz des Institutsleiterrates am Fraunhofer-Institutszentrum Schloss Birlinghoven an Prof. Dr. M. Jarke. Jarke leitet das Fraunhofer-Institut für Angewandte Informationstechnik. Der Fraunhofer-Campus auf Schloss Birlinghoven ist einer der größten deutschen Standorte für Forschung auf dem Gebiet der Angewandten Mathematik und Informationstechnik. Unter dem Dach des Institutszentrums erforschen und entwickeln rund 500 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in drei Instituten und zwei Institutsteilen anderer Fraunhofer-Institute anwendungsnahe Lösungen für Wirtschaft und Gesellschaft.

02.2009



Kongress »Mathematik in der Praxis« (3)

Mathematiker aus Wirtschaft, Wissenschaft und Politik diskutieren in Berlin darüber, wie das Image der Mathematik in der allgemeinen Öffentlichkeit und in der Schule verbessert werden kann. Die Fraunhofer-Institute ITWM und SCAI haben zum Kongress »Mathematik in der Praxis: Zukunft gestalten – Angewandte Mathematik« nach Berlin eingeladen. Mathematik sollte als »Schlüsselfaktor für die technologische und ökonomische Entwicklung unseres Landes« gesehen werden, sagt Cornelia Quennet-Thielen, Staatssekretärin im Bundesministerium für Bildung und Forschung, die den Kongress zusammen mit Fraunhofer-Präsident Prof. Dr. Hans-Jörg Bullinger eröffnet. Die Fraunhofer-Institute setzen sich dafür ein, dass der Praxisbezug der Mathematik im Schulunterricht und im Studium von Lehrern verstärkt wird. Die enorme Relevanz der Mathematik für Technik und Gesellschaft spiegelt sich derzeit in den Ausbildungsinhalten kaum wider.

Die Vorträge, Diskussionen, Workshops und Ausstellungen des Kongresses liefern nicht nur dem Fachpublikum einen Einblick in die Thematik, sondern ermöglichen auch den vielen auf Einladung von SCAI und ITWM angereisten Schülerinnen und Schülern praktische Mathematik zu erleben.

03.2009

Trottenberg ist neuer Präsident im Verein der Freunde und Förderer des Forschungszentrums Jülich (4)

Prof. Dr. Ulrich Trottenberg übernimmt die Präsidentschaft des Vereins der Freunde und Förderer des Forschungszentrums Jülich. Das FZ Jülich zählt zu den größten Forschungseinrichtungen Europas und betreibt Forschung in den Bereichen Gesundheit, Energie, Informationstechnologie in der interdisziplinären Kombination mit Kompetenzen in der Physik und im Supercomputing. Trottenberg möchte mit seinem Engagement die positive Entwicklung des Forschungszentrums fördern und zahlreiche Aktionen gemeinsam mit dem Verein der Freunde und Förderer gestalten. Die inhaltliche Nähe der Forschungsthemen des Fraunhofer SCAI und des Forschungszentrums bietet für beide Einrichtungen Vorteile: Durch die Präsidentschaft Trottenbergs besteht die Chance, die Verbindung der Forschungseinrichtungen weiter zu intensivieren.

03.2009



Hohe Auszeichnung für den Erfinder der Petri-Netze: Petri erhält den Computer Pioneer Award (1)

Die IEEE Computer Society zeichnet Prof. Dr. Carl Adam Petri für die Erfindung der »Petri-Netze« mit dem »Computer Pioneer Award« aus. Die Auszeichnung nimmt Petri in einer Feierstunde auf Schloss Birlinghoven entgegen. Die Organisation des Institute of Electrical Electronics Engineers in den USA ehrt ausgewählte Wissenschaftler für bedeutende Beiträge in der Forschung und Entwicklung der Informatik, die mindestens 15 Jahre zurückliegen. Die »Petri-Netze«, die Petri in seiner Dissertation 1962 entwickelte, stellen eine Methode zur Beschreibung »nebenläufiger« Prozesse dar. Mit dieser Theorie prägte Petri nicht nur ein ganzes Gebiet der Informatik, sondern beeinflusste auch weitere Disziplinen wie Mathematik, Physik und Chemie. Bis zu seiner Emeritierung im Jahr 1990 war Petri gemeinsam mit Fritz Krückeberg und Ulrich Trottenberg Leiter des GMD-Instituts für Methodische Grundlagen der Informationstechnik, dem heutigen Fraunhofer SCAI.

Carl Adam Petri stirbt nach langer Krankheit im Alter von 84 Jahren am 2. Juli 2010 in Siegburg.

Fraunhofer-Truck macht Station in Bonn – Professor Ulrich Trottenberg hält unterhaltsame Mathematikvorlesung auf dem Bonner Bottlerplatz (2)

Anlässlich ihres 60-jährigen Jubiläums zeigt die Fraunhofer-Gesellschaft in einer fahrenden Ausstellung die Innovationen von morgen. Der Fraunhofer-Truck bietet Besuchern mit spannenden Exponaten eine Entdeckungsreise durch die Welt der angewandten Wissenschaft. Der Truck macht bei seiner Tournee quer durch Deutschland auch auf dem Friedensplatz in Bonn halt. Das Fraunhofer SCAI präsentiert sich mit ausgewählten Forschungsarbeiten der Bonner Öffentlichkeit.

Spannende Einblicke in die Wissenschaft bieten unterhaltsamen Mathe-Vorlesungen auf dem Bonner Bottlerplatz. Hier greifen Mathematiker Alltagsfragen mit mathematischem Bezug auf. Ulrich Trottenberg spricht zum Thema »MP3, Handy, Navi, Scheckkarte – mathematische Algorithmen im Alltag«. In seinem Vortrag plädiert Trottenberg für neue Elemente im Mathematikunterricht: Lebensnahe Algorithmen und Anwendungen, mit denen wir täglich zu tun haben (MP3, RSA-Verschlüsselung, Wetter und Klimaprognose usw.), können zu mitreißenden Themen des Mathematikunterrichts werden und Schüler und Lehrer begeistern.

03.2009

05.2009



Großes Interesse am ersten Sommerpraktikum für Schülerinnen und Schüler am Fraunhofer SCAI (3)

15 Schülerinnen und Schüler können erstmals an einem Sommerpraktikum am Fraunhofer SCAI teilnehmen. Das Interesse an dem Angebot ist überwältigend, so dass nur ein Teil der Bewerber ausgewählt werden kann. Den Jugendlichen wird zwei Wochen lang ein Blick hinter die Kulissen des Instituts geboten. Anhand von Praxisbeispielen lernen die 15- bis 20-jährigen die Methoden des Wissenschaftlichen Rechnens kennen. Einführungen in verschiedene Rechenverfahren stehen ebenso auf dem Lehrplan wie Grundzüge des Programmierens und Einblicke in wichtige Anwendungen der Numerischen Simulation. Abgerundet wird der Sommerkurs durch ein buntes Rahmenprogramm, in dem SCAI-Forscher ihre Arbeiten vorstellen sowie über Studium und Berufswahl berichten. Da das Institut jungen Menschen aktuelle mathematische Probleme verständlich machen möchte, werden von nun an weitere Praktikumsurse angeboten.

06.2009

Professor Michael Griebel tritt die Leitung des Fraunhofer-Instituts SCAI an (4)

Prof. Dr. Michael Griebel von der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn tritt die Institutsleitung des Fraunhofer SCAI an. Er führt das Institut zunächst gemeinsam mit Prof. Dr. Ulrich Trottenberg. Mit Griebel, der zugleich Direktor des Instituts für Numerische Simulation an der Universität Bonn ist, sollen die Kooperation zwischen SCAI und der Universität gestärkt und die Kompetenzen beider Institutionen gebündelt werden. Dies äußert sich im Aufbau neuer Arbeitsgruppen um den Forschungsschwerpunkt »Virtual Material Design«. Zu diesem Zweck wird zusätzlich zur Außenstelle des Fraunhofer SCAI an der Universität zu Köln eine weitere Außenstelle an der Universität Bonn aufgebaut. Ziel ist eine enge Dreieckskooperation von Universität zu Köln, Universität Bonn und Fraunhofer SCAI.

Foto: Prof. Dr. Marion Schick, ehemals Vorstandsmitglied der Fraunhofer-Gesellschaft und heutige Kultusministerin von Baden-Württemberg, überreicht Prof. Dr. Griebel seine Berufungsurkunde.

01.2010



Fraunhofer SCAI und WestLB setzen sich für praxisnahen Mathematikunterricht ein (1)

Fraunhofer SCAI engagiert sich für einen praxisnahen Mathematikunterricht. Das Institut entwickelt Unterrichtsmodelle, die mathematische Hintergründe an modernen, lebenspraktischen Beispielen (MP3-Player, Navi im Auto oder die EC-Karte beim Einkaufen) erklären. Mit Unterstützung der WestLB-Stiftung Zukunft NRW soll ein Pilotprojekt Lehrkräfte mit Materialien für spannende, innovative Unterrichtseinheiten ausstatten.

Da die Innovations- und Wirtschaftskraft Deutschlands zunehmend von der Aufstellung in den Fächern Mathematik, Informatik, Naturwissenschaften und Technik abhängt, engagiert sich SCAI-Institutsleiter Prof. Dr. Ulrich Trottenberg dafür, den Trend der rückläufigen Qualifikationen auf dem Gebiet der Mathematik umzukehren. Das Pilotprojekt soll innovative Lehrmodule zur Schulung des mathematisch-algorithmischen Denkens an den Schulen in Nordrhein-Westfalen erproben.

02.2010

Fraunhofer SCAI auf dem B-IT-Wirtschaftsforum in Bonn – Zusammenarbeit verstärkt (2)

Durch die enge Verzahnung wissenschaftlicher Ausbildung mit der Wirtschaft leistet das Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT) in Bonn wichtige Impulse für Innovationen in Nordrhein-Westfalen. Dies ist das Resümee des zweiten B-IT-Wirtschaftsforums am 10. März in Bonn. Prof. Dr. Ulrich Trottenberg betonte in seiner Rede die Funktion der Einrichtung als Katalysator für den Wissenstransfer von der Forschung in die Praxis: »Das B-IT leistet einen entscheidenden Beitrag dazu, dass Softwareprototypen aus dem akademischen Bereich schnell in vermarktbarere Produkte überführt werden.«

Das B-IT ist eine gemeinsame Einrichtung der Universität Bonn, der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen, der Hochschule Bonn-Rhein Sieg und der Institute des Fraunhofer-Institutszentrums Schloss Birlinghoven. Die von Prof. Dr. M. Hofmann-Apitius geleitete Abteilung Bioinformatik des SCAI beteiligt sich am internationalen Master-Studiengang »Life Science Informatics« (LSI).

Foto (v. l.): Prof. Dr. Martin Hofmann-Apitius (B-IT und Fraunhofer SCAI), Dr. Jens Baganz (Staatssekretär für Wirtschaft, Mittelstand und Energie des Landes NRW), Prof. Dr. Ulrich Trottenberg und Prof. Dr. Armin B. Cremers (Gründungsdirektor des B-IT und Prorektor der Universität Bonn) sehen das B-IT auf Kurs für die Zukunft.

03.2010



SCAI und Microsoft sorgen für Interoperabilität von Anwendungen auf Hochleistungsrechnern (3)

Fraunhofer SCAI und Microsoft haben die nächste Phase ihrer Kooperation auf dem Gebiet des High-Performance-Computing (HPC) begonnen. Nach der erfolgreichen Portierung von Open-Source-Simulationssoftware auf Windows HPC Server steht nun die Interoperabilität im Mittelpunkt. Es sollen Erfahrungen gesammelt werden, wie es sich mit der Interoperabilität paralleler Anwendungen und Codes auf Windows- und Linux-Rechenclustern verhält. »Bisher handelt es sich vielfach um eine Glaubensfrage, wenn es um Windows oder Linux geht, so dass manche Kunden Vorbehalte gegen die eine oder die andere Plattform hegen. Wir arbeiten mit daran, dass solche Barrieren über eine bessere Interoperabilität aufgelöst werden«, sagt Prof. Dr. Ulrich Trottenberg. Dies sei ein wichtiger Schritt, um beide Betriebssysteme zusammenzubringen, die viele Unternehmen ohnehin zusammen benutzen. Die Auswirkungen der Interoperabilität im Hinblick auf den Schutz geistigen Eigentums ist ein weiterer wichtiger Aspekt der Zusammenarbeit.

Foto (v. l.): Setzen ihre erfolgreiche Zusammenarbeit fort: Wolfgang Dreyer (Product Solution Managers für High Performance Computing, Microsoft Deutschland), Horst Schwichtenberg (Leiter IT, Fraunhofer SCAI), Prof. Dr. Ulrich Trottenberg und Sebastian Tischer (Director Sales Central Eastern Europe and France, Microsoft).

Fraunhofer-Multiphysics-Konferenz bestätigt großen Bedarf der Industrie an gekoppelten Simulationen (4)

Die erste internationale Fraunhofer-Konferenz für Multiphysics-Simulationen am 22. und 23. Juni in Bonn zeigt den großen Bedarf der Industrie an praktikablen Lösungen für multidisziplinäre Simulationen. Ein Fazit der vom Fraunhofer SCAI im Auftrag der Fraunhofer-Allianz Numerische Simulation ausgerichteten Veranstaltung ist, dass die steigenden Anforderungen an Genauigkeit und Realitätsnähe die Kombination von Simulationsmodellen aus unterschiedlichen Disziplinen in einer Anwendung erfordern. Multidisziplinäre Simulationen werden inzwischen in verschiedenen Gebieten von Forschung und industrieller Anwendung genutzt: bei den erneuerbaren Energien ebenso wie in der Medizintechnik, der Elektrotechnik sowie dem Automobil- und Maschinenbau.

Die renommierten Referenten sowie die Konferenzteilnehmer aus Industrie und angewandter Forschung stimmen darin überein, dass noch sehr viel Forschungsarbeit zur Validierung der einzelnen und gekoppelten Modelle, zur Beschleunigung multidisziplinärer Simulationsverfahren und zur besseren Bedienbarkeit im täglichen Einsatz zu leisten ist.



Fraunhofer SCAI auf Bonner Wissenschaftsnacht (1)

Die Fraunhofer-Institute SCAI, Naturwissenschaftlich-Technische Trendanalysen INT und Intelligente Analyse- und Informationssysteme IAIS geben bei der 7. Wissenschaftsnacht in Bonn spannende Einblicke in die Welt der angewandten Forschung. Auf dem Bonner Münsterplatz wird den Besucherinnen und Besuchern die Möglichkeit geboten, die Wissenschaft hautnah mitzuerleben. Getreu dem Motto »EnergieGeladen« fordern viele Experimente und Exponate die aktive Beteiligung der Besucher. Dabei steht die Zukunft der Energie, deren Erzeugung sowie deren Einsparung im Mittelpunkt des Interesses. Der PackAssistant des Fraunhofer SCAI lädt Interessierte mit gutem räumlichen Vorstellungsvermögen zum Tüfteln ein und veranschaulicht so die Funktion der Software. Durch ideales Verpacken werden Transport- und Lagerkosten und damit auch Energie gespart.

06.2010

Fraunhofer bei »Nacht der Technik« (2)

In der »Nacht der Technik« machen einige Unternehmen aus der Region Köln/Bonn Technik erlebbar. Auch das Fraunhofer-Institutszentrum Schloss Birlinghoven ist mit einem Stand an der FH Köln vertreten. Ebenso wie der Flughafen Köln/Bonn, der Chemiapark Leverkusen, die Deutsche Bahn oder T-Mobile gewährt das Institutszentrum den Besuchern einen Blick hinter die Kulissen. Durch Interaktivität und spannende Präsentationsformen soll komplexe Technik- und Forschungsarbeit für jedermann verständlich werden. Neben SCAI präsentieren auch das Fraunhofer-Institut für Angewandte Informationstechnik FIT sowie das Institut für Intelligente Analyse- und Informationssysteme IAIS einen ansprechenden Querschnitt ihrer Arbeiten auf dem Gebiet der Angewandten Mathematik und Informationstechnik.

06.2010



3



4

Fraunhofer SCAI und INS sind CUDA-Forschungszentrum (3)

Aufgrund ihrer führenden Forschungsarbeiten auf dem Gebiet der Numerischen Simulation und Parallelisierung von Simulationscodes sind das Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI und das Institut für Numerische Simulation (INS) der Universität Bonn von NVIDIA als eines der ersten deutschen CUDA-Forschungszentren ausgewählt worden. Die Forschungsarbeiten zur Parallelisierung bereits vorhandener Simulationscodes zur Ausführung auf Rechnern mit mehreren Grafikkarten (GPUs) leitet Prof. Dr. Michael Griebel, Direktor des INS und Institutsleiter des Fraunhofer SCAI.

»Unser Ziel ist es, eine massiv parallele, zur Ausführung auf mehreren Grafikkarten hin optimierte Software zur Strömungssimulation und zur Simulation der Molekulardynamik zu entwickeln«, sagt Griebel. »Von der Lösung der auf diesem Weg aufgeworfenen Herausforderungen des Hochleistungsrechnens profitieren unsere Industriekunden und unsere wissenschaftlichen Partner gleichermaßen.«

10.2010

Rechenzentrum für »Green-IT« entsteht im Tiefgeschoss des Fraunhofer SCAI (4)

Im Tiefgeschoss des Fraunhofer SCAI entsteht ein neues Rechenzentrum für das Institutszentrum Birlinghoven. Dabei werden Konzepte der energiesparenden, sogenannten »Green-IT« umgesetzt: Rechenanlagen, die sich bislang in den Instituten befinden, werden konzentriert und lassen sich somit wesentlich leichter kühlen. Die enorme Abwärme der Rechner wird in ein Blockheizkraftwerk eingespeist und somit zur Heizung der Büroräume genutzt. Bei vielen Forschern steht außerdem künftig kein Rechner mehr unter dem Schreibtisch, sondern sie beziehen ihre Rechenleistung aus dem Rechenzentrum.

Das über fünf Millionen Euro teure Bauvorhaben wird mit 4,5 Millionen Euro aus dem Konjunkturprogramm II der Bundesregierung gefördert.

Foto (v. l.): Anstoßen zum Richtfest: Prof. Dr. Stefan Wrobel (Institutsleiter des Fraunhofer IAIS), Dipl.-Ing. Frank Krings (Projektleiter IZB), Ulrich Beste (Architekt) und Prof. Dr. Ulrich Trottenberg

11.2010

INNOVATIVE SOFTWARE FÜR DIE INDUSTRIELLE ANWENDUNG

AutoCompactor

AutoCompactor ist eine Software zur Kompaktierung zweidimensionaler Schnittbilder. Die Software verdichtet sowohl automatisch mit einer Software erzeugte Schnittbilder als auch von Hand gefertigte Schnittbilder. Dabei nutzt AutoCompactor die gleiche Programmierschnittstelle (API) wie AutoNester.

AutoNester

AutoNester-T optimiert die automatische Anordnung von Schnittbildern auf Stoffbahnen. Die Software verschachtelt die Teile optimal und minimiert so den Verschnitt. Führende Unternehmen der Bekleidungs- und Polstermöbelindustrie nutzen die Software zur Optimierung ihrer Produktion. AutoNester-L erzeugt automatisch optimierte Schnittbilder auf Häuten und kommt in der Leder- und Automobilindustrie zum Einsatz.

CutPlanner

CutPlanner ist ein Softwarepaket zur automatischen Produktionsplanung (Cut Order Planning) in der Textil verarbeitenden Industrie.

PackAssistant

PackAssistant ist die führende Software zur optimierten Verpackung baugleicher Bauteile in Containern. Zeitaufwändiges Herumprobieren mit komplexen Geometrien und nicht immer optimalen Ergebnissen gehört damit der Vergangenheit an. PackAssistant bietet Verpackungsplanern und Lagerarbeitern eine schnelle, intuitive Lösung.

MapLib

Die MapLib ist eine Bibliothek in C++, mit der Anwender eigene CAE-Umgebungen erweitern können. Sie bietet Funktionen zur Übertragung und zum Abgleich physikalischer Größen zwischen Simulationsmodellen mit unterschiedlicher Netzauflösung. Als Rechenkern von MpCCI ist die MapLib darauf ausgelegt, auch größte Rechenmodelle effizient verarbeiten zu können.

MpCCI

MpCCI koppelt Simulationsprogramme und löst auf diesem Weg multidisziplinäre Probleme. Die Software unterstützt die führenden industriellen Simulationswerkzeuge. Dank MpCCI haben Unternehmen gemeinsam mit SCAI bereits schwierige Aufgaben durch gekoppelte Simulation bewältigen können.

SCAIMapper

Neuentwicklungen im Fahrzeugbau zielen auf größtmögliche Sicherheit bei reduziertem Gewicht. Umfangreiche Simulationen helfen, Bauteile und Herstellungsprozesse zu optimieren. In der Entwicklungsphase dienen Crash-Berechnungen mit speziellen Simulationsprogrammen dazu, die Fahrzeugsicherheit zu beurteilen. Die verwendeten Modelle sind jedoch idealisiert und weichen von späteren Fahrzeugen ab. Um die Aussagekraft der Crash-Berechnungen zu verbessern, wird die Simulation des Herstellungsprozesses mit der Crash-Simulation verknüpft.

RCE

Das Remote Component Environment (RCE) ist eine universelle Integrationsplattform für verteilte Ingenieursanwendungen. Es verbirgt die Komplexität heterogener und verteilter Systeme mittels wohldefinierter Benutzerschnittstellen und verbessert so die Sicherheit beim Zugriff auf verteilte Daten und Dienste.

FEMZIP

FEMZIP komprimiert numerische Simulationsergebnisse. Daten aus Aufprall-Simulationen in der Automobilindustrie komprimiert die Software so genau, wie es der Nutzer festlegt. Trotz Reduzierung der Datenmenge bleiben wichtige Informationen auch nach der Dekompression erhalten.

DIFF-CRASH

DIFF-CRASH analysiert die Zuverlässigkeit von Crashesimulationen in der Automobilindustrie. Physikalische Verzweigungen beim Entwurf und numerische Instabilitäten im Simulationspaket bedingen eine sehr empfindliche Abhängigkeit der Simulationsergebnisse von kleinsten Modelländerungen oder Materialschwankungen. DIFF-CRASH findet kritische Strukturbereiche und gibt Hinweise zur Stabilisierung.

DesParO

Simulationen technischer Prozesse und Produkte hängen in der Praxis von vielen Parametern ab, etwa Geometrie-, Material- und Prozessparametern. Anwender sind an einer Einstellung dieser Parameter interessiert, die eine möglichst gute Auslegung des Produktes oder die Steuerung des Fertigungsprozesses erlaubt. DesParO ist eine Sammlung effizienter Algorithmen zur computergestützten Optimierung solcher industrieller Simulationsanwendungen.

SAMG

SAMG ist ein Softwarepaket zur hocheffizienten numerischen Lösung großer, dünnbesetzter Matrixprobleme. Solche Probleme findet man in den Anwendungsgebieten Strömungs- und Strukturmechanik, Ölreservoir- und Grundwassersimulation, Prozess- und Devicesimulation, in der Halbleiterphysik sowie der Schaltkreissimulation. SAMG nutzt moderne hierarchische Verfahrensansätze (algebraische Mehrgittermethodik, AMG) und ist daher besonders zur Lösung umfangreicher Klassen diskretisierter elliptischer Differentialgleichungen geeignet.

chemoCR

chemoCR (Tool for Chemical Compound Reconstruction) erkennt chemische Strukturformeln und deren Abbildungen in wissenschaftlichen Texten. Die Software wandelt die Abbildungen in ein Format um, mit dem ein Computer die Informationen aus den Formelabbildungen verarbeiten kann.

elasticLM

Mit elasticLM bietet SCAI ein sicheres Verfahren für die Lizenzierung kommerzieller Software und für das Management von Lizenzen in verteilten IT-Infrastrukturen, wie Grid- und Cloud-Computing. Das Produkt richtet sich in erster Linie an Softwarehäuser, die damit ihre Anwendungen vor nicht autorisierter Nutzung schützen wollen.

SCAView

SCAView ist eine Knowledge-Discovery-Software für die Life Sciences. Sie erlaubt das schnelle Auffinden aggregierter Informationen aus großen Textmengen. Dazu integriert SCAView die Information von ProMiner mit den zugehörigen Texten und erlaubt eine semantische Suche.

ProMiner

Die Software ProMiner identifiziert Gen- und Proteinnamen in wissenschaftlichen Texten. Die Identifikation basiert auf automatisch erzeugten Wörterbüchern. Das Wörterbuch von ProMiner umfasst beispielsweise zu »Homo Sapiens« bereits 18 000 Einträge und 270 000 Synonyme.

Tremolo-X

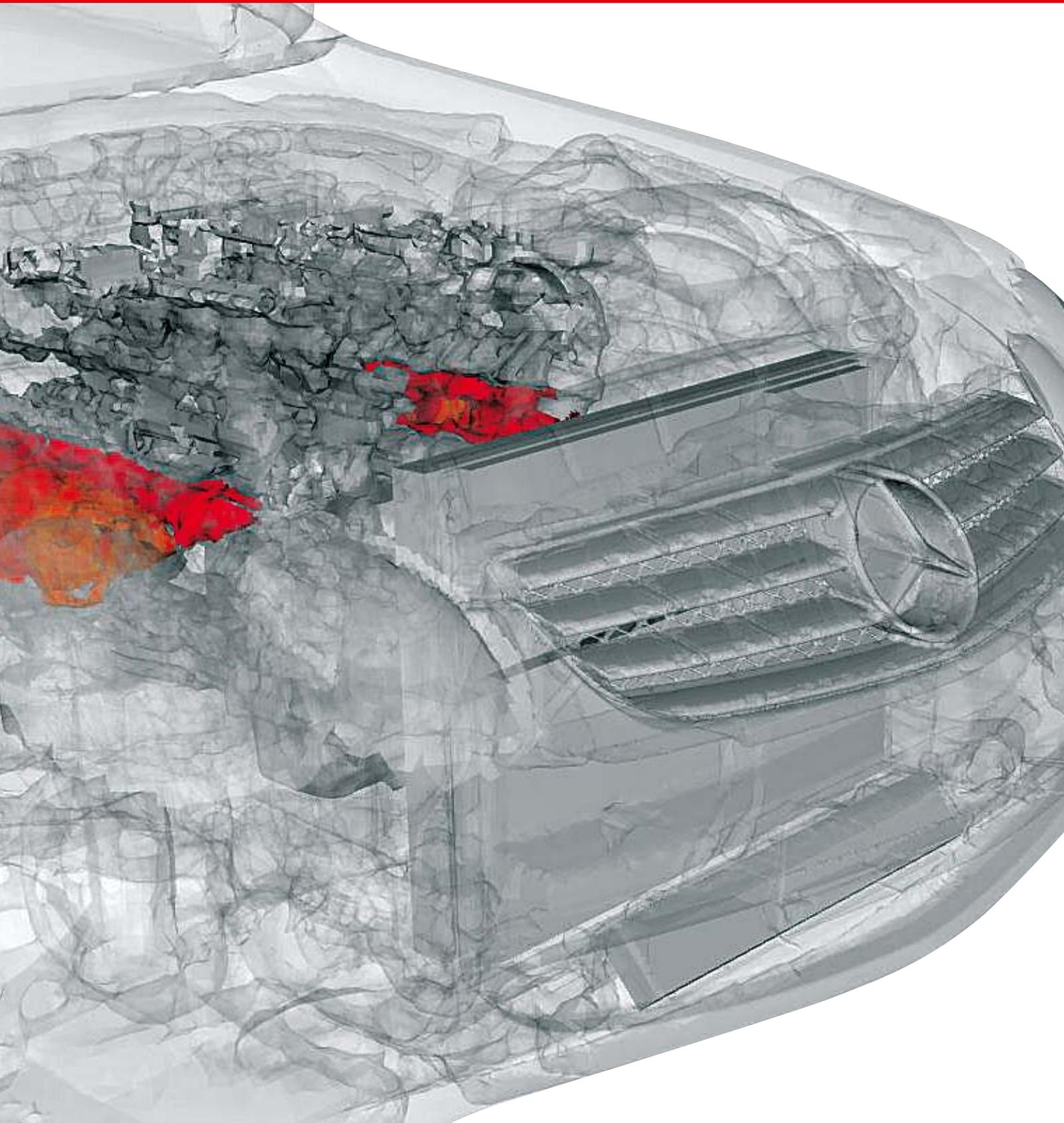
Tremolo-X ist ein Softwarepaket zur numerischen Simulation in der Moleküldynamik. Tremolo-X wurde bereits erfolgreich in vielen Projekten aus unterschiedlichen Anwendungsbereichen eingesetzt, zum Beispiel in der Nanotechnologie, den Materialwissenschaften, der Biochemie und der Biophysik.

Zuordnung der Produkte zu den SCAI-Geschäftsfeldern:

- Optimierung
- Simulationsanwendungen
- Numerische Software
- Bioinformatik
- Virtual Material Design



Die Produkte des Fraunhofer SCAI
werden von der scapos AG vertrieben:
www.scapos.com



SIMULATIONSANWENDUNGEN

Wachsende Anforderungen an Qualität, Verlässlichkeit, Sicherheit oder auch Energieeffizienz komplexer technischer Produkte und gleichzeitig der Zeitdruck, Produkte schnell in den Markt zu bringen, lassen die virtuelle Produktentwicklung zu einem entscheidenden Instrument im industriellen Entwicklungsprozess werden. Der mathematisch-physikalischen Modellbildung und der numerischen Simulation kommt dabei eine Schlüsselrolle zu. Mit diesen Methoden entstehen technische Produkte und Komponenten weitgehend im Computer, ihre Eigenschaften können virtuell getestet und optimiert werden. Damit lässt sich aufwändiges Experimentieren mit oft teuren Prototypen reduzieren, Zeit und Kosten werden gespart.

Im Geschäftsfeld Simulationsanwendungen liegt ein Schwerpunkt auf den sogenannten Multiphysics-Simulationen. Der Begriff steht für Simulationen, die physikalische Modelle aus unterschiedlichen Gebieten miteinander kombinieren, um einander beeinflussende Effekte genauer im Rechner nachbilden zu können. Beispiele sind die Interaktion von Strömung und Struktur, die Kopplung von Wärmeleitung und Strahlung mit Strömung oder die Simulation von Gasströmungen unter dem Einfluss elektromagnetischer Felder.

Eine zentrale Entwicklung in diesem Bereich ist die Kopplungssoftware MpCCI (Mesh Based Parallel Code Coupling Interface). Sie erlaubt es, verschiedene physikalische Modelle und entsprechende Simulationssoftware miteinander zu einer echten Multiphysics-Simulation zu verbinden. Mit MpCCI bietet SCAI eine komplette und flexibel einsetzbare Simulationsumgebung für Multiphysics-Simulationen, in der sich fast alle führenden kommerziellen Simulationscodes miteinander koppeln lassen. Die Software, die das Institut gemeinsam mit seiner Ausgründung scapos AG vertreibt, wird ständig fortentwickelt und im Funktionsumfang erweitert. Sie ist heute die führende offene Simulationsplattform für die Code-Kopplung und wird weltweit von zahlreichen Kunden aus Industrie und Wissenschaft erfolgreich eingesetzt. Neben der Softwareentwicklung unterstützt SCAI seine Kunden auch direkt in ihren Simulationsaufgaben, oft in gemeinsamen Forschungs- und Entwicklungsprojekten. Die Experten des Instituts bringen ihr Know-how in physikalischer und mathematischer Modellierung sowie in Algorithmenentwicklung in Simulationssoftware ein und führen Modellrechnungen durch.

Immer realitätsnähere Simulationen mit komplexen physikalischen Modellen stellen dabei aber auch hohe und wachsende Anforderungen an Rechenleistungen. Solche Rechenleistungen werden grundsätzlich von modernen Parallelrechnern unterschiedlicher Bauart und Architektur zur Verfügung gestellt. Dabei reicht die Bandbreite von preiswerten Desktop-Lösungen bis zum Supercomputer. Die wichtige Aufgabe für Forschung und Entwicklung, der sich SCAI mit seiner HPC-Gruppe (High Performance Computing) stellt, ist es, diese zunächst nur »theoretisch« verfügbare Rechenleistung möglichst effektiv für die konkreten Anwendungen der Kunden nutzbar zu machen. Das Institut bietet seinen Kunden dazu Analyse, Portierung und Optimierung ihrer proprietären Software auf die unterschiedlichsten Zielsysteme.

Eine besondere Herausforderung hinsichtlich Modellierung, Algorithmik, Softwareentwicklung und auch Rechenleistung stellen molekulare Simulationen dar. Sie ermöglichen zum Beispiel in der Material- und Wirkstoffforschung ein genaues Verständnis des mikroskopischen Verhaltens von Stoffsystemen. Die Arbeitsgruppe Computational Chemical Engineering entwickelt solche Methoden und berechnet Systemeigenschaften für Anwendungen im Bereich der »weichen oder kondensierten Materie«. Beispiele dafür sind Thermoplaste (Polymere), Schmiermittel (Ionische Liquide) oder Zellmembranen (Glycolipide). Ein aktueller Schwerpunkt ist die Modellierung hochgenauer Kraftfelder, die in molekulardynamischen Simulationen zum Einsatz kommen. Die Arbeitsgruppe entwickelt als erstes Produkt das Programm »Wolf2Pack«.

Abteilungsleiter

Dr. Johannes Linden

Telefon +49 2241 14-2910

johannes.linden@

scai.fraunhofer.de

stv. Abteilungsleiter

Dr. Anton Schüller

Telefon +49 2241 14-2572

anton.schueller@

scai.fraunhofer.de

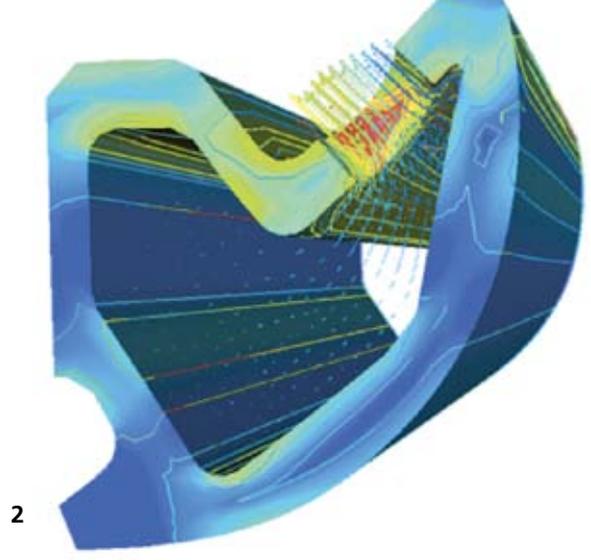
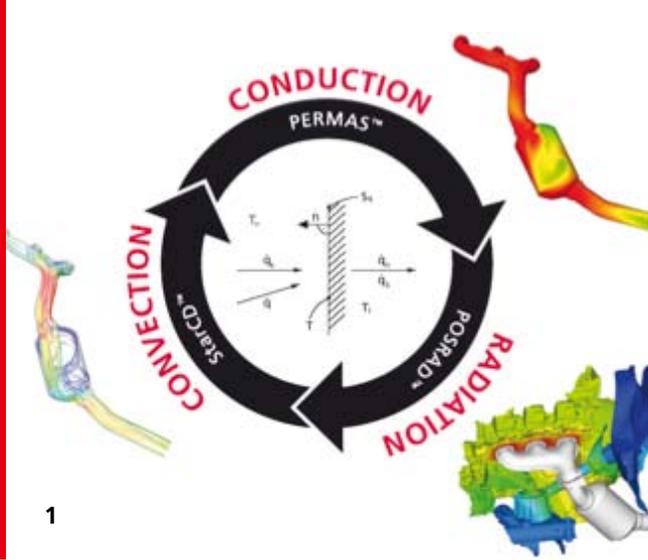
stv. Abteilungsleiter

Klaus Wolf

Telefon +49 2241 14-2557

klaus.wolf@

scai.fraunhofer.de



MIT MULTIPHYSICS NÄHER AN DER REALITÄT

Mittlerweile ist die numerische Simulation fast aller technischen Phänomene tägliche Praxis in der virtuellen Produktentwicklung. Die Kopplung mehrerer Simulationen gewinnt immer größere Bedeutung, um den wachsenden Anforderungen an die Qualität von Simulationsergebnissen gerecht zu werden. Gekoppelte Simulationen führen zu realitätsnäheren Ergebnissen.

Mit MpCCI ist das Fraunhofer-Institut SCAI Marktführer für Kopplungssoftware. Die neue Version 4.0 unterstützt jetzt noch mehr Anwendungen. Für die Übertragung von Berechnungsquantitäten (Feldern) in eine Kette von Simulationsprogrammen bietet SCAI jetzt auch die hochperformante numerische Bibliothek MapLib an, die zusammen mit Modulen zum Einlesen von Datenformaten (Readern) und Modulen zum Postprocessing im neuen Produkt SCAIMapper integriert ist.

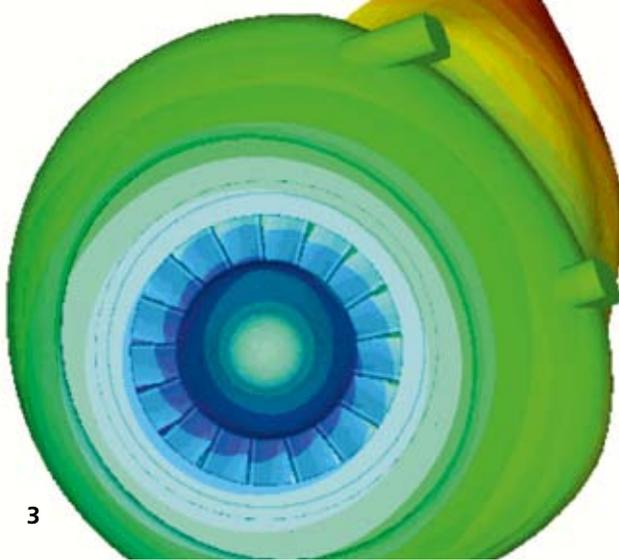
- 1 *Kopplung dreier Simulationsprogramme für die thermische Absicherung bei der Daimler AG.*
- 2 *Das dynamische Verhalten von Gummidichtungen wird durch die eingeschlossene Luft beeinflusst.*

Offene Schnittstelle für Simulationscodes

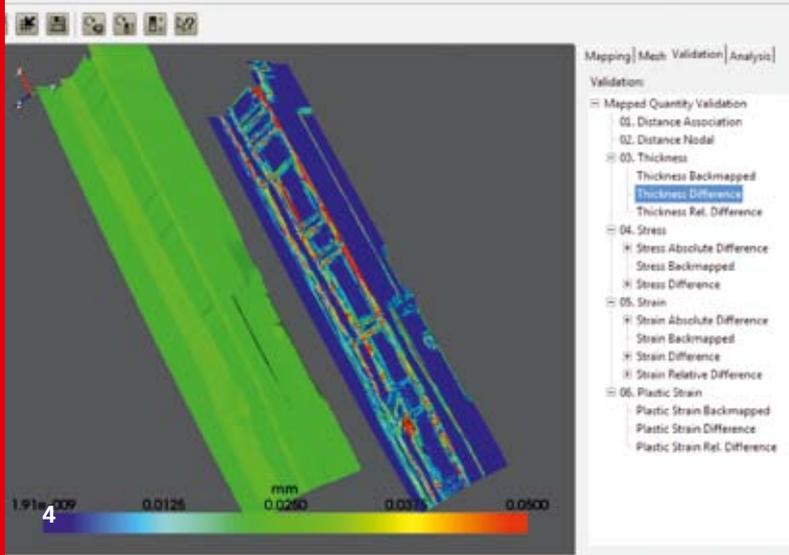
Die Software MpCCI ist das weltweit führende Werkzeug für Multiphysics-Simulationen, die durch eine Kopplung bewährter Anwendungscodes für einzelne Disziplinen durchgeführt werden können. MpCCI bietet eine offene Schnittstelle für die führenden Simulationscodes, die bereits von mehr als 100 Kunden zur Simulation von Strömungs-Struktur-Interaktion oder zur Anbindung von Wärme- oder Strahlungsmodellen an Struktur- und Strömungsberechnungen genutzt wird.

MpCCI unterstützt führende Simulationscodes

Zu den von MpCCI unterstützten Codes gehören Abaqus, Ansys, FineHexa und FineTurbo, Flowmaster, Fluent, Flux3D, Icepak, MD-Nastran, MSC.Marc, OpenFOAMm, Permas, Samcef, STAR-CD und STAR-CCM, RadTherm sowie über die offene Programmierschnittstelle auch viele Forschungs- und firmeninterne Berechnungscodes. MpCCI erkennt automatisch die schon installierten Werkzeuge zum Computer Aided Engineering (CAE) und koppelt diese in ihren Originalversionen miteinander – auf Seiten der einzelnen Programme sind daher keine speziellen Anpassungen notwendig. MpCCI überprüft bereits vorhandene monodisziplinäre 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, zeitlicher Ablauf) und startet schließlich das gekoppelte multidisziplinäre Simulationssystem auf einem



3



4

verteilten Netz von Rechnern. MpCCI bietet Lösungen für Fluid-Struktur-Interaktion, thermische und Strahlungskopplung, elektro-thermische Kopplung, Plasma- und Lichtbogensimulationen. Weitere Modelle werden auf Kundenanfrage individuell entwickelt.

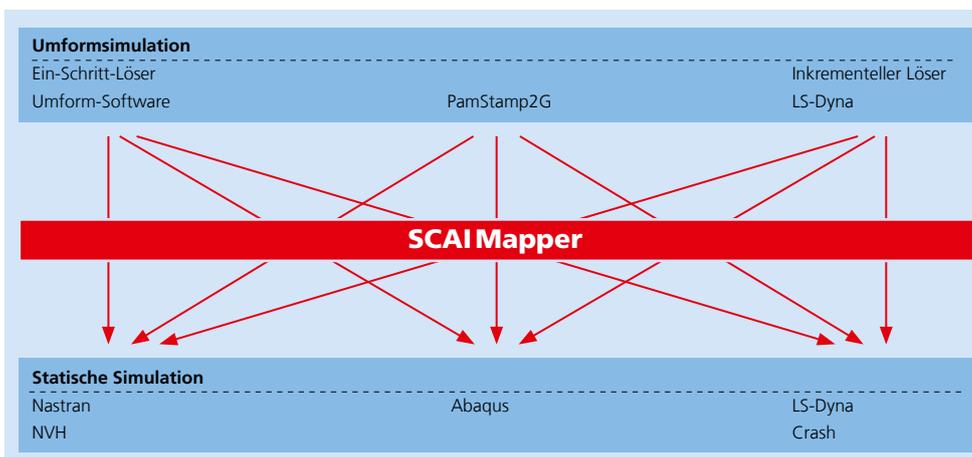
SCAIMapper verleiht Crashberechnungen mehr Aussagekraft

In Crash-Simulationen verwendete Modelle sind idealisiert. Sie berücksichtigen meistens nicht die durch die Herstellung verursachten lokalen Änderungen der Geometrie und der Materialeigenschaften. Der SCAIMapper hilft, die Aussagekraft von Crashberechnungen zu erhöhen, indem die Ergebnisse aus Herstellungssimulationen in das Crashmodell integriert werden.

Wie sich relevante Bauteile während eines Crashes verhalten, hängt nicht nur von ihrem Design, sondern auch von ihrer Herstellungsgeschichte ab. Um realitätsgetreuere Crashmodelle zu erhalten, müssen herstellungsbedingte lokale Geometrieinformationen und Materialkenngrößen aus der Umformsimulation oder anderen Bearbeitungssimulationen in das Crash-Modell übertragen werden. Dazu hat das SCAI in einem Projekt mit dem Verband der Automobilindustrie die Software SCAIMapper entwickelt. Der SCAIMapper bietet für die Übertragung eine Funktion, Modelle mit inkompatiblen relativen Positionen im Koordinatensystem aufeinander auszurichten. Mapping-Funktionen für Materialdicke, Druck- und Zugbelastung, Spannungen und andere element- oder auch knotenbezogene Daten sowie die Möglichkeit, Informationen über Einheitensysteme einzufügen, unterstützen die Integration in die Prozesskette.

3 Die thermische Belastung eines Turboladers kann durch Kopplung genauer evaluiert werden.

4 Der SCAIMapper bietet eine intuitive und schnell zu erlernende Bedienoberfläche.



Faurecia hat den SCAIMapper als Standardwerkzeug in seinen Designworkflow integriert.

5



5 Im gesamten Ausle-
gungsprozess von Auto-
sitzen verwendet Faurecia
den SCAIMapper.

Der SCAIMapper bietet ein Validierungsmodul zur Überprüfung der übertragenen Größen. Für die Validierung werden die Assoziations- und Knotenabstände der gekoppelten Modelle sowie die lokalen Differenzen von Original- und übertragenem Wert berechnet und visualisiert. Alle Funktionen des SCAIMappers lassen sich interaktiv über ein grafisches Interface steuern. Zum Laden der Ausgangs- und Zielgitter unterstützt der SCAIMapper die Dateiformate vieler in der Umform- und Crash-Simulation verwendeter Codes: Abaqus, Indeed, LS-DYNA, PAM-STAMP PAM-CRASH, Radioss, Nastran und Sysweld.

MapLib überwindet Grenzen zwischen Gitterdefinitionen

Oft ist es bei CAE-Anwendungen notwendig, die Ergebnisse einer Simulation oder eines Experiments von einem Modell auf ein anderes zu übertragen. Solche Datenübertragungen werden jedoch häufig durch inkompatible Modelldefinitionen behindert. Die MapLib überwindet die Grenzen zwischen nicht-passenden Gitterdefinitionen und unterstützt CAE-Anwendungen durch entsprechende Berechnungs- und Abbildungsverfahren.

Bei der Produktentwicklung ist es notwendig, die Herstellung und das Verhalten eines Produkts mittels CAE-Anwendungen aus unterschiedlichen Analysedisziplinen zu untersuchen und zueinander in Bezug zu bringen.

Jede Disziplin hat üblicherweise eine eigene Diskretisierung sowie bevorzugte Elementtypen, Gitterdichten und Regeln für die lokale Modellierungsgenauigkeit. Softwarelösungen für Multiphysics-Anwendungen werden daher häufig durch nicht aufeinander abgestimmte Modell-Geometrien und Gitter-Diskretisierungen behindert. Die MapLib überwindet diese Modellabgrenzungen durch Methoden zum Vergleich von Geometrien und zum Datentransfer zwischen Modellen.

Die MapLib ist eine numerische Bibliothek (C++) zur Unterstützung von CAE-Anwendungen und stellt verschiedene Möglichkeiten der Nachbarschaftsberechnung und Datenübertragung zur Verfügung. Die MapLib ermöglicht:

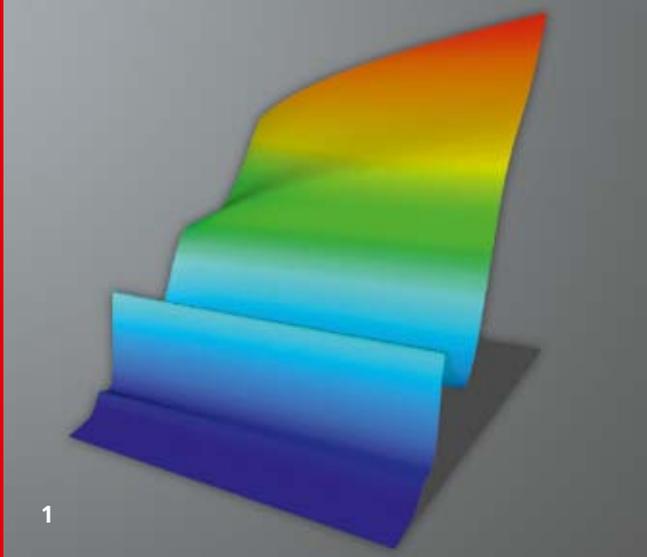
- Benutzerkontrollierte Nachbarschaftsberechnung
- Interpolation und Datentransfer von beliebigen Größen auf Knoten, Elementen oder Shell-Integrationspunkten
- Vergleich und Abstandsberechnung von Gittergeometrien
- Qualitätschecks der abgebildeten Datenfelder
- Schnittstellen zu C++, C und Fortran

Die MapLib kann kundenspezifisch erweitert und andere Dateiformate können hinzugefügt werden. Sie lässt sich leicht in andere CAE-Anwendungen und Tools integrieren. SCAI bietet seine Dienstleistung und Unterstützung für diese Integrationsaufgaben an.

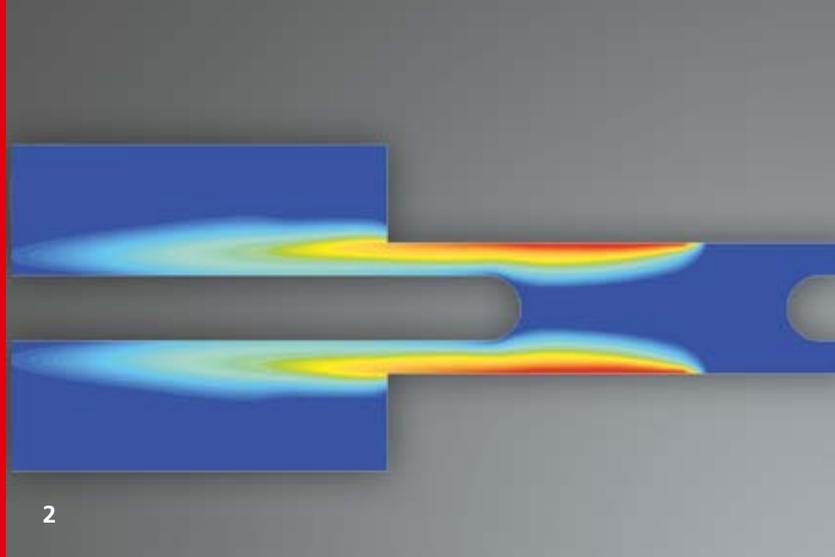
ANSPRECHPARTNER

Klaus Wolf

Telefon +49 2241 14-2557 | klaus.wolf@scai.fraunhofer.de



1



2

SIMULATION DER INTERAKTION DES LICHTBOGENS MIT KUNSTSTOFFEN

- 1 *Thermische Leitfähigkeit des Plasmas im Parameter-
raum Druck und Temperatur.*
- 2 *Berechneter Transport
von Zersetzungsproduk-
ten in einer Elektroden-
anordnung.*

Tabellierte Materialdaten ermöglichen schnelle Berechnung komplexer Strömungsvorgänge

Elektrische Schaltgeräte, beispielsweise Leistungsschalter oder Motorschutzschalter, dienen der Verteilung elektrischer Energie, dem betriebsmäßigen Schalten des elektrischen Stromes und der Beherrschung von Fehlerereignissen. Im Falle eines elektrischen Kurzschlusses wird bei der Kontakttrennung ein elektrischer Lichtbogen gezündet, der als Schaltelement dient. Das dabei entstehende Plasma ist durch hohe Temperaturen im Bereich von 20 000 Kelvin gekennzeichnet, womit eine besondere Belastung der Geräte verbunden ist. Die große thermische Energie des Lichtbogens führt unter anderem zur teilweisen Zersetzung von Kunststoffen, aus denen die Schaltkammern der Geräte gefertigt sind. Die dabei entstehenden Zersetzungsprodukte beeinflussen insbesondere den Schaltvorgang.

In einem Forschungsprojekt mit Schaltgeräte- und Werkstoffherstellern wird dieser Prozess mittels komplexer strömungsmechanischer Simulationsmodelle untersucht, wobei auch elektromagnetische Vorgänge berücksichtigt werden müssen. Diese multidisziplinäre Frage wird durch eine Kopplung eines Strömungslösers (Finite Volumen Methode) mit einem Löser für das elektromagnetische Problem (Finite Elemente Methode) mit Hilfe des am SCAI entwickelten Kopplungsinterface MpCCI gelöst. Dieses ermöglicht während eines Simulationslaufes den kontinuierlichen Austausch gitterbasierter Daten, beispielsweise Quellterme oder Materialkoeffizienten.

Infolge der thermischen Energie werden die Kunststoffoberflächen erhitzt, aufgeschmolzen und das Material teilweise

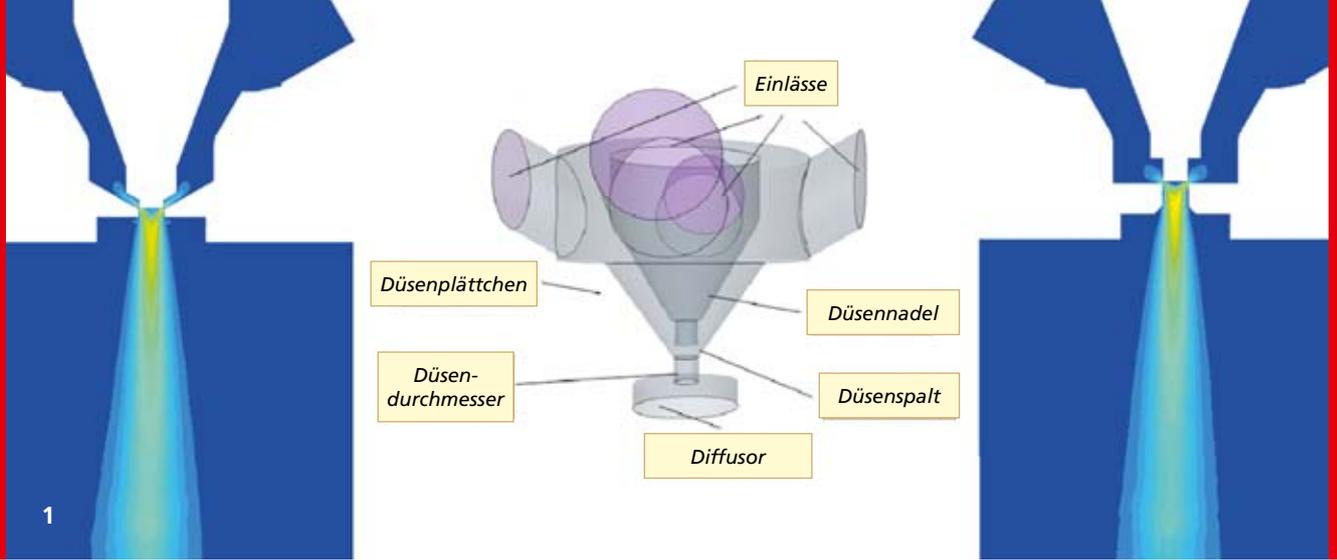
verdampft. Die damit verbundene Beeinflussung der Materialeigenschaften muss in der Simulation berücksichtigt werden. Es bilden sich verschiedene Kohlenwasserstoffverbindungen, wobei bei höheren Temperaturen auch atomare sowie ionisierte Spezies zu berücksichtigen sind. In Summe sind über 80 Spezies bei der Ermittlung der Zusammensetzung einzubeziehen, weshalb die Berechnung des Zersetzungsprozesses zur Laufzeit der Strömungsberechnung nicht möglich ist, da ansonsten die Berechnungen sehr lange dauern würden. Daher erfolgt im Voraus die Berechnung der Gleichgewichtszusammensetzung durch Minimierung der Gibbs'schen Enthalpie und weiterhin die Berechnung der benötigten Materialkoeffizienten, welche tabelliert werden.

Es entstehen große Datenmengen von mehreren Gigabyte, da die Koeffizienten von einer Reihe von Parametern abhängen, beispielsweise Druck, Temperatur und Spezieskonzentrationen. Zur Reduktion der Datenmenge wurde ein Kompressionsverfahren für diese höher dimensionalen Datensätze entwickelt, damit die Materialwerte während der Lichtbogensimulation im Hauptspeicher zur Verfügung stehen. Insbesondere erlaubt das Verfahren einen schnellen punktuellen Zugriff auf die Daten während der laufenden Berechnung und damit eine Beschleunigung der Berechnung.

ANSPRECHPARTNER

Dr. Christian Rümpler

Telefon +49 2241 14-2135 | christian.ruempler@scai.fraunhofer.de



OPTIMIERUNG IN DER STRÖMUNGSMECHANIK

Bei der Auslegung von Maschinen und Anlagen unter strömungsmechanischen Gesichtspunkten gilt es, den Einfluss verschiedener Parameter auf den späteren Betrieb zu berücksichtigen und zu verstehen. Es kommen Methoden zum Einsatz, die die Abhängigkeiten der Parameter und Randbedingungen berücksichtigen und somit eine systematische Analyse und Optimierung ermöglichen.

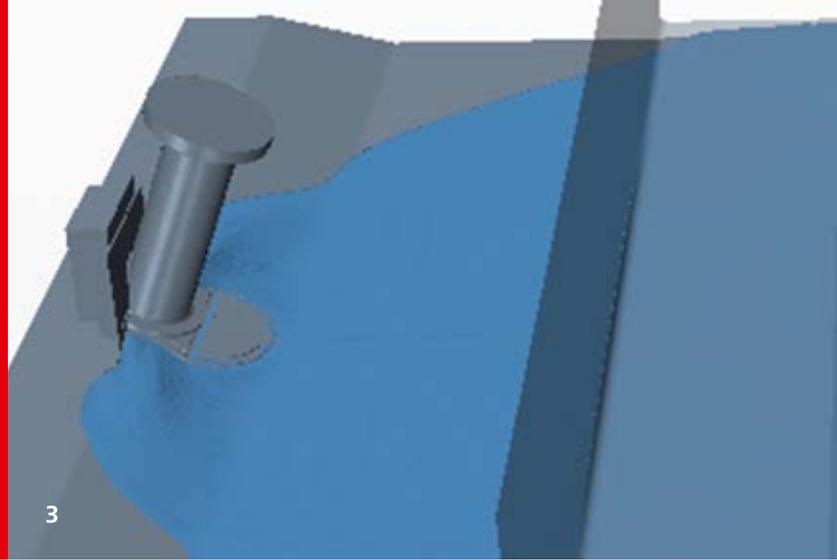
In Zusammenarbeit mit der Firma Hennecke Polyurethane Technology in Sankt Augustin arbeitet SCAI an der strömungsmechanischen Optimierung von Bauteilen und Anlagen für die Verarbeitung von Polyurethanschäumen. Im Speziellen geht es um die Optimierung eines Mischkopfes und einer Mischkammer sowie die Optimierung einer Blockschaumanlage. Das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie fördert das Forschungsprojekt im Programm ZIM (Zentrales Innovationsprogramm Mittelstand).

Für Modellierung und Simulation der Strömung kommen in der Praxis bewährte numerische Simulationsprogramme zum Einsatz, die für die spezielle Optimierungsaufgabe mit der haus-eigenen Software DesParO gekoppelt werden. DesParO ist eine Software zur multikriteriellen Optimierung von Designparametern und wurde bisher vorwiegend in der Metallumformung und in der Crashsimulation eingesetzt. Nachdem man veränderliche Parameter, Randbedin-gungen und Zielkriterien bestimmt hat, wird ein Satz an Parametern für die numerischen Simulationen erzeugt (Design of Experiment). Die Simulationsergebnisse nutzt DesParO zur Erstellung eines nichtlinearen, auf radialen Basisfunktionen basierenden Metamodells. Durch einen globalen Blick auf den Designraum kann der Benutzer das für seine Anforderungen optimale Design finden.

Viele Simulationen mit mehreren Parametersätzen sind notwendig, um geeignete Metamodelle für die Optimierung zu ermitteln. Zu diesem Zweck entwickelte SCAI eine Simulationsumgebung. Mit deren Hilfe lassen sich die Geometrieerzeugung und Vernetzung sowie die Simulationsläufe und die Extraktion der Zielparame-ter aus den Lösungen einfach und schnell bewerkstelligen.



2



3

Mischköpfe / Mischkammer

Um die einzelnen Komponenten des flüssigen Polyurethans zu vermischen, soll Druckenergie möglichst effektiv in kinetische Energie in den Mischköpfen umgewandelt werden. Außerdem sind die Mischdüsen so anzuordnen, dass eine hohe Mischgüte am Auslass aus der Mischkammer erreicht wird. Im Projekt wurden verschiedene optimierte geometrische Parameter ermittelt, die bei Hennecke umgesetzt und unter realen Bedingungen getestet werden.

Blockschaumanlage

Eine Blockschaumanlage produziert kontinuierlich Polyurethanblöcke, die beispielsweise in der Möbelindustrie verarbeitet werden. Dabei ist für die Qualität des Blockschaums die Anfangsphase des Prozesses, nämlich die Aufbringung des flüssigen Polyurethans auf die Förderbänder, von großer Bedeutung. Ziel ist eine gleichmäßige seitliche Verteilung, die Vermeidung von Stauungen oder zu großen Geschwindigkeitsgradienten und ein Durchlaufen der Einlassphase, bevor der eigentliche Aufschäumprozess beginnt. Einstellungen der Anlage und ihre geometrische Auslegung haben dies zu gewährleisten.

Aus Sicht der numerischen Simulation stellt die Aufgabe eine besondere Herausforderung dar. Gründe dafür sind die hohe Zähigkeit des Fluids, die langen Verweilzeiten, die Größe der Anlage und die sich insgesamt daraus ergebenden hohen Rechenzeitanforderungen. Bild 2 und 3 zeigen erste Ergebnisse aus der Einlassphase. In den weiteren Schritten sollen die für die Anlage wichtigen Parameter über eine Sensitivitätsanalyse identifiziert werden. Die Anlagenentwicklung kann daraus Hinweise auf mögliche Schwachstellen und Verbesserungsmöglichkeiten für den Anlagenentwurf entnehmen.

- 1 *Mischkopf, Geometrie und zwei Simulationen mit variierten Geometrieparametern, die eine unterschiedliche Umsetzung in kinetische Energie zeigen.*
- 2 *Realer Betrieb einer Blockschaumanlage. Das Bild zeigt, wie sich das Fluid aus dem Verteilorgan ausströmend auf dem Band verteilt.*
- 3 *Die Blockschaumanlage in der Simulation*

ANSPRECHPARTNER

Dr. Carsten Brodbeck

Telefon +49 2241 14-2654 | carsten.brodbeck@scai.fraunhofer.de



1



2

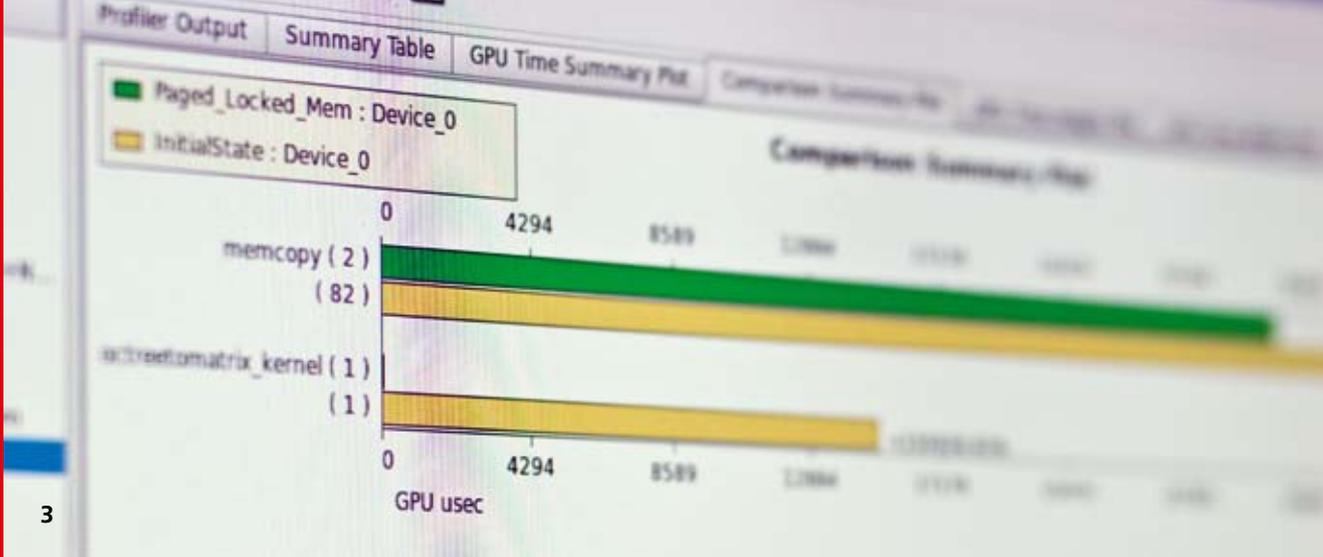
EFFIZIENTE NUTZUNG HOCHPARALLELER SYSTEME

Die enorme Rechenleistung moderner Hochleistungsrechner wird durch eine Vielzahl parallel arbeitender Prozessoren erbracht, die aus einer wachsenden Anzahl von Rechenkernen bestehen. Zudem wird spezielle Beschleunigungshardware, zum Beispiel leistungsfähige Grafikkarten, für numerische Anwendungen eingesetzt, die einen weiteren Grad an Parallelismus einführt. Dieser Trend betrifft die gesamte Rechnerbandbreite – vom Desktop bis zum Supercomputer. Die Gruppe High Performance Computing (HPC) des Fraunhofer SCAI unterstützt Unternehmen wie auch öffentliche Auftraggeber dabei, diese Rechenleistungen erfolgreich zu nutzen.

Traditionell werden Computeranwendungen und Algorithmen für einzelne Prozessoren entwickelt, die einen direkten Zugang zum Hauptspeicher besitzen. Das gilt auch für die allermeisten HPC-Anwendungen. Daher skalieren viele Programme und Algorithmen schlecht, wenn es um die Nutzung vieler Rechenkern geht. Insbesondere skalieren sogar mehr als 56 Prozent aller industriellen HPC-Anwendungen nur bis acht Prozessoren, und nur ungefähr sechs Prozent können von mehr als 128 profitieren. Dies ist das Ergebnis einer Befragung unabhängiger Softwarehersteller durch die Marktforschungsfirma International Data Corporation in Framingham, Massachusetts im Jahr 2010. Allgemein schafft es allein eine Handvoll von Anwendungen heutzutage überhaupt, mehr als 100.000 Recheneinheiten sinnvoll zu beschäftigen. Trotzdem wird die nächste Generation der Supercomputer mehr als eine Million Prozessoren besitzen.

Die meisten dieser Supercomputer basieren auf der bekannten x86 Prozessorarchitektur, bei der die einzelnen Prozessoren aus inzwischen bis zu zwölf Rechenkernen (Multi-/Manycore-Rechner) bestehen. Schon auf Desktopsystemen wird es dabei immer schwieriger, diese Kerne mit genügend Arbeit zu versorgen, da Datenleitungen und Hauptspeichierzugriff für die Masse der Anwendungen zu langsam sind. Manche Programme sind zudem aufgrund ihres Aufbaus und der eingesetzten Algorithmen gar nicht erst in der Lage, alle Kerne zu benutzen. Da die heutigen Rechenkern aber langsamer getaktet sind als frühere Prozessoren, laufen solche Anwendungen im ungünstigsten Fall auf modernen Architekturen sogar langsamer als zuvor.

SCAI analysiert und optimiert bestehende Anwendungen sowie Neuentwicklungen hochskalierender Anwendungsteile auf aktuelle Rechnerarchitekturen. Dabei liegt der Fokus auf einem verbesserten Skalierungsverhalten der eingesetzten Algorithmen. Das Spektrum der Anwendungen ist hierbei nicht begrenzt, und reicht von echtzeitfähigen Anwendungen auf dem Notebook bis hin zu komplexen Simulationsanwendungen auf Supercomputern mit hunderttausenden von Rechenkernen.



3

Ein aktueller Schwerpunkt in den Kundenprojekten ist die Nutzung von Grafikkarten als Hardwarebeschleuniger für rechenintensive numerische Anwendungen. Moderne Grafikkarten (beispielsweise NVIDIA-Tesla) versprechen eine enorme und kostengünstige Steigerung der Rechengeschwindigkeit, bieten sich aber nicht für jede Anwendung gleichermaßen an. Um eine befriedigende Leistung aus solchen Hardwarebeschleunigern tatsächlich zu erzielen, müssen der Ausgangscode und oft auch die verwendeten numerischen Algorithmen deutlich verändert werden. Allerdings lassen sich dann oft Beschleunigungen von ein und in manchen Fällen sogar zwei Größenordnungen gegenüber der parallelen Ausgangsversion erzielen.

Hier bietet das HPC-Team des Fraunhofer SCAI Unterstützung sowohl für Firmen als auch für öffentliche Auftraggeber an, Anwendungen mit Hilfe dieser neuen Hardwarearchitekturen zu beschleunigen. Gleichzeitig betreibt SCAI auch solche Rechner. Das Angebot umfasst u.a. folgende Leistungen:

- Analyse der Anwendungsstruktur und des Laufzeitverhaltens auf vorgegebenen Architekturen mit State-of-the-Art-Werkzeugen
- Portierung der Anwendung gemäß zuvor entwickelter Portierungsstrategie
- Optimierung von Anwendungen auf neuen Hardwarearchitekturen
- Fokus auf Standards, Portabilität und Zukunftssicherheit

Zu den Kunden gehören mittelständische Unternehmen und Forschungseinrichtungen, die ihre proprietäre Software auf kostengünstigen Multicore-Systemen oder auch mit Hilfe von Grafikkarten als Beschleunigerhardware optimiert sehen wollen. Fraunhofer-Expertise ist auch gefragt, wenn es bei Kunden um die Frage geht, welcher Rechner optimal zu den wichtigen Anwendungen im Unternehmen oder Forschungsinstitut passt und in welche Art von Rechnern man zukünftig investieren soll. Für solche Kunden führt das HPC-Team systematische Benchmarking-Projekte durch, deckt Schwachstellen und Verbesserungspotential auf, evaluiert parallele Software- und Entwicklungsumgebungen und schlägt konkrete Schritte zur Umsetzung vor.

ANSPRECHPARTNER

Dr. Thomas Soddemann

Telefon +49 2241 14-3414 | thomas.soddemann@scai.fraunhofer.de

1 + 2 Mit neuesten HPC-Systemen steht eine leistungsfähige Rechnerinfrastruktur zu Entwicklungszwecken zur Verfügung.

3 Berechnungen im Kundenauftrag werden analysiert und auf ihr Optimierungspotenzial hin ausgewertet.

SOFTWARE »WOLF2PACK« ERLAUBT DEN BLICK DURCH DIE ATOMARE LUPE

Mit dem modularen Softwarepaket »Wolf2PACK« ist das Fraunhofer SCAI in der Lage, hochgenau Modelle chemischer Systeme auf atomarem Niveau zu berechnen. So gelingt es, Eigenschaften von Werkstoffen oder Biomolekülen vorherzusagen – was den Schlüssel zu Verbesserungen und somit zu Wettbewerbsvorteilen darstellt.

Molekulare Simulationstechniken, vornehmlich Molekulardynamik (MD) oder Monte Carlo (MC), haben sich in den letzten Jahren zu mächtigen Werkzeugen entwickelt, um tiefgreifendes Verständnis für den Ablauf molekularer Prozesse in Werkstoffen oder lebenden Organismen zu generieren. Das Gebiet ist für die angewandte Forschung deshalb so interessant, weil man es zwar mit etablierten Methoden zu tun hat, diese sich aber mit ihrer Vielfalt und Nähe zur Quantenmechanik als sehr komplex darstellen. Nur durch atomares Verständnis makroskopisch beobachtbarer Vorgänge lässt sich auf lange Sicht signifikanter Fortschritt, das heißt technische Innovation, erzielen.

Notwendige Komponenten für erfolgreiche Simulationen

Die mathematisch-physikalische Modellierung erfordert Erfahrung und Intuition von Forschern und Entwicklern, die Durchführung der Simulation den effizienten Einsatz von Hochleistungsrechnern. Damit sind Ergebnisse molekularer Simulationen für Firmen zwar hochinteressant und attraktiv, der Weg dahin jedoch lang und schwierig. Um auf dem sich derzeit ausbildenden Markt nachhaltig erfolgreich sein zu können, ist das Zusammenspiel mehrerer entscheidender Faktoren vonnöten: Als Kern einer jeden erfolgreichen Simulation ist zunächst ein maßgeschneidertes, hochgenaues Kraftfeld zu definieren. Es handelt sich hierbei um eine Potentialfunktion, welche die Wechselwirkungen zwischen den Atomen korrekt beschreibt.

Weiterhin werden effiziente Workflows benötigt, um robust und effizient Simulationen steuern und analysieren zu können. Schließlich werden neben dem bereits erwähnten Zugang zu HPC-Ressourcen auch spezielle MD- und MC-Pakete (beispielsweise ESPResSo++) benötigt, die einerseits eine große algorithmische Vielfalt und andererseits eine

hervorragende Skalierbarkeit auf aktuellen Hardware-Architekturen aufweisen.

Die Gruppe Computational Chemical Engineering bietet als weltweit eine von wenigen Gruppen Lösungen für all diese Themen an – und zwar in einer integrierten Software-Lösung namens »Wolf2PACK«.

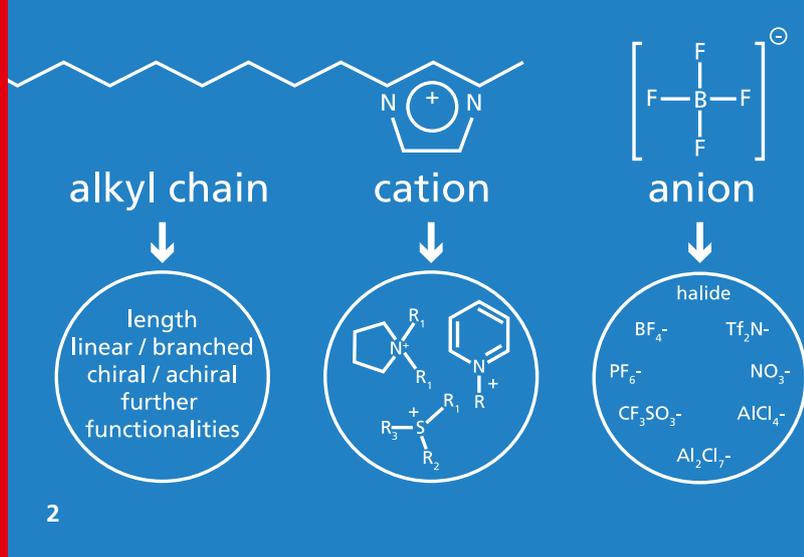
Leitfähigkeitsverlauf ionischer Flüssigkeiten richtig vorhergesagt

»Wolf2PACK« konnte erstmals im Zusammenhang mit Simulationen ionischer Flüssigkeiten (ILs) erfolgreich eingesetzt werden. ILs sind Salze, die aufgrund ihres zumeist vorhandenen lipophilen Anteils am Kation (Bild 2) außergewöhnliche Eigenschaften besitzen und daher aktuell als Designer-Moleküle weiterentwickelt werden. Sie besitzen vor allem den Vorteil, bei extrem variablen Lösungseigenschaften und einer hohen elektrischen Leitfähigkeit nicht zu verdampfen, das heißt in einem großen Temperaturbereich flüssig zu bleiben. Mit Hilfe der Wolf2PACK-Teilpakete »ExTrM« (Explicit Torsion Parameter) und »GROW« (Gradient-based Optimization Workflow) konnten zunächst die intra- und intermolekularen Kraftfeldparameter semi-automatisch im Test gegen experimentelle Daten bestimmt werden.

Bild 3 zeigt für einen Dichtevergleich die Güte des Kraftfelds, die es erlaubt, auch außerhalb des experimentellen Messbereiches Werte sinnvoll vorherzusagen. Dies wird zum Beispiel in Bild 4 für die elektrische Leitfähigkeit einer IL/Chloroform Mischung in Abhängigkeit der IL-Konzentration belegt. Solche Mischungen sind in der chemischen Synthese und der Batterieentwicklung von extremer Bedeutung. Der Kurvenlauf konnte hier molekular nachvollzogen werden: Vor der Mischungslücke existieren nur einige wenige Ionenpaare der IL, die sich immer



1



2

Bild 3: Dichtevergleich

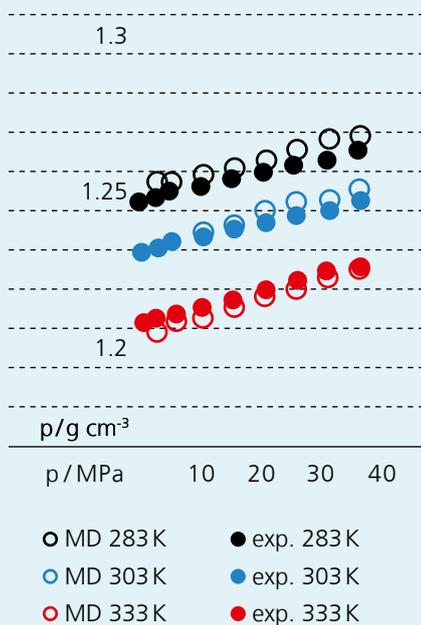
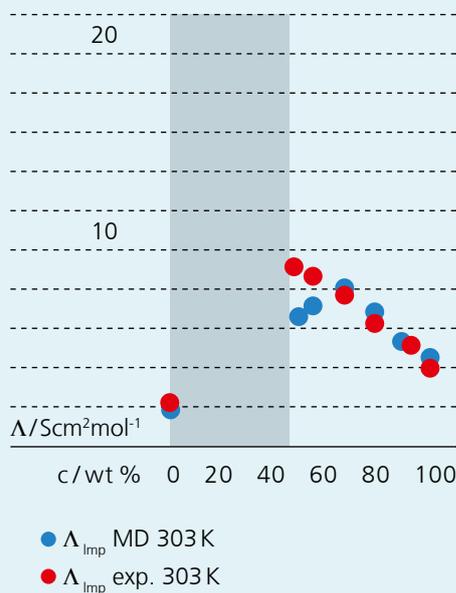


Bild 4: Elektrische Leitfähigkeit



1 Logo der Software
Wolf2Pack

2 Schematische Darstellung
des Modifizierungs-
potentials einer Ionischen
Flüssigkeit (IL).

3 Dichte einer IL bei ver-
schiedenen Temperaturen
als Funktion des Drucks.

4 Elektrische Leitfähigkeit
einer IL-Chloroform-Mi-
schung als Funktion der IL-
Konzentration in Gewichts-
prozent bei 303 Kelvin.

paarweise durch das Chloroform bewegen, daher die sehr niedrige Leitfähigkeit. Nach der Mischungslücke besteht ein Ionennetzwerk, in dem sich individuelle Ionen frei und damit schnell bewegen können. Sie sinkt dann langsam ab, weil das Netzwerk bei kleiner werdender Chloroformkonzentration starrer wird. Dies komplettiert das mikroskopische Verständnis eines ungewöhnlichen Leitfähigkeitsverhaltens.

Hauptvorteile und Einsatzgebiet von Wolf2PACK

Entscheidender Vorteil der MD-Simulation ist es nun, dass im Computer bis zu einem gewissen Grad die chemische Struktur der IL verändert werden kann und so beispielsweise der Effekt

des Austausches einer funktionalen Gruppe (vgl. Bild 2) auf die IL-Eigenschaften untersucht werden kann. So können direkt Struktur-Eigenschafts-Beziehungen (SE) analysiert werden. Die hier an einem Beispiel illustrierten Vorteile von Wolf2PACK sind auf beliebige andere Stoffgruppen übertragbar. Daher erwartet SCAI einen breitgefächerten Einsatz dieses Toolkits im Laufe der kommenden Jahre.

ANSPRECHPARTNER

Dr. Dirk Reith

Telefon +49 2241 14-2746 | dirk.reith@scai.fraunhofer.de

NUMERISCHE SOFTWARE

Aufgrund steigender Anforderungen an die Qualität innovativer Produkte werden Computersimulationen immer wichtiger für die Industrie. Sie beschleunigen die Entwicklung neuer Designs und helfen bei der Prozessoptimierung. Simulation reduziert Entwicklungszeit, ersetzt »reale« Experimente und ermöglicht die Konstruktion besserer Prototypen bei gleichzeitig geringeren Kosten.

Ein Beispiel ist die Beschleunigung der Entwicklung neuer Modelle in der Automobilindustrie. Ein weiteres die Erschließung von Ölfeldern. Genaue Kenntnisse über die Abläufe im Inneren eines Ölreservoirs können nur durch numerische Simulationen erlangt werden. Sie helfen hier, alternative Erschließungsstrategien zu analysieren und so eine optimale Ölförderung zu garantieren. Kreativität und Erfahrung des Ingenieurs bestimmen die Qualität neuer Produkte. Diese Fähigkeiten können noch besser genutzt werden durch

- die stärkere Integration von Simulationssoftware in Optimierungsprozesse,
- die Steigerung der Genauigkeit zugrundeliegender Modelle und
- die interaktive Ausführung von Simulationen.

Hier stößt numerische Simulation oft an ihre Grenzen. Besonders die typischerweise sehr langen Rechenzeiten realistischer Simulationen müssen drastisch reduziert werden. Außerdem fehlen Softwaretools für die detaillierte Analyse und die effiziente Wiederverwendung bereits vorhandener Simulationsergebnisse. Das erste Ziel ist daher die Entwicklung neuer Methoden und Softwaretools, die eine effizientere Nutzung industrieller Software ermöglichen. Dazu erforscht Fraunhofer SCAI hocheffiziente numerische Methoden – namentlich solche, die auf hierarchischen Ansätzen basieren (Softwarebibliothek SAMG). Sie erlauben eine optimale und skalierbare Lösung großer linearer Gleichungssysteme wie sie als rechenintensivste Komponente im Kern industrieller Simulationspakete auftreten. Das zweite Ziel ist die Analyse von Daten und Designoptimierung unter besonderer Berücksichtigung ihrer Robustheit (Robust Design). Das Softwarepaket DesParO unterstützt den Anwender bei der Optimierung hochkomplexer Prozesse, selbst in Kombination mit rechenintensiven Simulationsprogrammen.

Die Nutzung von Techniken des Datamining für eine softwaremäßige Wiederverwendung (Analyse und Auswertung) großer Simulationsdatenmengen – im Sinne eines automatischen Wissensgewinnes – spielt eine zunehmend wichtige Rolle. SCAI untersucht hier geeignete Methoden und entwickelt praktikable Softwaretools. Darüber hinaus entwickelt SCAI spezialisierte und optimierte Kompressionssoftware für die effiziente Speicherung großer Datenarchive. Die meisten der erwähnten Technologien und Methoden haben zu individuellen Produkten geführt, die sich bereits im industriellen Einsatz befinden. Das starke Interesse vieler Firmen, insbesondere aus der Öl- und Automobilindustrie, bestätigt die Relevanz der Entwicklungen für die numerische Simulation.

Eine große Herausforderung der Zukunft besteht in der Verbindung interaktiver Simulation mit Robust Design, die durch die Verfügbarkeit hocheffizienter und skalierbarer Löser-technologie in greifbare Nähe gerückt ist. Interaktive Simulation – das heißt, alternative Modelle in Echtzeit analysiert und ausgewertet auf Mausklick – ist das strategische Ziel der Abteilung NUSO.

Abteilungsleiter:

Clemens-August Thole

Telefon +49 2241 14-2739

clemens-august.thole@

scai.fraunhofer.de

stv. Abteilungsleiter:

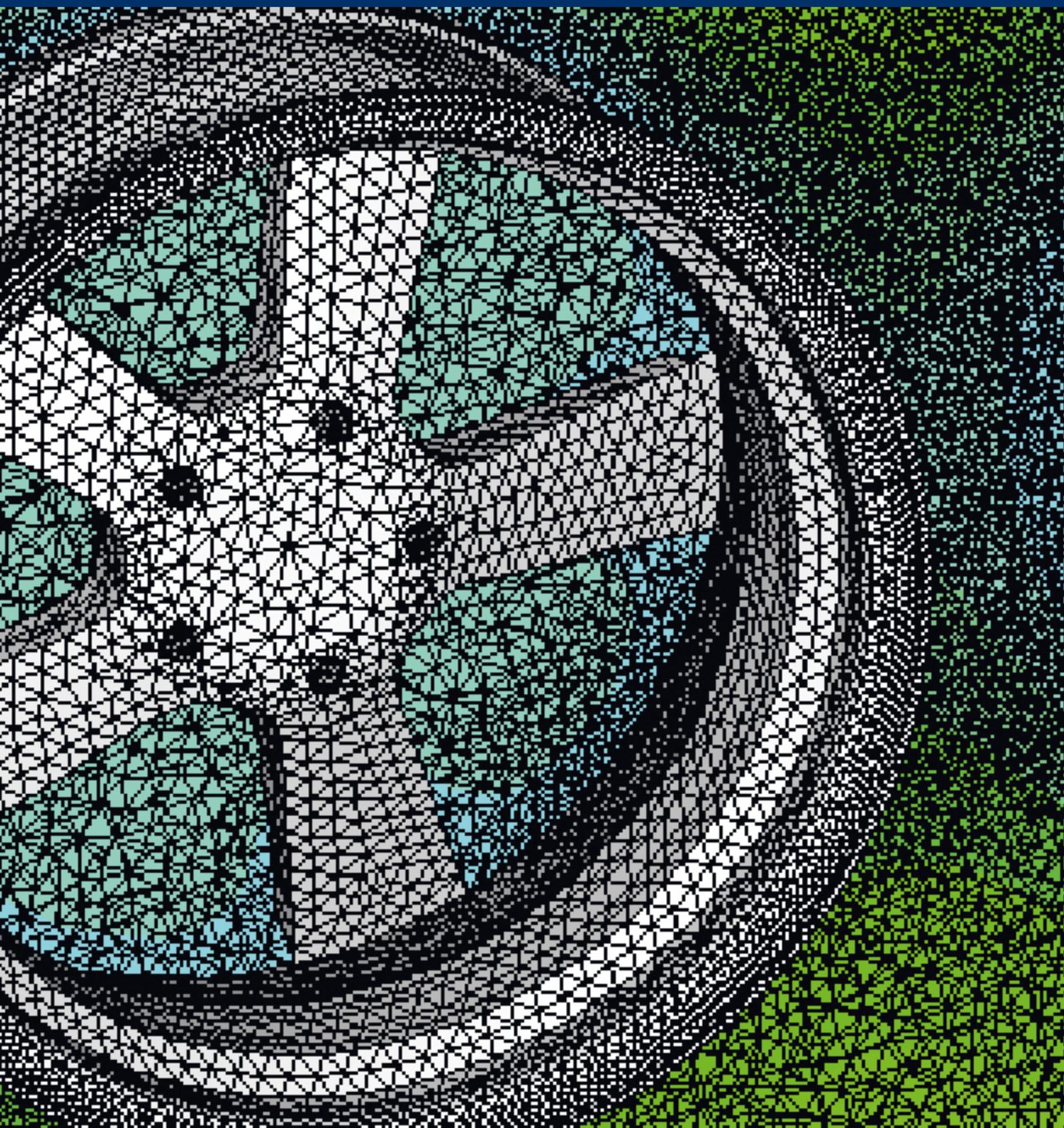
Dr. Klaus Stüben

Telefon +49 2241 14-2749

klaus.stueben@

scai.fraunhofer.de

*Simulation des elektro-
chemischen Verchromens
von Felgen: Durch hoch-
effiziente numerische
Lösungsverfahren werden
industrielle Simulationen
erheblich beschleunigt.*



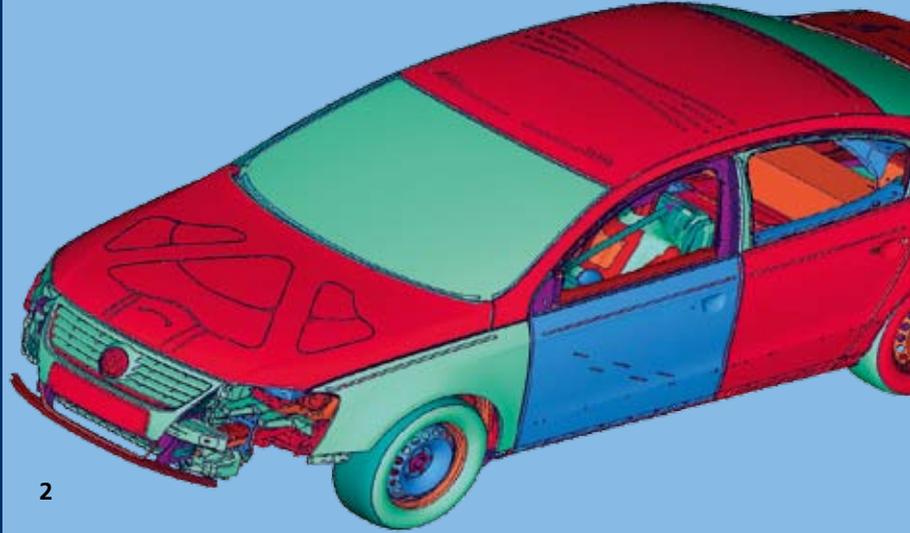


69 sec Original DSY



34 sec FEMZIP file

1



2

KOMPRESSION VON SIMULATIONS DATEN BESCHLEUNIGT DIE PRODUKTENTWICKLUNG

Numerische Simulation ist ein Standardwerkzeug in der modernen Produktentwicklung. So setzen deutsche Automobilfirmen Rechner mit mehreren 1000 Prozessoren ein, um zum Beispiel das Crashverhalten, die Steifigkeit oder die Kühlung eines Fahrzeugs zu simulieren. Jedes Jahr kommen so mehrere 100 Terabyte an Simulationsergebnissen zusammen, die archiviert, verteilt und analysiert werden müssen. Die von der Abteilung NUSO in Zusammenarbeit mit der Universität zu Köln entwickelten Datenkompressionsverfahren lösen dieses Problem, indem sie analog zum Audiokompressionsverfahren MP3 bei vorgegebener Genauigkeit die Simulationsergebnisse so komprimieren, dass die Anforderungen der Ingenieure erfüllt werden.

Funktionsweise des Verfahrens

Im Unterschied zu Kompressionsverfahren von der Stange (wie WINZIP oder gzip) komprimiert die am SCAI entwickelte Software-Familie FEMZIP – ebenso wie MP3 – nicht verlustfrei und sehr anwendungsspezifisch. Die Verfahren laufen in drei Schritten ab:

- **Quantisierung:** Alle Zahlen einer Ergebnisgröße (beispielsweise Blechdicken oder Koordinaten von Gitterpunkten) werden auf eine vorgegebene Genauigkeit gerundet.
- **Approximation:** Mit Hilfe anwendungsspezifischer mathematischer Verfahren werden die Ergebnisgrößen möglichst gut angenähert.
- **Codierung:** Die Differenz zwischen Approximation und Zielgröße wird mit einem Standard-Kompressionsverfahren komprimiert.

Vorteile für Ingenieure

Der Kompressionsfaktor für Ergebnisse der Simulationspakete PAM-CRASH, LS-DYNA und MSC.NASRTRAN ist abhängig von der durch Ingenieure gewählten Genauigkeit. In der Praxis hat sich herausgestellt, dass sich in der Regel ein Faktor 10

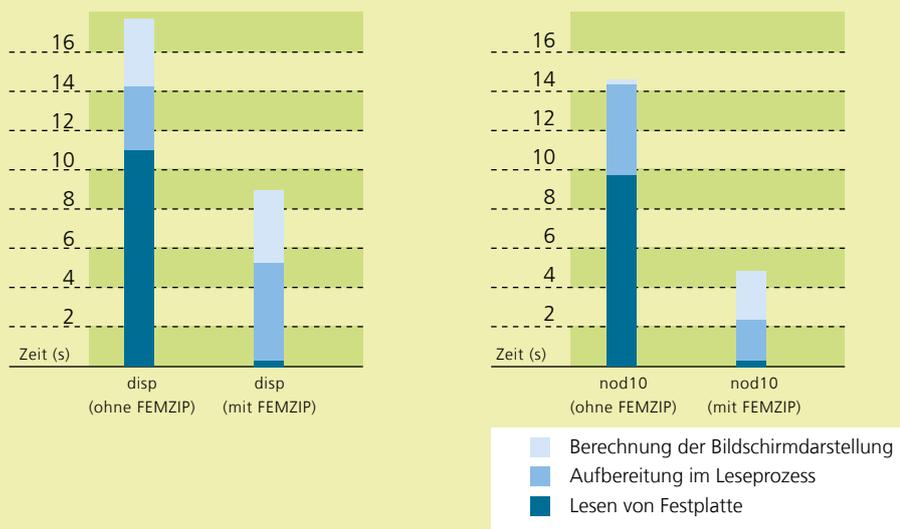
erreichen lässt. Das ist deutlich besser als die Verwendung von Standardkompressionssoftware wie gzip mit einem Kompressionsfaktor von weniger als 2. Es ergeben sich folgende Vorteile:

- **Weniger Archivplatz:** Simulationsergebnisse werden in Datenmanagementsystemen archiviert und häufig noch zusätzlich auf der lokalen Festplatte des Ingenieurs abgelegt. Mittels FEMZIP kann man zehnmal so viele Ergebnisse vorhalten.
- **Schnellere Zusammenarbeit:** Produktentwicklung in der Industrie findet heute räumlich verteilt und häufig in Zusammenarbeit mit Dienstleistern statt. Durch FEMZIP können Simulationsergebnisse schneller zwischen Partnern ausgetauscht werden und man muss nicht auf Bildschirmfotos zurückgreifen.
- **Effizienteres Arbeiten mit Postprozessoren:** FEMZIP hat sich in der Automobilindustrie zu einer Art De-facto-Standard entwickelt. Führende Hersteller von Postprozessoren, das sind Programme zur Visualisierung und Analyse von Simulationsergebnissen, unterstützen mit FEMZIP komprimierte Dateien direkt. Die Software benötigt sogar weniger Zeit, um komprimierte Daten zu öffnen, wenn man den Vorgang mit dem Öffnen unkomprimierter Dateien vergleicht. Den direkten Zugriff ermöglicht eine spezielle frei verfügbare Bibliothek, die in die Postprozessoren integriert wird.

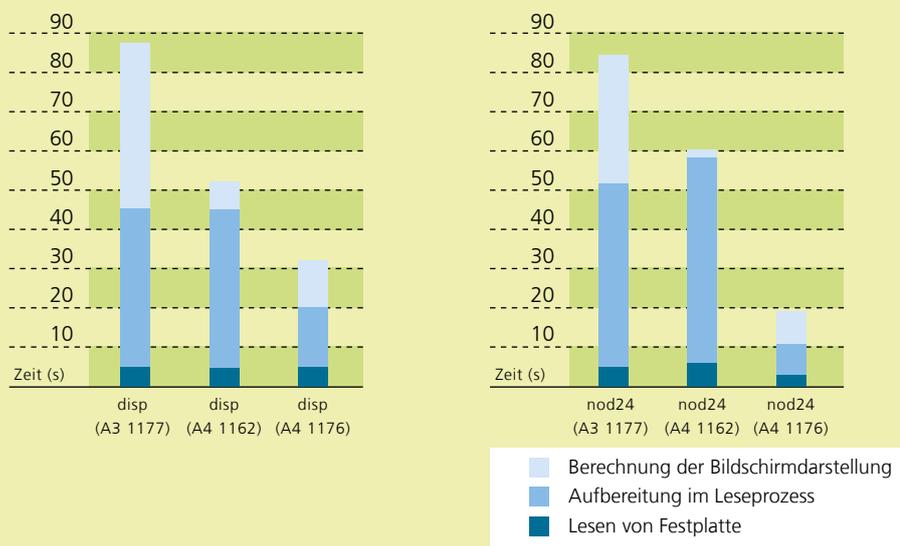


- 1 FEMZIP verkürzt die Einlesezeiten der Simulationsdaten – z.B. einer PAM-CRASH-Datei – enorm. Das Beispiel zeigt eine Messung der Volkswagen AG.
- 2 Finite-Element-Modell eines VW Passat mit etwa einer Million Gitterpunkten nach der Simulation eines Frontcrash.
- 3 Leistungsdaten der Software FEMZIP

3a: Vorteile der Datenkompression mit FEMZIP-P bei den Einlesezeiten



3b: Vorteile besserer Integration der Entkomprimierung in GNS Animator



Perspektiven

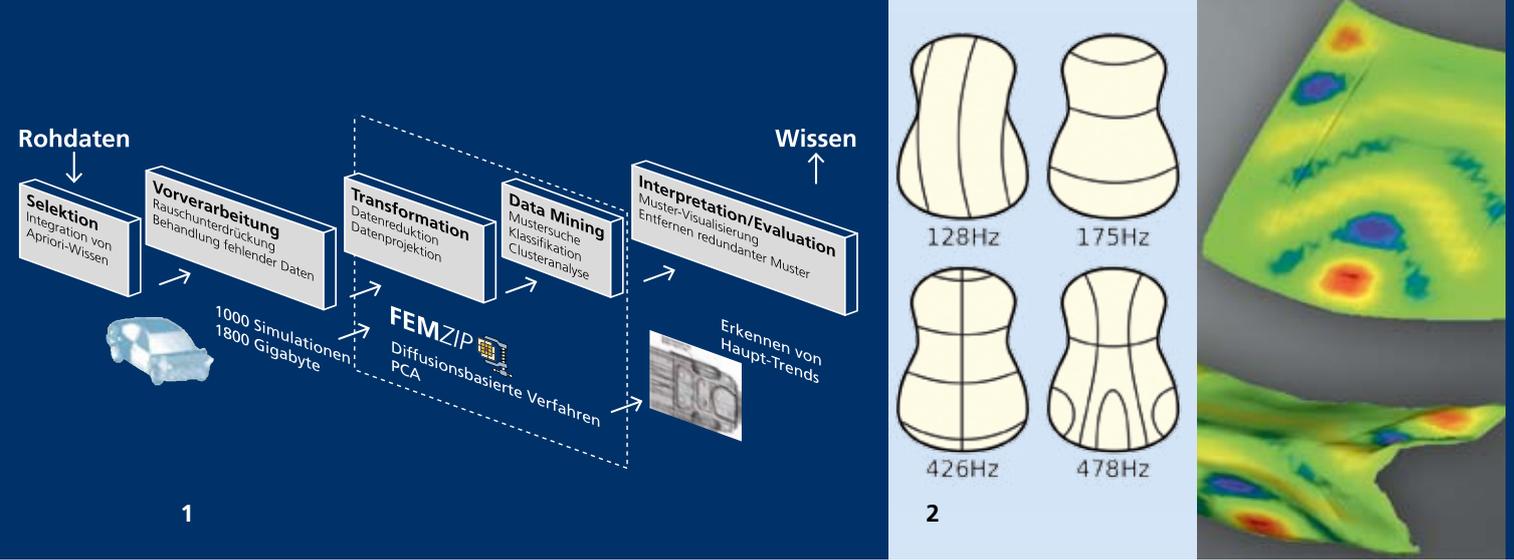
Die Beschleunigung der Einlesegeschwindigkeit von FEMZIP-Dateien war ein besonderes Ergebnis der bisherigen Arbeiten. Mit Unterstützung durch Volkswagen und in enger Zusammenarbeit mit dem Postprozessorhersteller GNS in Braunschweig wurde die Bibliothek zum Lesen von mit FEMZIP komprimierten Dateien optimiert und an die Anforderungen der Postprozessorhersteller angepasst. Bild 3a zeigt Messungen von VW anhand hausgenerierter Crashsimulationsmodelle. Das Lesen der Verformungen (disp) und spezieller Ergebnisse pro Knoten (nod10) ist jeweils zwei bis dreimal schneller, wenn komprimierte anstatt unkomprimierte Dateien gelesen werden. Die Auswirkungen der verbesserten Integration in die Software GNS Animator zeigt Bild 3b. Insgesamt stieg die Geschwindigkeit um den Faktor 2.5 für Verformungen (disp) und den Faktor 4.5 für Knotenergebnisse.

Auch bei den eigentlichen Verfahren zur Approximation wurden Fortschritte erreicht. So hat SCAI neben der hierarchischen Interpolation zur Approximation von Crashsimulationsergebnissen (Patentnummer: 20030710: DE 2003-10331431) und der verlustfreien Kompression von Wetterdaten (Patent PCT/EP2004/013109) jetzt ein gemeinsames Patent mit der Texas University of Austin zur baumbasierten verlustfreien Kompression quantisierter Simulationsergebnisse auf Finite-Element-Gittern eingereicht.

ANSPRECHPARTNER

Clemens-August Thole

Telefon +49 2241 14-2739 | clemens-august.thole@scai.fraunhofer.de



DIFFU ERKENNT ZUSAMMENHÄNGE AUS SIMULATIONS DATEN AUTOMATISCH

Simulationen werden heute in allen Bereichen der Entwicklung neuer Produkte eingesetzt. Eine Herausforderung dabei ist, eine Vielzahl hochdimensionaler Datensätze zu analysieren, um Zusammenhänge zeit- und kosteneffizient zu extrahieren. Das Projekt DIFFU hat dafür innovative Lösungen entwickelt.

Numerische Simulationen dienen der Vorhersage der Eigenschaften neuer Produkte (beispielsweise von Automobilen). Im Fraunhofer-Innovationsprojekt DIFFU (Diffusions-Operatoren) wird ein neues diffusionsbasiertes Verfahren für die Analyse von Simulationsergebnissen entwickelt, das einen Überblick über viele Modellvarianten bietet.

Die Industrie speichert CAE (Computer-Aided Engineering)-Modelle und Simulationsergebnisse in Archiven von enormer Größe – so umfasst zum Beispiel das Archiv von AUDI derzeit die Simulationsergebnisse von mehr als 320.000 CAE-Modellen und wächst täglich um fast 1000 Modellvarianten. Bislang gilt es in der Industrie als visionär, das in solchen Archiven enthaltene Wissen automatisiert nachzuvollziehen (siehe Bild 1).

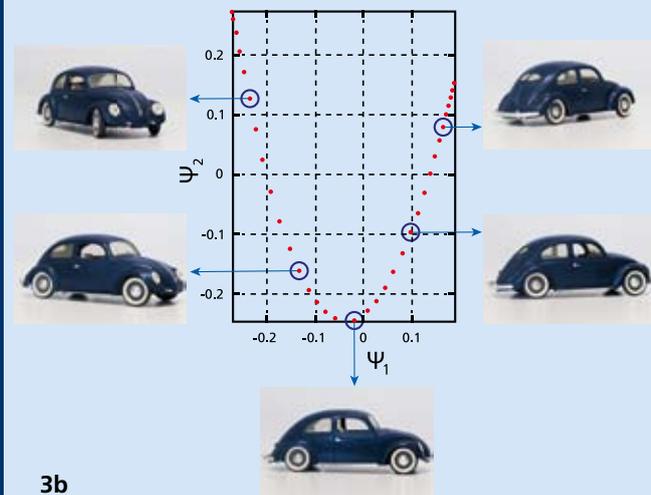
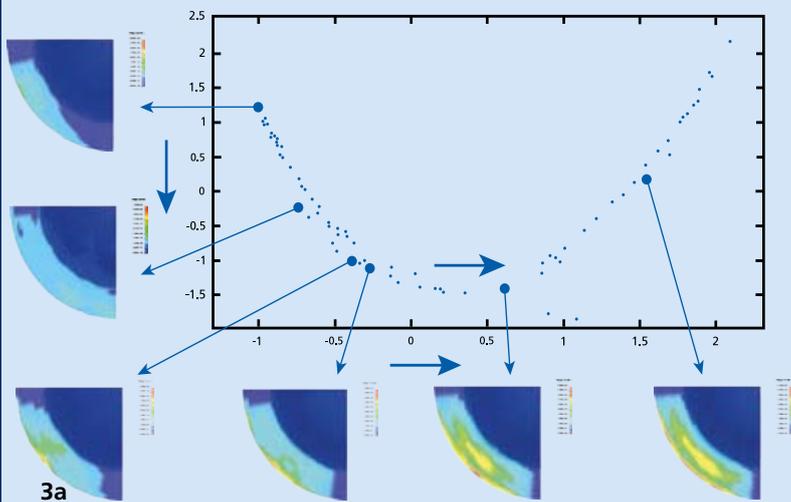
Wozu das Erkennen von Datenstrukturen dient, verdeutlicht ein Beispiel aus der Bildverarbeitung: Wird ein Datensatz mit Bildern des gleichen Objekts aus verschiedenen Winkeln erstellt, so ist der Winkel ein innerer Parameter des Datensatzes. Die Bilder lassen sich anhand dieses »Parameters« sinnvoll anordnen (siehe Bild 3b).

Das in DIFFU entwickelte Verfahren ermöglicht die Identifikation solcher Parameter für Simulationsdatensätze mit Methoden der hochdimensionalen Datenanalyse und Extraktion der Zusammenhänge. Dies geschieht durch ein diffusionsbasiertes Verfahren zur nichtlinearen Dimensionsreduktion, bei dem aus mehreren hochdimensionalen ähnlichen Datensätzen eine

intrinsische niedrigdimensionale Struktur extrahiert wird. Die Transformation basiert auf der diskreten Version eines Diffusions-Operators. Die Transformation generiert eine vereinfachte Darstellung des Originaldatensatzes. Was damit gemeint ist, veranschaulicht ein Beispiel (siehe Bild 2). Wenn eine mit Sand bestreute Platte in Schwingung versetzt wird, so sind auf der Platte verschiedene Muster zu erkennen, die sich je nach den Frequenzen der Schwingungen unterscheiden. Eine Änderung der Form der Platte bewirkt andere Frequenzen und Muster. So lässt sich die »Geometrie« durch die Frequenzen und/oder Schwingungen charakterisieren.

Mit dem gleichen Verfahren lassen sich Schwingungen und Frequenzen basierend auf einer Vielzahl von Datensätzen – beispielsweise Varianten mehrerer Motorhauben – ermitteln: Dabei repräsentiert jedes Sandkorn einen Datensatz und das Muster der Schwingung organisiert die Information auf der Basis der »Geometrie« (hier verstanden als Darstellung der Abstände zwischen den Datensätzen).

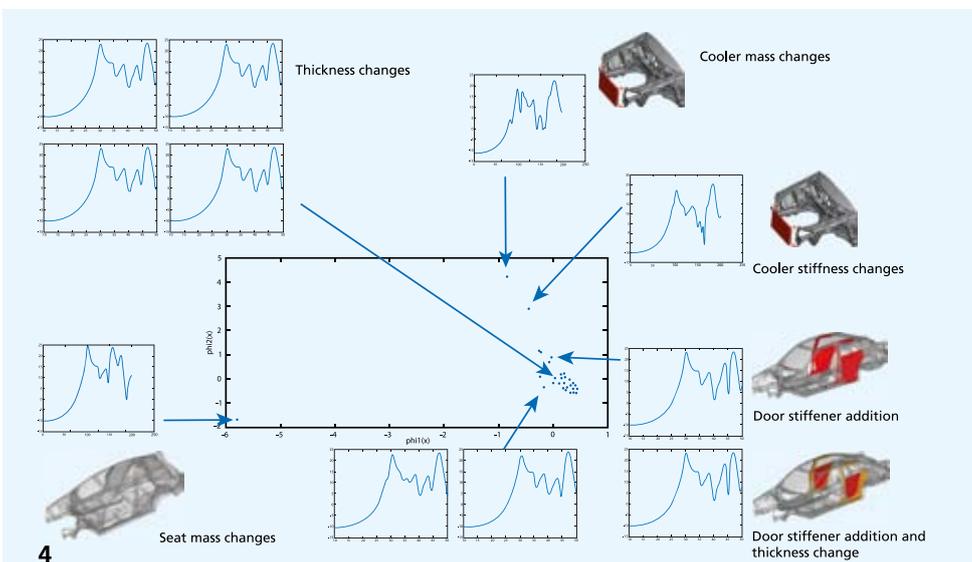
In DIFFU ist die automatische Identifikation von Parametern gelungen. Dazu wurden mehrere Berechnungen aus einer Umform-Simulation durch die zufällige Auswahl eines Material-Parameters generiert (siehe Bild 3a). Nach der Anwendung des Verfahrens auf die plastische Dehnung ist deutlich zu erkennen, dass das Verfahren alle Simulationen sinnvoll organisiert hat.



EIN VERFAHREN FÜR DIE PRAXIS

Ziel des Projekts war es, das Potenzial der beschriebenen Verfahren anhand realistischer Beispiele aus der Industrie zu zeigen, beispielsweise zur Verringerung unerwünschter Nebengeräusche im Kraftfahrzeug. Bild 4 zeigt das Ergebnis der Anwendung des Verfahrens auf so genannte NVH (Noise Vibration Harshness)-Simulationen. Die Automobilindustrie setzt solche Berechnungen ein, um das Schwingungsverhalten der Karosserie zu untersuchen. Aus diesen Simulationen werden Übertragungsfunktionen für unterschiedliche Komponenten, etwa die Konsole, extrahiert. Bei den zugrunde gelegten Modellen waren mehrere Parameter wie Blechdicke oder Masse verändert. Das DIFFU-Verfahren verarbeitet die Simulationen ohne Information darüber, welche Parameter verändert worden sind. Bild 4 zeigt, dass sich mittels des Verfahrens die verschiedenen Übertragungsfunktionen in Abhängigkeit von deren Parameterveränderungen sinnvoll organisieren lassen.

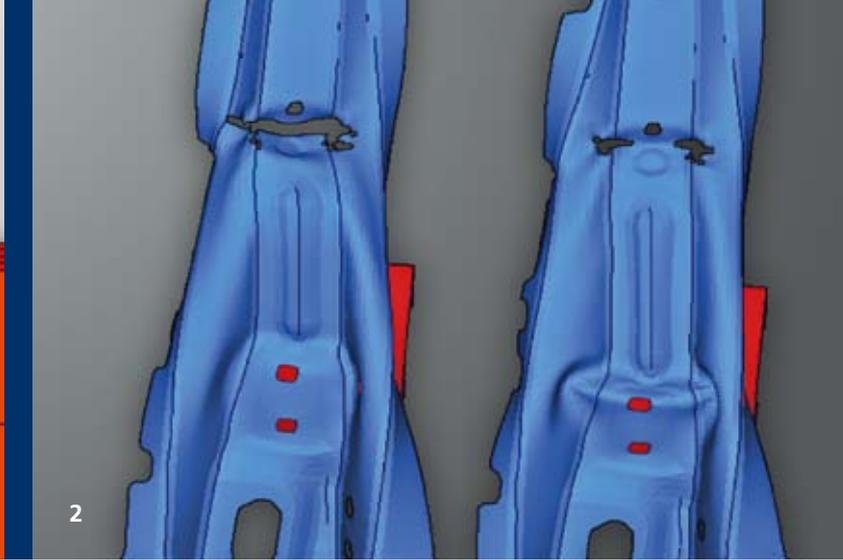
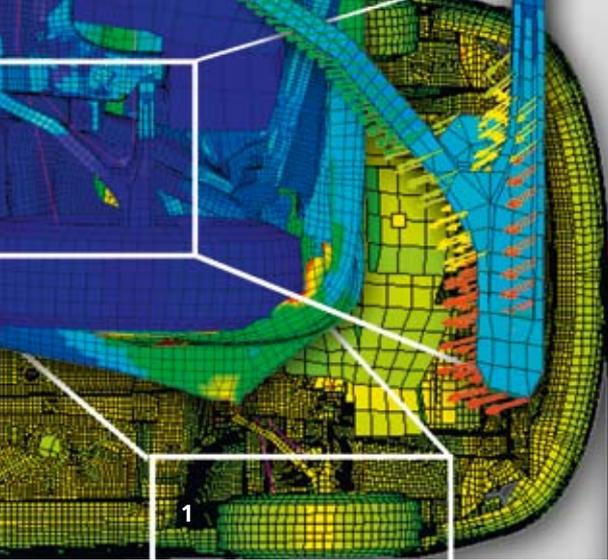
Diese neue Analysemöglichkeit ist einzigartig. Mit DIFFU lassen sich ein automatisierter Überblick über Modellvarianten erstellen sowie Einzelkomponenten extrahieren und darstellen. Die in DIFFU entwickelten Methoden werden weiterentwickelt: zum einen im Fraunhofer-Challenge »Förderung risikoreicher Projekte mit hoher Attraktivität im Erfolgsfall«, zum anderen im vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Projekt FEMMINER in Kooperation mit der Firma GNS in Braunschweig. Ziel ist es, der Industrie in den kommenden zwei Jahren Produkt und Dienstleistungen anbieten zu können.



- 1 Die Erkennung von Zusammenhängen aus Simulationsdatensätzen.
- 2 Verschiedene Frequenzen erzeugen für die Geometrie charakteristische Muster auf einer mit feinem Sand bestreuten Gitarrendecke und ebenso auf einer Motorhaube.
- 3a Organisation von Simulationsergebnissen durch automatische Identifikation von Parametern
- 3b Beispiel Bildverarbeitung: Visualisierungen eines Datensatzes lassen sich anhand eines charakteristischen Parameters automatisch neu organisieren.
- 4 Darstellung von Ergebnissen nach Anwendung des diffusionsbasierten Verfahrens auf Daten zur Simulation von Geräuschen, Vibrationen und Materialhärte im Automobilbau (von AUDI für das EU-Projekt SIMDAT zur Verfügung gestellt)

ANSPRECHPARTNER

Rodrigo Iza-Teran
 Telefon +49 2241 14-2712
 teran@scai.fraunhofer.de



SCHWANKUNGEN IN DEN GRIFF BEKOMMEN

Die Robustheit und Qualität von Produktionsprozessen kann erheblich unter Variationen von Materialeigenschaften, geometrischen Details und Prozessparametern leiden. Robust Design hilft, Entwicklungszeit und Kosten gering zu halten. Fraunhofer SCAI stellt innovative Lösungen zur robusten Optimierung von Produkten bereit.

Rechnergestützte Analysen und robuste multikriterielle Optimierung sind wichtige Werkzeuge, um die Auslegung von Produkten und die Steuerung des Fertigungsprozesses zu verbessern. Fraunhofer SCAI bietet dazu innovative Methoden und Ansätze, die mit Daten aus beliebigen Simulationsprogrammen oder physikalischen Messungen gekoppelt werden können.

DIFF-CRASH – Stabilitätsanalyse in der Crash-Simulation

Oft passen die Ergebnisse aus verschiedenen Durchläufen von Crash-Simulationen im Vergleich nicht zusammen. Physikalische Verzweigungen im Modell und numerische Instabilitäten im eingesetzten Simulationspaket führen häufig zu einer sehr empfindlichen Abhängigkeit der Ergebnisse von selbst kleinsten Änderungen im Modell oder auch der Simulationsumgebung (Zahl und Reihenfolge der Rechenknoten, Betriebssystem, Softwareversion).

Mit DIFF-CRASH können Schwankungen und Instabilitäten analysiert werden, die im Simulationsprozess auftreten. Dank DIFF-CRASH lassen sich Unterschiede statistisch analysieren, kritische Instabilitäten aufdecken, interpretieren und mit Hilfe spezieller Methoden zu den Ursachen zurückverfolgen.

Für die komplett neu aufgebaute Version 5.0 wurden Verfahren zum Korrelationsclustering sowie der Hauptkomponentenanalyse entwickelt.

DesParO – Exploration, Sensitivität, Robustheit, Optimierung

DesParO ist eine Software für interaktive, multikriterielle robuste Design-Parameteranalyse und -optimierung. DesParO erlaubt dem Anwender den gesamten Raum der Designvariablen interaktiv zu erkunden. Die Software bietet im Gegensatz zu bestehenden automatischen Optimierungsanwendungen einen globalen Blick auf den Designraum mit allen Alternativlösungen. So kann der Anwender die im Hinblick auf multiple Designansprüche optimierte Lösung finden. DesParO analysiert insbesondere Prozesse, die nur stichprobenartig durch kleine Mengen aufwendiger Simulationen oder physikalische Messungen erschlossen werden können. Beispiele sind die Umform-, Gieß-, Strömungs-, Belastungs- und Crash-Simulation.

DesParO kann Parameter-Sensitivitätsanalysen auch für Ensembles von Simulationsergebnissen auf hochaufgelösten Gittern effizient durchführen. Die wesentlichen Trends können extrahiert und komprimiert werden. DesParO bietet zudem eine schnelle Interpolation und Visualisierung von Simulationsergebnissen. Entsprechende, neu entwickelte Software-Module sind in Version 2.0 enthalten.



3



4

Prozesskette von Daimler effizient analysiert mit SCAITools

Mit Robust Design werden Simulationsprozesse noch realer. Die SCAI-Anwendungen DesParO und DIFF-CRASH übernehmen in diesem Kontext wichtige Aufgaben. Ein Anwendungsbereich, in dem DesParO und DIFF-CRASH gleich für mehrere Teilaufgaben zum Einsatz kommen, ist die Analyse von Prozessketten. Beispiele sind hier Prozesse wie Umformen zum Crash oder Gießen zum Crash.

Im Fraunhofer-Projekt CAROD wurde – mit Unterstützung der Daimler AG – die Blechschale einer B-Säule unter Robustheits-Gesichtspunkten analysiert. Die Analyse folgte dem Herstellungsprozess. Zunächst analysierte man den Umformprozess. Das Ausgangssimulationsmodell wurde mit DIFF-CRASH auf seine Stabilität hin untersucht. Anschließend wurde mit der Software DesParO für einen großen Satz von Material- und Prozessparametern (z.B. Ziehsickenkraft) der Einfluss realistischer Variationen auf die lokalen Blechdicken, Spannungen und Vorschädigungen bewertet (Simulationsresultate auf feinen Gittern!). Damit ließen sich die Parameter in ihrer Bedeutung klassifizieren, eine Reduktion des »Design-Raums« vornehmen und die robuste Optimierung vorbereiten. Danach begann die Vorbereitung der zweiten Stufe des Prozesses: ein Crashversuch.

Nach der Konstruktion einer effizient reduzierten Datenbasis mit steuerbarer Genauigkeit (wesentliches Variationsverhalten bleibt erhalten) wurde diese mit dem SCAIMapper als Input für die Crash-Simulationen übertragen. Das Vorgehen für den Crash-Versuch ähnelte der Methodik bei der Analyse des Umformprozesses. Nach einer Stabilitätsanalyse des Ausgangsmodells sowie zusätzlich zweier extremer Varianten mit der Software DIFF-CRASH folgte wieder eine Sensitivitätsanalyse mit DesParO. Schließlich wurde für die komplette Kette eine multikriterielle Optimierungsaufgabe unter Berücksichtigung von Robustheitsaspekten aufgesetzt und mit DesParO gelöst.

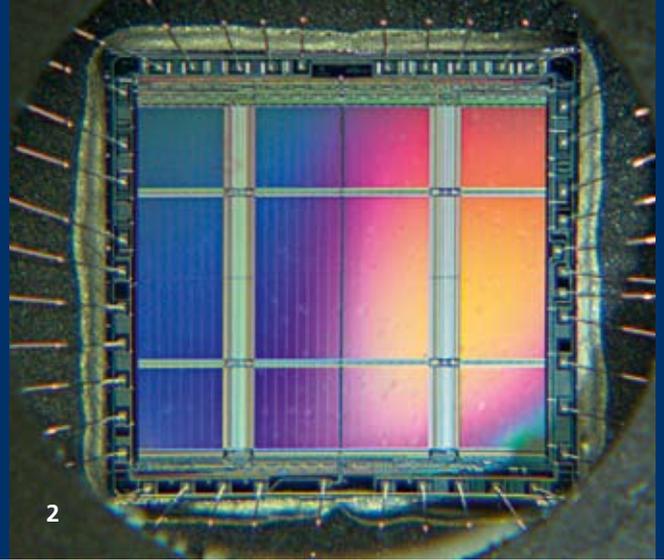
Indem man Herstellungsvariationen mit einbezieht, wird die Optimierung realistischer. Durch die Sensitivitätsanalyse der Prozesskette wurde das Zusammenspiel eines Risses der B-Säule mit einem Knick (Kompensationseffekt) deutlich. Dieses Ergebnis entspricht physikalischen Experimenten, aber es mussten keine teuren Bauteile zerstört werden.

ANSPRECHPARTNERIN

Dr. Tanja Clees

Telefon +49 2241 14-2983 | tanja.clees@scai.fraunhofer.de

- 1 Stabilitätsanalyse eines Neon Modells von Chrysler.
- 2 Wechselspiel von Riss und Knick, aufgedeckt durch PRO-CHAIN.
- 3 + 4 Die Benutzer-Oberfläche der Software DesParO mit den Hauptkomponenten Control, Explorer und Geometry Viewer.



ALGEBRAISCHE MEHRGITTERVERFAHREN

Simulationen erfordern die Lösung sehr großer Gleichungssysteme. Gleichungen mit mehreren Millionen Unbekannten sind hier keine Seltenheit. »Algebraische Mehrgitterverfahren« sind schnelle und effiziente Verfahren zur Lösung solch großer linearer Gleichungssysteme, die sich individuell in Simulationspakete integrieren lassen.

In vielen Anwendungen der numerischen Simulation, zum Beispiel der Strömungs- und Strukturmechanik, werden die Strukturen und Geometrien durch komplexe Gitter abgebildet. Je feiner die Auflösung eines solchen Gitters ist, desto genauer ist in der Regel die Simulation, umso größer sind aber auch die aus dem Diskretisierungsprozess resultierenden numerisch zu lösenden Gleichungssysteme. In den meisten Anwendungsfällen müssen riesige Gleichungssysteme gelöst werden – Systeme mit bis zu 100 Millionen Unbekannten.

Für solche Gleichungssysteme hat sich die »Algebraische Mehrgittermethodik« (AMG) als besonders effektiv erwiesen. Die Methodik wurde am Fraunhofer SCAI entscheidend mitentwickelt. SAMG ist eine Softwarebibliothek AMG-basierter Routinen zur hocheffizienten Lösung großer linearer Gleichungssysteme mit dünnbesetzten Matrizen, die sich bereits seit einigen Jahren in vielen Industriezweigen für verschiedene Anwendungsbereiche etabliert hat. SAMG bildet ein flexibles Framework hierarchischer Mehrgitterkomponenten, die für spezifische Anforderungen unterschiedlicher Anwendungsklassen kombiniert werden können.

Insbesondere in der Automobilindustrie kommen hierarchische Verfahren bereits seit langem zum Einsatz, zum Beispiel bei strömungsmechanischen Anwendungen. Weitere Anwendungsbereiche sind:

- Grundwassersimulation
- Ölreservoirsimulation
- Schaltkreissimulation
- Prozess-/Device-Simulation in der Halbleiterphysik
- Gießereitechnik
- Hydrothermale Erzanlagerungssimulation
- Strukturmechanik

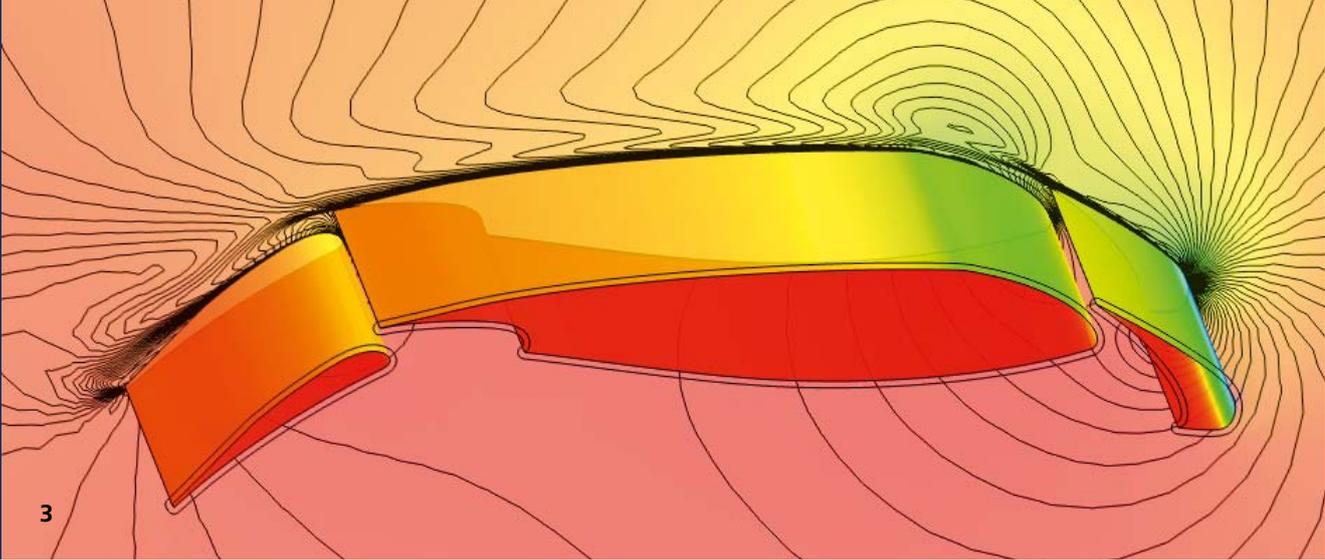
1 *In der Ölreservoirsimulation ist SAMG ein etabliertes Tool für viele bedeutende Ölfirmen und Softwareprovider.*

2 *Ein großes Potential liegt in neuen Anwendungsfeldern wie der Schaltkreissimulation.*

ANSPRECHPARTNER

Dr. Klaus Stüben

Telefon +49 2241 14-2749 | klaus.stueben@scai.fraunhofer.de



LÖSER FÜR SCHNELLERE NUMERISCHE SIMULATIONEN IN DER FLUGZEUGINDUSTRIE

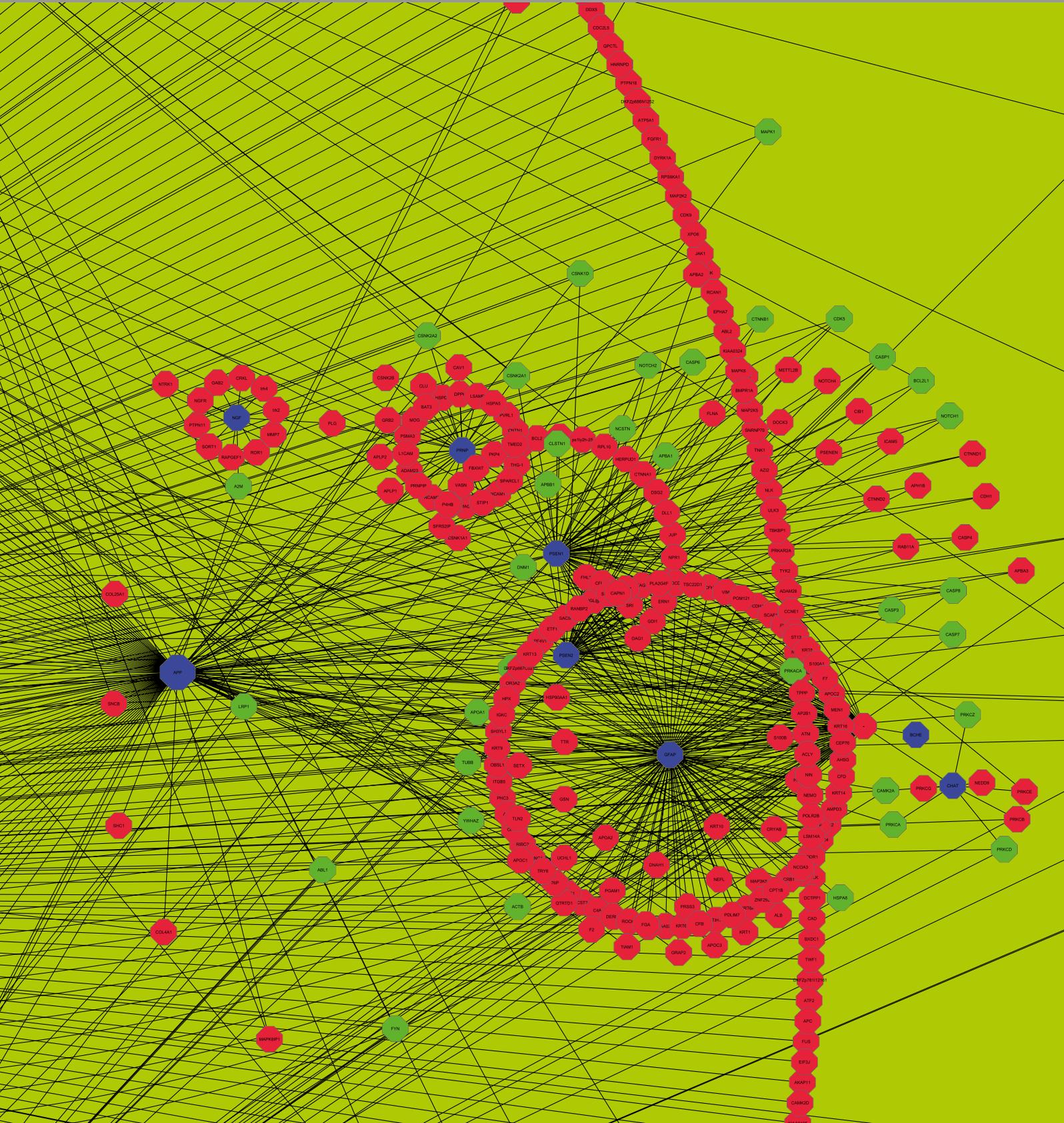
Im Flugzeugbau steigen die Anforderungen an numerische Simulationen ständig. Dies erfordert skalierbare Methoden zur effizienten Lösung der im numerischen Kern auftretenden riesigen linearen Gleichungssysteme. Fraunhofer SCAI beteiligt sich an dem vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie geförderten Projekt ComFliTe mit dem Ziel, die SCAI-Softwarebibliothek SAMG (Algebraic Multigrid Methods for Systems) für derartige Anwendungen einzusetzen.

Im Verbundvorhaben ComFliTe (»Computational Flight Testing«) geht es darum, numerische Simulation in der Flugphysik weiterzuentwickeln und verstärkt zu nutzen. In Zukunft soll sie als Hauptquelle für die Beurteilung des Design-Fortschritts im Flugzeugbau dienen. Ziele der numerischen Simulation sind der »Numerische Windkanal« sowie die virtuelle Flugerprobung. Von einer Echtzeitsimulation fliegender Flugzeuge ist man allerdings heute aufgrund der hohen Komplexität der Probleme und der extremen Anforderungen an Rechenleistungen noch weit entfernt. Einer der Gründe ist die unzureichende Effizienz und Robustheit der heute noch weitgehend benutzten klassischen Methoden bei der Lösung der auftretenden Gleichungssysteme. Die effiziente Lösung der extrem großen Gleichungssysteme, die bei der Simulation kompletter Flugzeuge auftreten, erfordert zwingend »skalierbare« Löser.

3 *Druck auf einer L1T2-Drei-Element-Tragfläche in High-Lift-Konfiguration.*

Die am SCAI mitentwickelte algebraische Mehrgittermethodik (AMG) hat sich für den industriellen Einsatz als besonders Erfolg versprechend erwiesen. Die auf AMG aufbauende Softwarebibliothek SAMG ist ein etabliertes Tool in vielen industriellen Anwendungsbereichen. Beispiele sind die Simulation von Öl- und Grundwasserreservoirs, von Form- und Gießprozessen, von Prozessen in der Halbleiterphysik sowie der Elektrochemie. SAMG ist kein festes Lösungsverfahren, sondern vielmehr eine modulare Bibliothek algorithmischer Komponenten, die sich – im Prinzip – auf die jeweiligen mathematischen Anforderungen einer speziellen Simulationsklasse anpassen lassen.

Für reale Anwendungen aus der Flugzeugsimulation steht allerdings die Anwendung der AMG-Technologie noch am Anfang. Die Hauptprobleme bilden dabei konvektionsdominante, stark gekoppelte Systeme partieller Differentialgleichungen (kompressible Navier-Stokes Gleichungen), kombiniert mit Diskretisierungen höherer Ordnung. Die Entwicklung robuster und effizienter Glättungsprozesse für derartige Anwendungen, sowie an die spezifischen Anforderungen der Flugzeugindustrie angepasste Vergrößerungsstrategien sind Gegenstand der Projektarbeiten am SCAI. In enger Zusammenarbeit mit dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) und Airbus soll eine erweiterte SAMG-Version schließlich zu einem Durchbruch verhelfen.



BIOINFORMATIK

Die Abteilung Bioinformatik des Fraunhofer SCAI hat in den Jahren 2009 und 2010 eine Reihe bemerkenswerter Erfolge verbuchen können. In allen Bereichen, die für die Erfolgsmessung einer Fraunhofer-Abteilung relevant sind, gelang im Berichtszeitraum eine signifikante Steigerung.

Die Kooperationen mit der Wirtschaft wurden intensiviert. Neben der Vermarktung selbst entwickelter Tools sind es vor allem spezielle Auftragsprojekte (zum Beispiel »Information Retrieval« in chinesischen Patenten), die zu einer engen Zusammenarbeit mit den Partnern aus der chemischen und pharmazeutischen Industrie führen.

Im Bereich der Förderung durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) ist es vor allem das im Kontext der »BioPharma-Initiative« des BMBF geförderte Neuroallianz-Projekt, das in besonderer Art und Weise wissenschaftliche Exzellenz und industrielle Innovation miteinander verbindet. In einer einzigartigen Kombination akademischer Partner (unter anderen dem Pharma-Zentrum der Universität Bonn) mit einem führenden pharmazeutischen Unternehmen (UCB-Pharma) wird in diesem Projekt ausgelotet, in wie weit in der pharmazeutischen Forschung und Entwicklung neue Impulse durch Public Private Partnerships gesetzt werden können.

Das von der Europäischen Kommission geförderte Projekt »@neurIST«, in dem die Abteilung das Arbeitspaket »Knowledge Discovery« leitete, wurde von Repräsentanten der EU als das »erfolgreichste eHealth-Projekt des 6. Forschungsrahmenprogramms« bezeichnet. Zusätzlich zu den wissenschaftlichen Erfolgen hat dieses Projekt auf Seiten von SCAI auch die Entwicklung eines neuen Tools initiiert: das Text Mining Tool »SCAIVIEW« ist aus den Forschungs- und Entwicklungsarbeiten im Projekt @neurIST hervorgegangen und wird inzwischen von der Abteilung vermarktet.

Ein weiteres Produkt ist aus dem Kontext des von der Kommission geförderten Projekts »SmartLM« (intelligentes Lizenz-Management) hervorgegangen. Das Team um Wolfgang Ziegler hat in der Abteilung eine nachhaltige Forschungs- und Entwicklungsagenda im Lizenzmanagement auf den Weg gebracht, und die Resonanz in der Wirtschaft auf »ElasticLM«, das neue Lizenzmanagement-Tool für verteilte Systeme, lässt die Erwartungen hinsichtlich der Möglichkeiten zur Kommerzialisierung dieses Tools wachsen.

Die strategische Bedeutung der universitären Anbindung der Abteilung an das Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT) steigt kontinuierlich. Es ist in den vergangenen Jahren gelungen, den gestiegenen Bedarf an exploratorischen Forschungsarbeiten sehr gut mit exzellenten Studierenden des Studiengangs Life Science Informatics zu adressieren. Unsere Industriepartner haben vermehrt Studierende zu Praktika eingeladen und aus einigen dieser Kontakte sind Masterarbeiten erwachsen, in denen industriell relevante Aufgaben bearbeitet wurden. Darüber hinaus zeichnet sich eine immer intensivere Kooperation zwischen universitären Forschungsgruppen und der Abteilung Bioinformatik in Schwerpunktthemen wie der Demenzforschung ab; eine Entwicklung, die auch von unseren industriellen Kooperationspartnern sehr begrüßt wird.

Abteilungsleiter
Prof. Dr. Martin
Hofmann-Apitius
Telefon +49 2241 14-2802
martin.hofmann-apitius@
scai.fraunhofer.de

stv. Abteilungsleiter
Dr. Marc Zimmermann
Telefon +49 2241 14-2276
marc.zimmermann@
scai.fraunhofer.de

by **SRB1**. Control of **SRB1** protein levels by **SRB2** may represent a versatile mechanism for fine-tuning of the expression of this key regulatory kinase by different extracellular signals.

Results

SRB2 associates with **SRB1** and this process is facilitated by β -AR stimulation and β -arrestin

SRB1 is acutely degraded by the proteasome pathway in response to β -AR agonist stimulation, whereas the turnover of the GPCR-**SRB1** complex, which lacks kinase activity, is severely impaired (Drecks et al., 1998). We have also reported that **SRB1** turnover is dependent on β -arrestin function, and that overexpression of either β -arrestin1 or β -arrestin2 is able to rescue GPCR-**SRB1** proteolysis (Drecks et al., 2001), thus suggesting that these adapter molecules may recruit some of the factors needed for **SRB1** ubiquitination and proteasome degradation. Interestingly, β -arrestins interact with **SRB1**, bringing this protein to the plasma membrane β -AR complex where **SRB1** triggers ubiquitination of β -arrestin auto-phosphorylation (Drecks et al., 2001; Wang et al., 2002). **SRB1** is also part of activated GPCR complexes, a possibility that **SRB1** could act as a GPCR-regulator. Consistent with this idea, we find that endogenous **SRB1** and **SRB2** can associate in MCF7 cells, as shown by co-immunoprecipitation experiments using either anti-**SRB1** or anti-**SRB2** antibodies (Supplementary data and Supplementary Figure S1A). This suggests that both proteins can be found in the same molecular complex at steady-state conditions "in situ".

We have previously shown that agonist stimulation of β -AR decreases **SRB1** half life from 60 min (basal conditions)

1

Entrez Gene

UniProt

Pathway/Interaction Databases

Proprietary knowledge

SEMANTISCHE SUCHE IN BIOMEDIZINISCHEN FACHTEXTEN

Aktuelle Information über Gene und Krankheiten sowie Informationen über die Wirkungsweise von Medikamenten und deren Inhaltsstoffe finden sich zumeist nicht in Datenbanken, sondern in wissenschaftlichen Publikationen und Patenten.

Die relevanten Informationen in gigantischen Textmengen zu finden, stellt die Forschung heute jedoch vor enorme Probleme. Zwei am Fraunhofer SCAI entwickelte Werkzeuge unterstützen Forscher bei der Wissensexploration:

- ProMiner identifiziert biomedizinische und chemische Fachbegriffe in Texten und
- SCAIView, die semantische Suchmaschine zum Auffinden aggregierter Informationen in großen Textmengen.

1 ProMiner erlaubt Querverbindungen zu Experimentaldaten, interaktiv genutzten Datenbanken sowie proprietären Datenbanken.

ProMiner verwendet zur Erkennung der Begriffe Wörterbücher. Die Software kann mit riesigen Vokabularien, Thesauri oder Ontologien arbeiten. Eine automatische Wörterbuch-Generierung, Korrektur von Einträgen und ein Aktualisierungsprozess ist ebenfalls integriert. Etablierte Wörterbücher werden regelmäßig aktualisiert, da die Forschung ständig das Wissen über Gene und deren Variationen, wirksame Medikamente oder Klassifikation von Krankheiten weiterentwickelt. Außerdem enthält ProMiner Wörterbuch-unabhängige, auf maschinellem Lernen basierende Methoden zur Erkennung und Klassifizierung von Fachtermini.

ProMiner löst mehrere fundamentale Probleme der Namenserkennung:

- Erkennung biomedizinischer Fachbegriffe und deren Schreibvarianten in Texten
- Abbildung von Synonymen auf Referenzbezeichnungen und Datenquellen
- Kontext-abhängige Auflösung von Mehrdeutigkeiten (Disambiguierung) biomedizinischer Kurznamen und Abkürzungen

Die in Fachtexten annotierte Terminologie kann farblich hervorgehoben werden, um den Lesern das Erfassen relevanter Inhalte zu erleichtern (vgl. Bild 1). Außerdem sind die markierten Begriffe mit den Datenbank-Quellen verlinkt, die es ermöglichen, direkt zu relevanten Hintergrundinformation zu springen. Das können Datenbankeinträge der Referenzdatenbanken sein oder auch proprietäre Datenbanken, die experimentelle Daten des entsprechenden Unternehmens enthalten. Dadurch ist es möglich, existierendes Wissen aus unstrukturiertem Text mit bekannten strukturierten Daten aus Datenbanken und neuem Wissen aus experimentellen Daten zu verknüpfen. Eine neue Entwicklung ist die Layout-getreue Visualisierung von Entitäten

Entity Tree View, select Entity Class to view and search

Documents Entity Analysis

Subcorpus Statistics Server Statistics

The following entities relating to "Intracranial AND aneurysm*" were found in 907 documents.

463 items found, displaying 1 to 50 [First/Prev] 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 [Next/Last]

Select	Entity	Relative Entropy	KEGG Pathway	Ref. Doc Count	Doc Count	Date Reported
<input type="checkbox"/>	PLAT	0.1825	Complement and coagulation cascades 04610	13655	59	2009-07-
<input type="checkbox"/>	ELN	0.1551	Calcium signaling pathway 04020	6272	46	2009-09-
<input type="checkbox"/>	PKD1	0.0772	VEGF signaling pathway 04370	771	16	2008--
<input type="checkbox"/>	NOS3	0.0681	Long-term depression 04730	10491	27	2009-07-
<input type="checkbox"/>	EDN1	0.0478	Arginine and proline metabolism 00330	16100	24	2008-03-
<input type="checkbox"/>	AVP		Neurotransmitter ligand-receptor interaction 04060	31	2007-01-	
<input type="checkbox"/>	MMP9		Calcium signaling pathway 04020	21	2009-03-	
<input type="checkbox"/>	SERPINA1	0.0450	Small cell lung cancer 05222	11516	21	2009-02-

SERPINA1: serpin peptidase inhibitor, clade A (alpha-1 antitrypsin), member 1

direkt in PDF-Dokumenten. Auch hier werden die erkannten Terme farblich hervorgehoben und enthalten die Referenzen zu den entsprechenden Datenquellen.

Die semantische Suchmaschine SCAIView wurde entwickelt, um Suchen in großen Textmengen zu ermöglichen und um Informationen aus anderen Datenquellen direkt in die Suche integrieren zu können. SCAIView erlaubt schnelles Suchen in Volltext und in den biomedizinischen Konzepten, die von ProMiner annotiert wurden. Diese Konzepte sind in suchbare Hierarchien eingebettet und enthalten zum Beispiel Gene, Proteine und assoziierte Einzelnukleotid-Polymorphismen (SNPs), chemische kleine Moleküle oder medizinische Terminologie.

Außerdem sind in SCAIView relevante Inhalte aus anderen Datenbanken integriert. Das können für Gene zum Beispiel die Informationen sein, zu welchen Signalwegen ein bestimmtes Gen gehört oder mit welchen Medikamenten oder chemischen Inhibitoren es interagiert oder welche SNPs es hat.

Fortgeschrittene Suchtechnologien ermöglichen mit dieser Kombination die Antwort komplexer Fragestellungen wie

- Welche Gene/Proteine haben eine Rolle in einer bestimmten Krankheit?
- Welche relevanten biomedizinischen Fachtermini finde ich in meinem Subkorpus?
- 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?

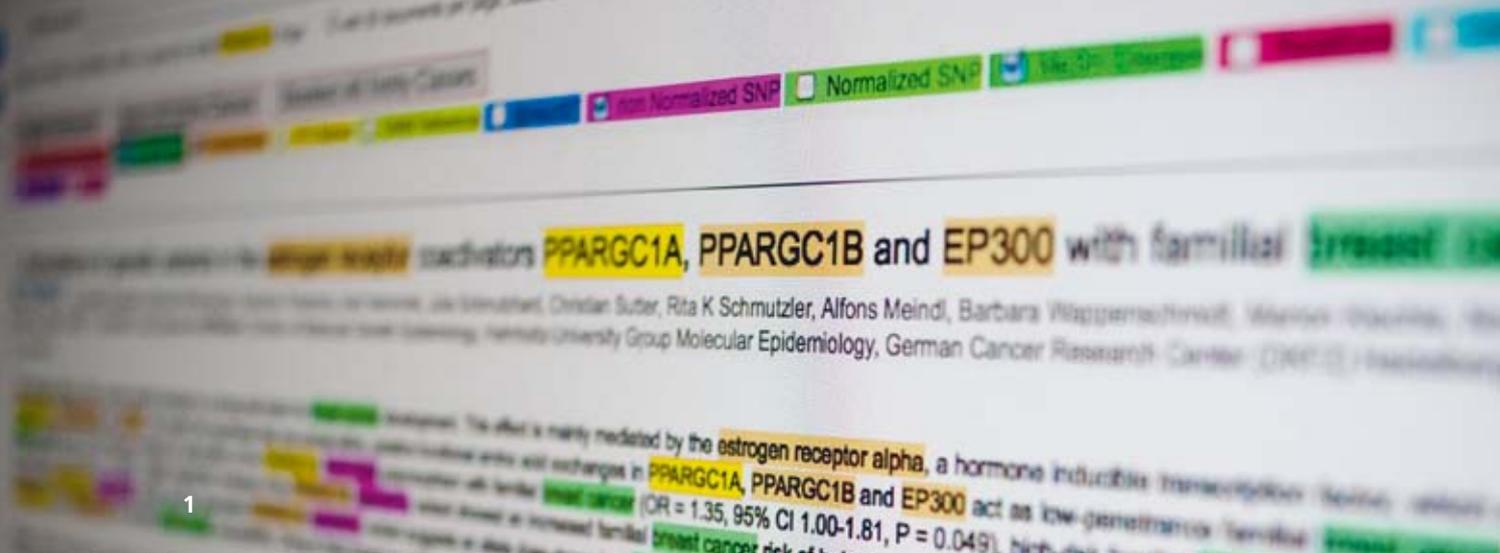
SCAIView erlaubt schnelle Suchen in großen Korpora und benutzt statistische Maße (Relative Entropie), um die Ergebnisse einer spezifischen Suche mit unspezifischen Suchen vergleichen und danach bewerten und ordnen zu können. Zusätzlich zur Entitätensicht mit Referenz zu den jeweiligen Datenbanken können die Dokumente mit den gefundenen Begriffen angezeigt werden. Dies verschafft den Wissenschaftlern einen schnellen Überblick.

ANSPRECHPARTNERIN

Dr. Juliane Fluck

Telefon +49 2241 14-2188 | juliane.fluck@scai.fraunhofer.de

2 Die Entitätensicht in SCAIView zeigt die gefundenen Entitäten sortiert nach ihrer Relevanz an. Sie enthält Links zu Referenzdatenbanken und zu den gefundenen Textstellen.



1 *Verschiedene biomedizinische und chemische Fachbegriffe werden farblich hervorgehoben.*

VON ANEURYSMEN ZU PÄDIATRISCHEN KRANKHEITEN

Die Ruptur eines Aneurysma kann zum Tode führen oder Behinderungen hervorrufen, wie sie auch nach Schlaganfällen auftreten. Die meisten Aneurysmen bleiben aber stabil und reißen nie. Chirurgische und endovaskuläre Eingriffe zur Stabilisierung solcher Ausstülpungen von Blutgefäßen sind mit einem erheblichen Risiko für den Patienten verbunden. Das von der Europäischen Kommission geförderte Projekt @neurIST bietet Entscheidungshilfen für oder gegen eine Operation.

In einem europäischen Computer-Netz wurde das Wissen unterschiedlicher klinischer und wissenschaftlicher Einrichtungen zusammengeführt und Information genetischer Datenbanken, Forschungsliteratur und klinischer Patientendaten und Simulationen kombiniert und ausgewertet. Dazu wurde eine umfassende Informationstechnik-Infrastruktur aufgebaut. Mit ihr ist es möglich, heterogene Datensätze zu verwalten und auszuwerten, die sowohl aus der Diagnostik als auch aus epidemiologischen Studien stammen.

Das von Fraunhofer SCAI entwickelte System SCAIView ist in diese Infrastruktur integriert und erlaubt es, mit hoher Zuverlässigkeit alle im Krankheitskontext relevanten Faktoren wie Gene und Proteine, Genvarianten sowie Medikamente zu identifizieren. Die Schlüsseltechnologie in SCAIView ist die semantische und ontologische Suche. Im Kern wird SCAIView auf einen großen Volltext-Index der biomedizinischen Literaturdatenbank PubMed angewandt. Dieser Index enthält zusätzlich die Annotationen biomedizinischer Terminologie die mithilfe des Namenserkenners ProMiner gefunden wurde.

SCAIView kann zum Beispiel folgende Frage beantworten: »Welche Gene oder Genvariationen können an der Entstehung zerebraler Aneurysmen beteiligt sein?« Durch die Auswertung großer klinischer Studiendaten über genetische Variationen sowie

von SCAIView erfasster, in der Literatur bekannter genetischer Variationen ist es zum Beispiel gelungen, drei neue Risikogene für zerebrale Aneurysmen zu finden. Eine Suchmaschine zum Auffinden von Beziehungen zwischen den im Projekt Health-e-Child (HeC) vorhandenen Daten und Gen-basierten publizierten Datenquellen fehlte jedoch. Nach erfolgter Integration der Ergebnisse von SCAIView über einen Webservice lassen sich nun außer Suchen in Datenbanken wie SwissProt entsprechende Kandidaten-Gen-Suchen anhand automatischer Literaturrecherchen für die oben genannten Krankheiten darstellen.

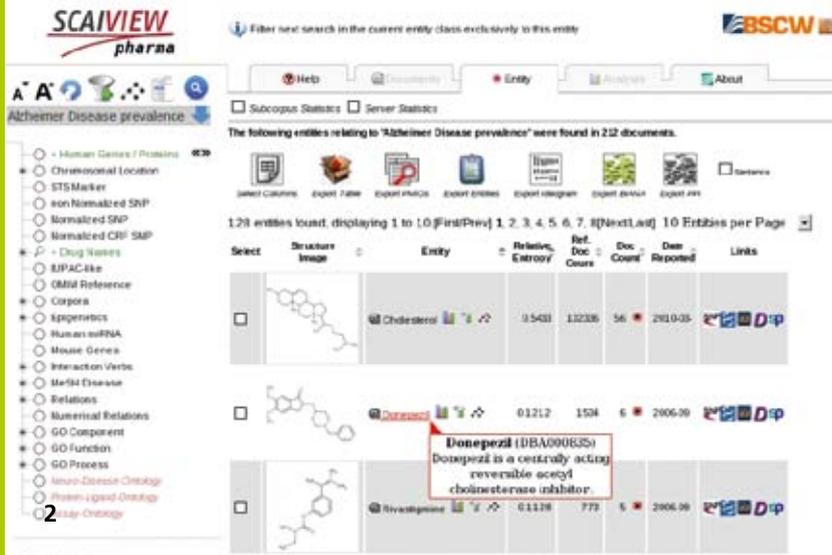
Um diese erfolgreiche Kombination der Auswertung aktueller Patientendaten mit schon bekanntem Wissen auch bei anderen Krankheiten zu ermöglichen, ist SCAIView in einem weiteren Schritt in das von der Europäischen Kommission geförderte Projekt HeC integriert worden. Dort gelang es, die biomedizinischen Wissensdomänen für die Bereiche pädiatrische Herzkrankheiten, entzündliche Krankheiten und Hirntumore mit Hilfe eines speziellen 3-D-Browsers darzustellen.

@neurIST wurde im Frühjahr 2010 beendet.

ANSPRECHPARTNERIN

Dr. Juliane Fluck

Telefon +49 2241 14-2188 | juliane.fluck@scai.fraunhofer.de



- 1 Sichere Zusammenarbeit im World Wide Web
- 2 SCAView visualisiert Suchergebnisse.

NEUROALLIANZ-KONSORTIUM FORSCHT AN DER MEDIZIN DER ZUKUNFT

Um dem Biotechnologie- und Pharmastandort Deutschland neue Impulse zu geben, hat das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) die Pharma-Initiative »BioPharma: Für die Medizin der Zukunft« gestartet. Das für diese Initiative nominierte Neuroallianz-Konsortium hat ein neuartiges strategisches Partnerschaftsmodell entworfen, bei dem akademische Institutionen und Pharmaunternehmen eine Reihe diagnostischer und therapeutischer Forschungsprojekte bearbeiten. Ziel ist es, Forschungsaktivitäten gezielt in für Patienten greifbare Vorteile zu transformieren. Schwerpunkte sind die Diagnostik und die Therapie neurodegenerativer Erkrankungen wie Morbus Alzheimer, Morbus Parkinson oder Epilepsie. Das Projekt begann im Jahr 2009 und läuft bis zum Jahr 2015.

Das Fraunhofer-Institut SCAI entwickelt im Neuroallianz-Projekt eine gemeinsame Informationstechnik-Plattform für die beteiligten Partner. Sie soll eine Vielzahl von Anforderungen erfüllen:

- Sicherer Austausch und Verwaltung von Daten und Dokumenten,
- Unterstützung kollaborativer Projektarbeit,
- Bereitstellung von Data-Mining-Funktionalitäten (inklusive »data mining workflows«),
- Arbeitsumgebung für die Wissensentdeckung (»knowledge discovery«) aus strukturierten und unstrukturierten Datenquellen.

Die zentrale IT-Infrastruktur besteht aus Modulen, die auf einen störungsfreien und sicheren Betrieb des Gesamtsystems hin ausgewählt und optimiert werden. Für den Datenaustausch und die Projektarbeit wurde ein eigenes Modul auf Basis eines kommerziellen Systems für kollaboratives Arbeiten implementiert. Außerdem werden spezielle Data-Mining-Verfahren in Form vorkonfigurierter, automatisch ausführbarer Workflows angeboten. Ein weiteres Modul für die Wissensentdeckung aus unstrukturierten Daten (Text Mining) basiert

auf den am SCAI entwickelten Technologien zum Text-Mining (ProMiner, SCAView).

Die Projektpartner können per Web-Oberfläche auf die Module zugreifen. Die Entwicklung des Systems findet in Zusammenarbeit mit Experten des Industriepartners, der UCB Pharma GmbH, statt. Die IT-Infrastruktur erfüllt die Sicherheitsanforderungen der industriellen Partner im Projekt und wird als Lösung für Kooperationen zwischen Industrieunternehmen und akademischen Partnern in Biotechnologie und Pharmaindustrie weiterentwickelt. Ein zusätzliches Ziel der Zusammenarbeit ist es, neue Zielproteine degenerativer Krankheiten wie Morbus Alzheimer und Morbus Parkinson zu identifizieren und in-silico zu validieren.

ANSPRECHPARTNER

Stephan Springstube

Telefon +49 2241 14-2337 | stephan.springstube@scai.fraunhofer.de



GUTER GESCHMACK WIRD MESSBAR

Künstliche Intelligenz ermöglicht die Synthese von sensorischer Erfahrung und chemischer Analyse

Das »Messinstrument Mensch« kann Geschmackseindrücke erkennen und interpretieren, eine Maschine nicht. Aber Geschmackstests sind im Vergleich zu technischen Messungen ungenau und abhängig von subjektiven Faktoren. Methoden aus der künstlichen Intelligenz sollen eine Synthese von komplexen Geschmackserfahrungen und eindeutigen chemischen Analysen ermöglichen. Von einer erhöhten Objektivität bei der sensorischen Bewertung von Rohstoffen und Lebensmittelprodukten würden Nahrungsmittelindustrie und Verbraucher profitieren.

Ist in Milkschokolade überhaupt noch Milch? Oder dominiert hier bereits das günstigere Pflanzenfett? Hat der barriquegereifte Wein tatsächlich ein Barriquefass gesehen, oder wurde er mit aromatisierten Holzschnipseln versetzt? Sowohl Produkte global agierender Lebensmittelkonzerne als auch kleine, traditionell hergestellte, regionale Erzeugnisse haben ihre Anhänger, die es verdienen, sicher zu sein, was sie genießen. Auf der anderen Seite sind Unternehmen jeder Art daran interessiert ihre Rezepturen zu verbessern, um dem Verbraucher optimale Qualität zu bieten. Dies kann nur gelingen, wenn Klarheit über die verwendeten Rohstoffe herrscht und das Zusammenwirken einzelner Inhaltsstoffe bekannt ist. Eine neue Methode zur Bestimmung der geschmacklichen Wechselwirkung einzelner Komponenten unserer Nahrung wird zurzeit am ttz Bremerhaven in dem vom Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie geförderten Projekt KosaDat erprobt.

Hinter der Projektidee steht die Entwicklung einer Methode zur computergestützten Vorhersage sensorischer Parameter wie Geschmack, Geruch und Textur sowie der Verbraucherakzeptanz. Dies soll einzig durch Kenntnis der chemischen Zusammensetzung eines Produktes möglich werden. Bitterschokolade dient dem Konsortium hierbei als ein erstes Untersuchungsmodell. Ziel des Projektes ist es, mit Hilfe der Datensynthese aus chemischer Analytik und Humansensorik Vorhersagen marktrelevanter und objektiver sensorischer Qualitätsfaktoren von Rohstoffen, Zwischen- und Endprodukten zu treffen. KosaDat ist die Kurzform des Projektnamens »Korrelation von sensorischen und analytischen Daten«. Das Konsortium besteht neben dem ttz Bremerhaven aus der Firma Bremer Hachez Chocolate und dem Fraunhofer SCAI.

Eine objektive Messmethode, mit der präzise und schnell interpretierbare Qualitätsprofile vorgelegt werden können, hilft den Verbrauchern wie auch den Unternehmen: Beide können auf eine verbesserte Aussagekraft der Qualitätstests hoffen. Insbesondere für die Qualitätskontrolle besteht eine verstärkte Nachfrage nach instrumentellen Messmethoden, die unter Berück-



sichtigung humansensorischer Daten ein präzises und schnell interpretierbares Qualitäts- und Akzeptanzbeurteilungsprofil ermöglichen sollen. Objektiv ermittelte Datensätze, bestehend aus einer aussagekräftigen Kopplung sensorischer und chemisch-physikalischer Daten, haben das Potential, in allen Produktions- und Entwicklungsphasen einen großen Beitrag zur Produktoptimierung bei gleichzeitiger Ressourceneinsparung zu liefern. Die Anzahl an umfangreichen und kostenintensiven sensorischen Untersuchungsmethoden können zudem deutlich reduziert werden. Da zugleich Qualitäts- und Preiseinstufungen für die Öffentlichkeit transparenter werden, stehen auch objektive Werkzeuge für einen effizienten Verbraucherschutz zur Verfügung.

Um statistisch abgesicherte Aussagen über die Korrelation der lebensmittelchemischen und sensorischen Profile treffen zu können, muss ein großer Datensatz aus möglichst vielen verschiedenen Produktionsabschnitten generiert werden. Alle Resultate aus der chemischen und sensorischen Messung werden automatisch in einer vom Fraunhofer SCAI entwickelten Datenbank abgelegt. Mit Methoden aus der künstlichen Intelligenz, einem Teilgebiet der Informatik, welches sich mit der Automatisierung intelligenten Verhaltens befasst, werden die in der Datenbank eingepflegten Datensätze so aufbereitet, dass sich zusammenhängende Substanz- und Sensorik-Muster automatisch identifizieren lassen.

Die verwendeten IT-Verfahren erlernen die Mustererkennung zunächst anhand von Schokoladenproben, deren chemische und sensorische Profile bekannt sind. Dies erlaubt eine ständige Optimierung des Verfahrens, um letztlich die Schokoladenqualität, die Verbraucherakzeptanz sowie die sensorische Empfindung einzig anhand des chemischen Profils zuverlässig vorherzusagen.

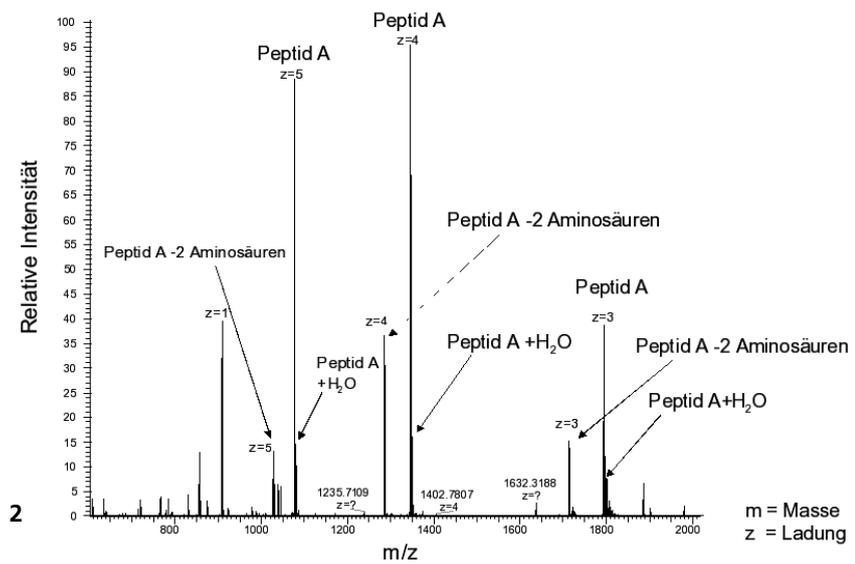
ANSPRECHPARTNER

Christian Ebeling

Telefon +49 2241 14-2257 | christian.ebeling@scai.fraunhofer.de

1 Auf die inneren Werte kommt es an. Konsumenten dunkler Schokoladen wissen die unterschiedlichen Aroma- und Geschmacksstoffe zu schätzen. Deren Zusammensetzung beeinflusst den Erfolg oder Misserfolg einer Schokolade.

2 Dunkle Schokolade ist nicht immer gleich. In sensorischen Profilen (graphische Darstellung „Spiderweb“) können die Unterschiede einfach sichtbar gemacht werden. Durch die Verknüpfung dieser Profile mit den Konsumenten- und Analytikdaten mittels Künstlicher Intelligenz können dann Vorhersagen über die Qualität gemacht werden.



SOFTWARE FÜR SICHERHEIT GENTECHNISCH HERGESTELLTER BIOPHARMAZEUTIKA

Im Projekt BioEquality entsteht eine Software zur automatisierten Analyse der Qualität von Biopharmazeutika und der Äquivalenz sogenannter Biosimilars.

Seit der Markteinführung von Humulin (humanes Insulin) im Jahr 1982 nutzt man gentechnisch hergestellte Proteine als biopharmazeutische Wirkstoffe. Doch erst in den vergangenen fünf Jahren stieg die Zahl der Zulassungen und damit verbunden die Zahl der Markteinführungen der Biopharmazeutika rapide an. Hinzu kommt, dass der Patentschutz der Biopharmazeutika der ersten Generation bereits abgelaufen ist oder in den nächsten Jahren ablaufen wird und Hersteller von Generika auf den Biopharmazeutikamarkt drängen. Diese sogenannten Biosimilars müssen zeigen, dass sie mit dem ursprünglich entwickelten Wirkstoff vergleichbar sind. Die International Conference for Harmonisation (ICH) hat eine Richtlinie für die Analyse von Biopharmazeutika entworfen. Hauptanliegen der Regelungen ist es, die kontinuierliche Produktqualität von der Entwicklung bis zur Freigabe jeder einzelnen Herstellungs-Charge sicherzustellen.

Pharmazeutische Proteine werden zunehmend mittels Peptide Mass Maps charakterisiert. Peptide, die in einer enzymatischen Reaktion mit Endopeptidasen aus dem Protein entstehen, werden mittels Flüssigchromatographie und gekoppelter Massenspektrometrie analysiert und bilden so kleinste Veränderung an der Primärstruktur des Proteins ab. Die vergleichende Analyse der Peptide Mass Maps von einer Referenz mit anderen Proben erlaubt eine umfassende Aussage über Veränderungen der Produktqualität. Stellt man die Messdaten gegenüber, müssen oft mehrere hundert Massensignale miteinander verglichen werden, was manuell nur sehr aufwändig zu bewerkstelligen und daher in der Praxis nicht umsetzbar ist.

Mit dem im Zentralen Innovationsprogramm Mittelstand (ZIM) des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie geförderten Projekt BioEquality soll eine Softwarelösung erarbeitet werden, die sowohl eine Archivierung von Peptide Mass Map-Daten vornimmt als auch einen automatisierten Vergleich dieser Daten ermöglicht. Die Grundlage für das Projekt BioEquality bietet die Software MassMap, entwickelt zur umfassenden Charakterisierung von Peptide-Mass-Map-Daten. Die A&M STABTEST GmbH hat seit über einem Jahrzehnt Erfahrung in der Charakterisierung von Biopharmazeutika und Biosimilars mittels Massenspektrometrie im Auftrag der Pharmaindustrie. Diese Erfahrung in der Generierung und im Umgang mit Peptide-Mass-Map-Daten soll in Kooperation mit dem Fraunhofer SCAI genutzt werden. Ziel ist es, eine Software zu entwickeln, die regulatorische Ansprüche der Pharmaindustrie (Richtlinien der Arzneizulassungsbehörde Food and Drug Administration (FDA) in den USA) im Fokus hat.

- 1 *LITQ-Orbitrap Massenspektrometer ermittelt die Massen ionisierter Molekülen. Dieses Gerät ermöglicht im Vergleich zu anderen Massenspektrometern eine besonders genaue Darstellung der Massen.*
- 2 *Ein typisches Massenspektrum eines Peptids. Zu sehen sind drei unterschiedlichen Ladungszustände (Ionisierungsgrade) sowie ein Wasseraddukt und ein Abbauprodukt des Peptids in Form einer Abspaltung von zwei Aminosäuren. Solche Spektren werden u.a. dazu verwendet, Modifikationen und Abbauprodukte pharmazeutisch wirksamer Proteine zu analysieren.*

ANSPRECHPARTNER

Christian Ebeling
 Telefon +49 2241 14-2257
 christian.ebeling@
 scai.fraunhofer.de

LÖSUNGEN FÜR DAS MANAGEMENT VON GRID- UND CLOUD-INFRASTRUKTUREN

In mehreren von der Europäischen Kommission und vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderten Projekten erforscht die Abteilung Bioinformatik Informationstechnik-Infrastrukturen für künftige IT-Dienstleistungen. Themen dabei sind unter anderen Sicherheit, Föderation von Ressourcen, Dienstgütern, Optimierung von Cloud-Infrastrukturen und Management von Software-Lizenzen.

Vertrauen und Sicherheit in verteilten Systemen

Um Vertrauen und Sicherheit zu gewährleisten, müssen die Anbieter von IT-Ressourcen ihre Kunden authentifizieren und zur Nutzung bestimmter Angebote autorisieren. Im Projekt AAI/VO entwickelt SCAI standardisierte Verfahren zur Authentifizierung und Autorisierung für die deutsche Grid-Initiative (D-Grid). Diese sollen nach Abschluss des Projekts in den Regelbetrieb des D-Grid übernommen werden. Die Verfahren basieren auf statischen und dynamischen X.509 Zertifikaten, Virtuellen Organisationen und Benutzerattributen.

DGSI – Effektive Föderation von Ressourcen im D-Grid

Bei der Nutzung von IT-Ressourcen treten gelegentliche Lastspitzen auf. Für diese Fälle weitere Ressourcen vorzuhalten, ist teuer und verursacht einen hohen Energieverbrauch. Im vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderten Projekt D-Grid Scheduler Interoperability (DGSI) hat man für dieses Problem zwei Lösungen entwickelt.

1. Einen automatisierten Lastausgleich zwischen verschiedenen ausgelasteten Ressourcenanbietern. Dazu werden IT-Jobs an andere Anbieter delegiert. Diese Technik eignet sich besonders für Grid-Infrastrukturen.
2. Eine temporären Delegation externer Ressourcen, die logisch die eigenen erweitern. Diese Technik ist für Grid- und Cloud-Infrastrukturen geeignet.

SLA4D-Grid – Verlässliche Dienstgütern in verteilten Systemen.

Service Level Agreements zwischen Diensteanbietern und ihren Klienten sind übliche Verfahren, um die Qualität der Dienstleistung zu vereinbaren. Diese Vereinbarungen sind bis heute schriftlich gefasst und damit für Umgebungen nicht verwendbar, in denen dynamisch Dienstnutzung und deren Qualität vereinbart werden, wie die Nutzung von Ressourcen und Anwendungen in Grids oder Clouds. Im von der deutschen Grid-Initiative (D-Grid) geförderten Projekt SLA4D-Grid entwickelt Fraunhofer SCAI Techniken, mit denen sich Service

Level Agreements dynamisch aushandeln und überwachen lassen. Bei Bedarf können die genutzten Leistungen abgerechnet werden. Die Lösung eignet sich besonders für verteilte Systeme wie Grids und Clouds, wo die Verhandlungspartner nicht von vornherein feststehen, sondern sich – getrieben von Anforderungen und Angeboten – dynamisch finden.

OPTIMIS – Optimierung von Cloud Infrastrukturen

Im von der Europäischen Kommission geförderten Projekt OPTIMIS entwickeln die Partner Techniken zur Optimierung von Cloud-Infrastrukturen. Der Fokus liegt dabei auf der Unterstützung von Service Providern bei der Auswahl von Ressourcen der Infrastrukturprovider, optimiert nach Dienstgütereigenschaften wie Verlässlichkeit des Anbieters, Sicherheit, Vertrauen, Kosten und Öko-Effizienz. Dabei werden mehrere Nutzungsarten unterstützt: interne Clouds, öffentliche Clouds, Zusammenschalten interner und öffentlicher Clouds zum Abfangen von Lastspitzen.

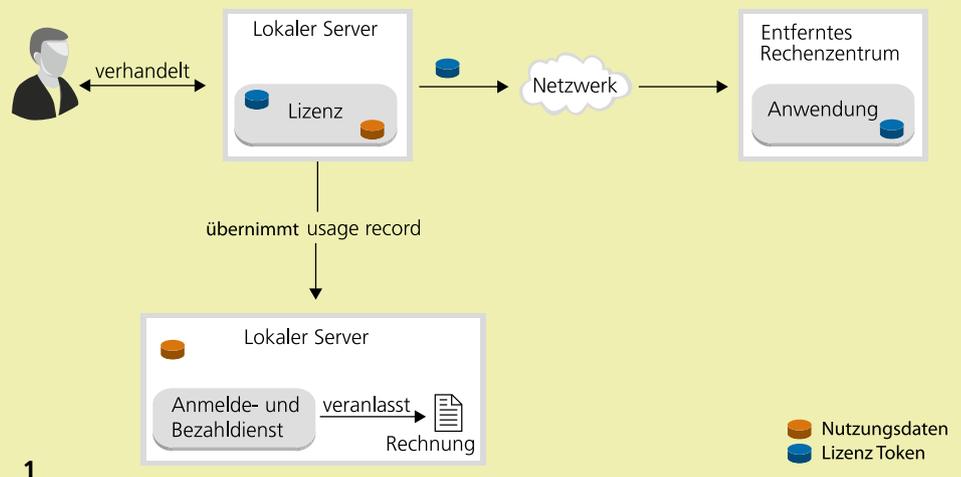
SmartLM – Sichere Softwarelizenzen für verteilte Systeme

Bisherige Verfahren zur Autorisierung der Nutzung geschützter Programme (Softwarelizenzen) standen der breiteren Nutzung von Grid- und Cloud-Infrastrukturen bislang oft im Weg. Das von der Europäischen Kommission geförderte Projekt SmartLM arbeitete an einer Alternative zur bisherigen Technologie für Softwarelizenzen. Drei Softwarehäuser entwickelten zusammen mit Partnern aus Forschung und Industrie ein neues, sicheres Verfahren für dynamische, mobile Lizenzen, die in Grids und Clouds ebenso genutzt werden können wie in lokalen Rechensystemen. Das Verfahren unterstützt neue Geschäftsmodelle für Anbieter und Nutzer moderner IT-Dienstleistungen. Das prototypische Ergebnis des Projekts entwickeln drei Projektpartner zum Produkt elasticLM weiter.

ANSPRECHPARTNER

Wolfgang Ziegler

Telefon +49 2241 14-2258 | wolfgang.ziegler@scai.fraunhofer.de



elasticLM – KLARER VORTEIL AUCH BEIM RECHNEN IN WOLKEN

Das Fraunhofer SCAI hat ein neues Produkt für die Lizenzierung kommerzieller Software und für das Management von Lizenzen entwickelt: elasticLM. Das Produkt richtet sich in erster Linie an Softwarehäuser, die damit ihre Anwendungen vor nicht autorisierter Nutzung schützen wollen. Mit seinen Arbeiten reagiert das SCAI auf aktuelle Entwicklungen in der Nutzung von Informationstechnik-Infrastrukturen.

Seit einigen Jahren vollzieht sich ein Paradigmenwechsel in der Art und Weise, wie IT-Ressourcen angeboten und genutzt werden. Wo noch vor wenigen Jahren monolithische Rechenzentren den IT-Bedarf für ein Unternehmen oder eine Forschungseinrichtung bereitstellten, wurde zunächst mit Grid Computing – überwiegend im akademischen Umfeld – eine Möglichkeit geschaffen, externe Ressourcen für die Auslagerung von Aufgaben zu nutzen. Cloud Computing ergänzte die Grid-Technologie und war bisher vorwiegend in der Industrie etabliert.

Cloud Computing kann unterschiedlich genutzt werden: als rein lokale Intranet-Cloud (Private Cloud), als Dienst externer Anbieter wie Amazon (Public Cloud) oder als hybride Lösung, die lokale Clouds, Grids und Public Clouds in verschiedenen Konfigurationen temporär zusammenführt.

Die Verwendung kommerzieller Software, beispielsweise von Programmen zur Simulation, bei der Nutzung externer Ressourcen ist dabei bisher beinahe unmöglich. Zum einen fehlen entsprechende Geschäftsmodelle der Softwarehäuser, zum anderen erlaubt es die aktuelle Lizenztechnologie, nur geschützte Programme mit permanentem Kontakt zu einem ebenfalls lokalen Lizenzserver zu nutzen. Der Grund dafür ist, dass die bisherige Technologie für den Einsatz in monolithischen Rechenzentren entwickelt wurde, die ihren Nutzern Anwendungen, Lizenzen und IT-Ressourcen anbieten. Dabei kommt ein Autorisierungsmechanismus zum Einsatz, der genau diese Lokalität voraussetzt.

License as a Service (Laas)

Mit elasticLM bietet SCAI ein sicheres Verfahren für dynamische, mobile Lizenzen, die in Grids und Clouds ebenso genutzt werden können wie mit lokalen Rechensystemen. Das Verfahren unterstützt neue Geschäftsmodelle, die Nutzer, Application Service Provider (ASP) und Softwarehäuser (ISV) in die Lage versetzt, ohne Einschränkung die Vorteile der aufkommenden »elastischen« Versorgung mit IT-Dienstleistungen zu nutzen.

Vor der Ausführung einer Applikation erfolgt die Aushandlung eines Service Level Agreements zwischen dem Lizenzserver und dem Benutzer. Dabei spielen die Verfügbarkeit einer Lizenz, die lokalen Richtlinien, Richtlinien des ISV oder Attribute, die für den Benutzer in Virtuellen Organisationen definiert wurden, eine Rolle. Das Resultat dieser Verhandlung ist ein mobiles Lizenztoken, das die Ausführung der lizenzierten Anwendung erlaubt. elasticLM entkoppelt so die Verwendung einer Lizenz von der eigentlichen Ausführung der lizenzierten Anwendung.

Bereits während der Verhandlung erhält der Benutzer eine Information darüber, wie viel die Lizenz für den angefragten Zeitraum kostet. Das Lizenzmanagementsystem gewährt die Nutzung der Lizenz nur, wenn der Benutzer sein Budget mit der angefragten Nutzung nicht überschreitet. Der Nutzer kann dann seine Anforderung modifizieren und weiter verhandeln. Das Ergebnis einer erfolgreichen Verhandlung ist ein mobiler



Software-Token. Er dient dazu, die Anwendung mit den vereinbarten Merkmalen auszuführen. Tokens lassen sich zur jeweiligen Infrastrukturmgebung transportieren, wo sie die Ausführung der Anwendung autorisieren. Die von elasticLM erzeugten Token können dynamisch mit anderen Token kombiniert werden, beispielsweise mit Token eines ASP, bei dem die Anwendung ablaufen soll, wenn die eigene Lizenz des Benutzers für eine komplexere Aufgabe nicht ausreichend ist.

Anwendungen sicher schützen

Für die verschiedenen Akteure relevante Sicherheitsaspekte der Lösung elasticLM und der Lizenzservice selbst wurden mit besonderer Sorgfalt untersucht. Das betrifft beispielsweise

- Authentisierung und Autorisierung von Benutzern, Diensten und Servern,
- Sicherheit und Vertraulichkeit der Kommunikation zwischen den verschiedenen Akteuren oder Komponenten,
- Sicherheit des Delegationsprozesses, beispielsweise wenn ein Portal oder Orchestrierungsdienst verwendet wird,
- Enthüllung sensibler Daten, etwa von Lizenzen,
- Integrität des gesamten Prozesses, um Verbindlichkeit (Nichtabstreitbarkeit) sicherzustellen, und
- Sicherheit des Lizenzmechanismus selbst, zum Beispiel der Lizenzgeneratoren, Manipulation des ausführbaren Codes, Verfälschung der Systemuhr am Ausführungsort.

Wir setzen auf technisch ausgereifte Standards wie Zertifikate (X.509), Extensible Access Control Markup Language (XACML) und neueste Techniken zum Schutz von Programmcode.

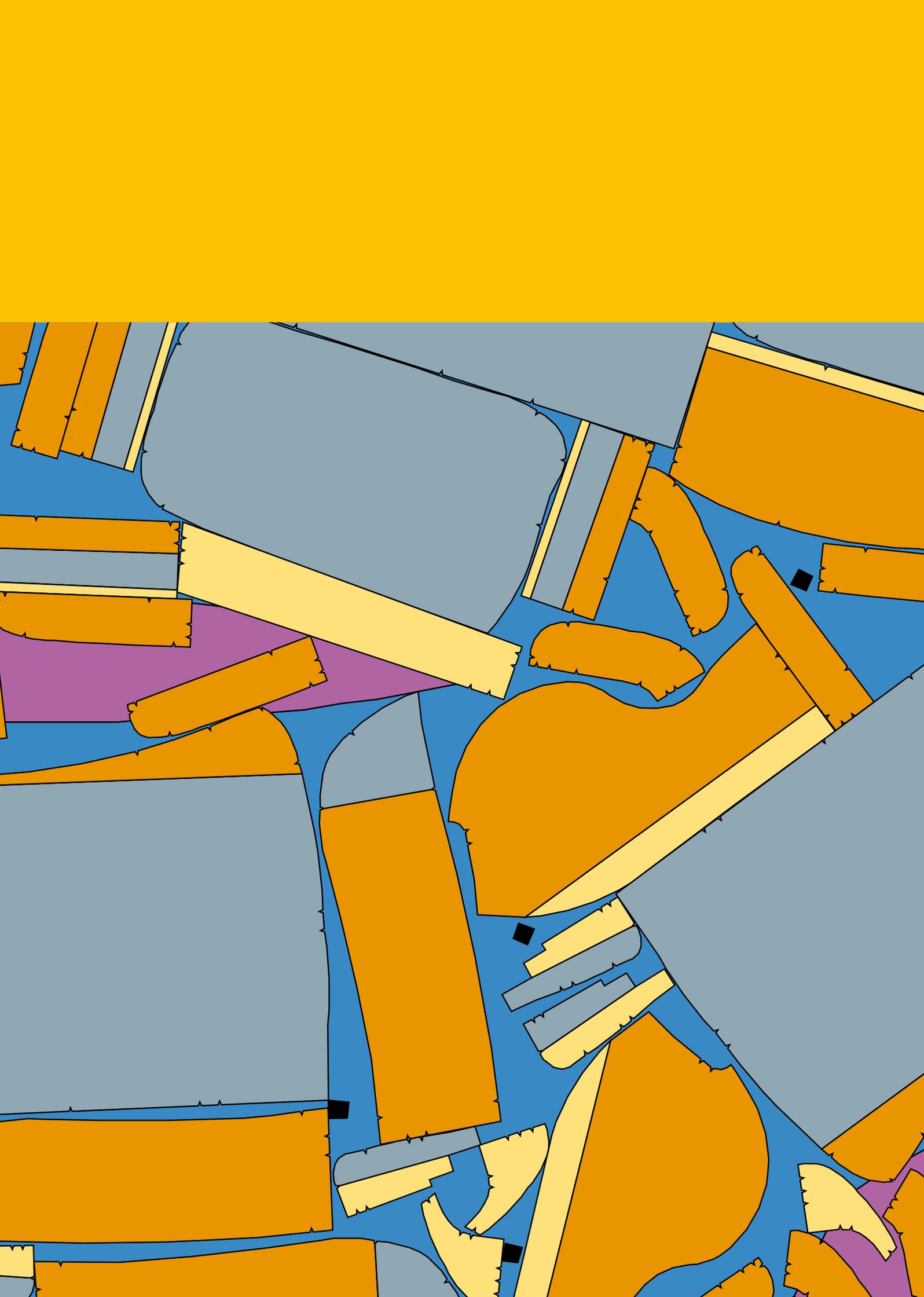
Weitere Informationen zum Produkt unter: www.elasticlm.com

ANSPRECHPARTNER

Wolfgang Ziegler

Telefon +49 2241 14-2258 | wolfgang.ziegler@scai.fraunhofer.de

1 *Grundlegendes Anwendungsszenario der Software elasticLM: Dynamische, mobile Lizenzen, die auch in Grid- und Cloud-Umgebungen genutzt werden können.*



OPTIMIERUNG

Auf den Gebieten der Logistik, Produktion und Planung sind in der Praxis komplexe Fragen zu beantworten, um möglichst effiziente und kostengünstige Abläufe und Produktionsweisen zu ermöglichen. Zunehmend werden dabei nicht mehr nur einzelne Schritte betrachtet, sondern es wird versucht, den gesamten zugrunde liegenden Prozess zu modellieren und zu optimieren. Dadurch werden die zu lösenden Probleme größer, schwieriger und unübersichtlicher.

Die Abteilung für Optimierung untersucht schwierige Fragen der Optimierung in den genannten Anwendungsbereichen. Derartige Probleme sind äußerst weit verbreitet und nahezu in jedem Anwendungsfeld und jeder Wirtschaftsbranche anzutreffen. Bekannte Beispiele hierfür sind etwa

- Optimierung von Anordnungen, Verschnittminimierung
- Minimierung von Produktionszeiten, Losgrößenprobleme, Reihenfolgeplanung
- Minimierung von Transportzeiten, optimale Ausnutzung von Transportkapazitäten
- Minimierung des Bestandes, Minimierung benötigter Arbeitsmittel
- Routenplanung, Standortplanung, Personaleinsatzplanung,

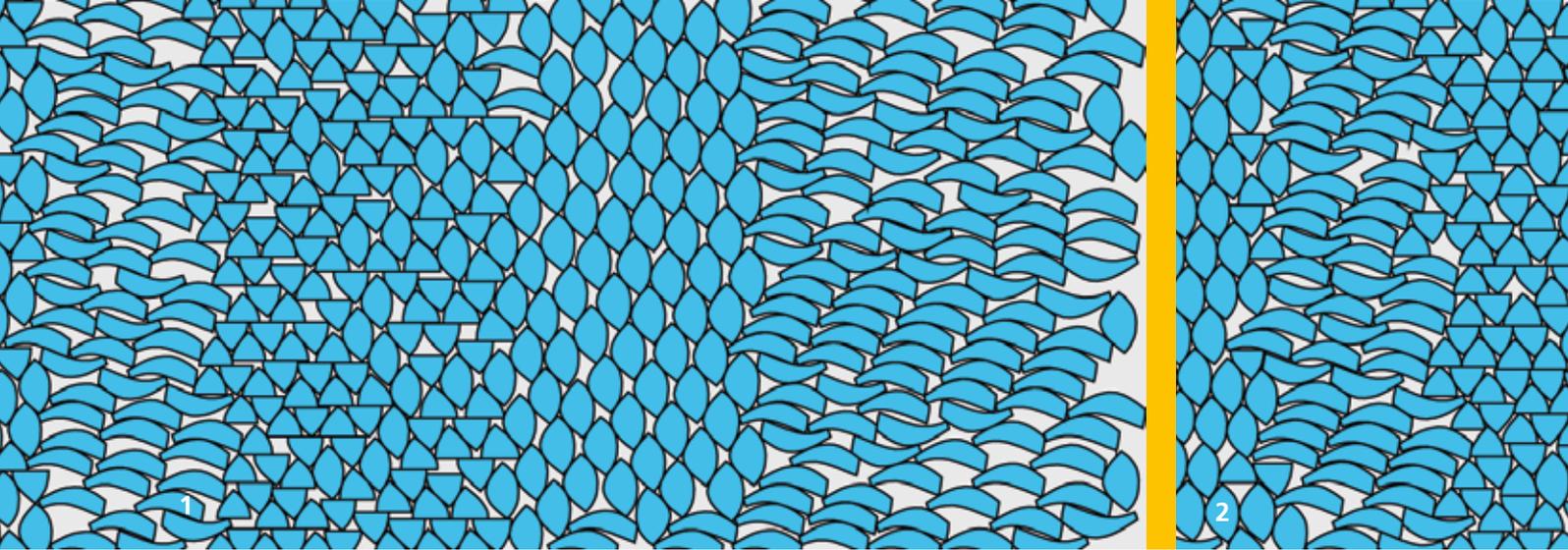
In der Regel wird in der Praxis eine kostenoptimale Lösung für eine Verkettung der oben genannten Probleme gesucht. Dabei ist eine Vielzahl von Bedingungen zu berücksichtigen, die noch dazu meistens von Anwender zu Anwender sehr unterschiedlich ausfallen. Um derart komplexe Zusammenhänge untersuchen und optimieren zu können, bietet es sich vielfach an, sie zunächst im Computer zu modellieren und dort die Realität zu simulieren. Anhand eines solchen Modells lassen sich Auswirkungen von Änderungen bereits vor ihrer Umsetzung abschätzen. Zudem ist es möglich, an verschiedenen Stellen eines solchen Modells Optimierungssoftware anzukoppeln und deren Auswirkung direkt in der Simulation zu beurteilen.

Die Experten der Abteilung für Optimierung verfügen über langjährige Erfahrung und Know-how im Umgang mit Simulations- und Optimierungsfragen. Sie erstellen im Auftrag von Kunden individuelle Optimierungslösungen für deren Probleme. Zusätzlich werden Standardprodukte für einige wichtige Anwendungsgebiete angeboten, die sich mit wenig Anpassungsaufwand direkt produktiv nutzen lassen.

Ein besonderer Schwerpunkt der Arbeiten liegt dabei in der Lösung von Verschnitt- und Packungsproblemen. Die SCAI-Optimierung bietet hier neben der Individualentwicklung auch Standard-Softwarepakete an, die sich bereits seit einigen Jahren bei mehr als 7000 Firmen im industriellen Einsatz befinden.

SCAI verfügt über einen Werkzeugkasten unterschiedlicher Optimierungsverfahren, die auf eine große Klasse unterschiedlicher Aufgaben anwendbar sind. Vorhandene Kompetenz und Erfahrung bei der Konzeption von Lösungsalgorithmen für schwierige kombinatorische Optimierungsprobleme kann von den erfahrenen Fachleuten in der Regel schnell und problemlos auf andere Anwendungsbereiche übertragen werden und so gewinnbringend zur Lösung unterschiedlicher Optimierungsprobleme genutzt werden. Das Angebot an Industrieunternehmen und öffentliche Einrichtungen umfasst das gesamte Gebiet der Planung, Produktion und Logistik. Die Dienstleistungen schließen individuelle Beratung, Entwicklungskooperationen, Auftragsentwicklungen oder Anpassung und Integration von Optimierungssoftware ein.

Abteilungsleiter
Dr. Ralf Heckmann
Telefon +49 2241 14-2810
Fax +49 2241 14-2656
ralf.heckmann@
scai.fraunhofer.de



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 werden aus einfachen Grundmaterialien höherwertige und komplexe Güter und Gegenstände hergestellt. Viele der dabei benötigten Einzelteile werden aus zweidimensionalen Materialien gefertigt und dann beispielsweise durch Verbinden oder Umformen zu dreidimensionalen Produkten oder Produktkomponenten weiterverarbeitet. Die zweidimensionalen Grundmaterialien werden meist in größeren Abmessungen hergestellt, die benötigten Einzelteile dann daraus zugeschnitten.

Mit der Produktfamilie AutoNester bieten wir 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 verschachteln und dadurch wesentlich zur Reduzierung von Materialverschnitt beitragen. AutoNester bietet eine Vielzahl von Funktionen und einstellbaren Verschachtelungsoptionen, so dass sich die Software in der Regel einfach an neue und individuelle Probleme anpassen lässt.

Einfache Integration in CAD-Systeme

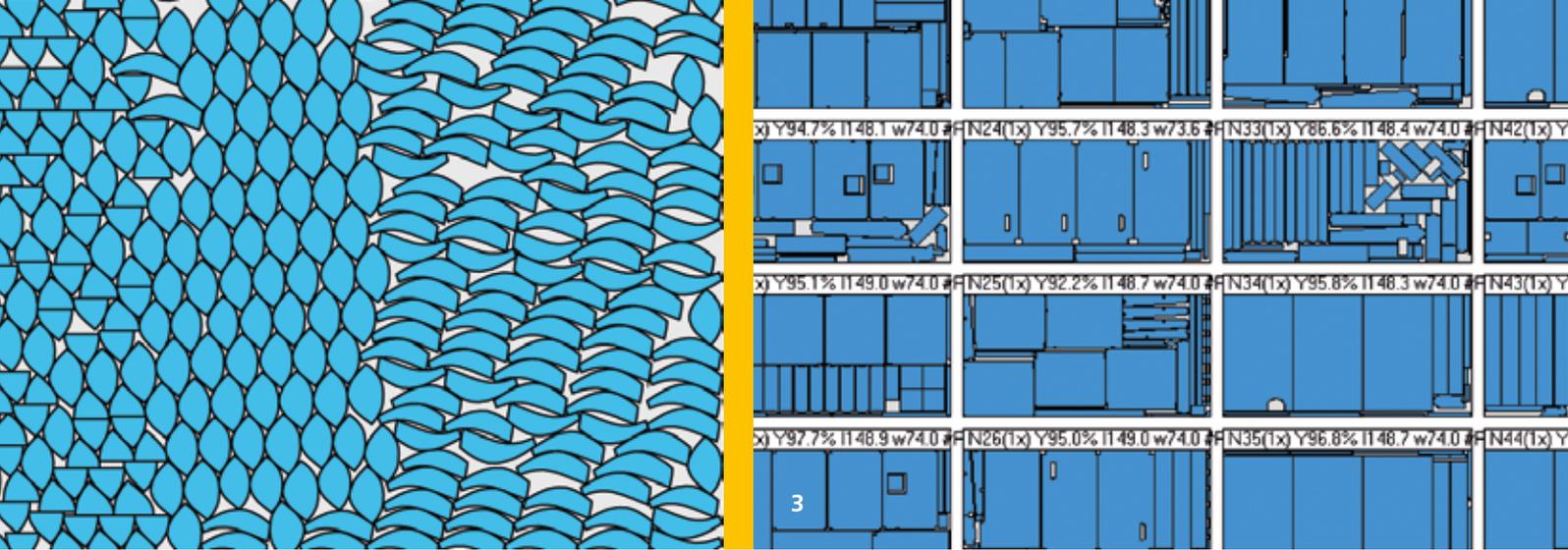
Die Software AutoNester ist als eigenständige Verschachtelungsbibliothek (DLL) organisiert. Sie besitzt eine einfache Programmierschnittstelle (API) und lässt sich von Software-Entwicklern als Packungswerkzeug in andere Software (zum Beispiel in ein CAD-System) integrieren. Für Endanwender erstellen wir – aufbauend auf der AutoNester-Bibliothek –

individuelle, genau auf die jeweiligen Anforderungen zugeschnittene Lösungen.

Gegenwärtig unterstützt AutoNester bereits eine 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 Spiegeleinrichtungen oder vorplatzierte Teile.

Kosten senken, Rohstoffe einsparen

AutoNester erstellt in kurzer Zeit hocheffiziente Schnittbilder für zweidimensionale Materialien und unterstützt dabei eine Vielzahl von Funktionen. Damit ist AutoNester 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 (beispielsweise während der Design-, Kalkulations- und Produktionsphase). Durch die hohe Geschwindigkeit und Verfügbarkeit von Verschachtelungs-kapazität ist eine wirkungsvolle Unterstützung auch bei Individual- und Kleinserienfertigung gegeben sowie in Zeiten hohen Arbeitsaufkommens, etwa bei Modellwechslern.

AutoNester wird von führenden, internationalen Anbietern von CAD/CAM-Produkten oder Zuschneidemaschinen vertrieben, meistens integriert in deren eigene Produkte. Weltweit setzen bereits viele tausend Anwender die Software des Fraunhofer SCAI ein.

Für viele Firmen hat SCAI Speziallösungen entwickelt, die auf die am Institut entwickelten Kernalgorithmen aufbauen. Da SCAI über langjährige Erfahrung und tiefgreifendes Know-how auf diesem Gebiet verfügt, zudem die gesamte Entwicklung im Hause stattfindet, erhalten Kunden in der Regel schnell und kosteneffizient Lösungen nach Maß.

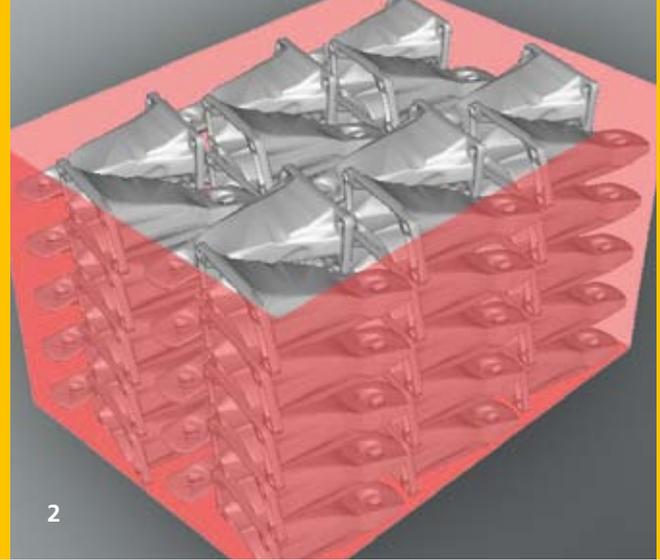
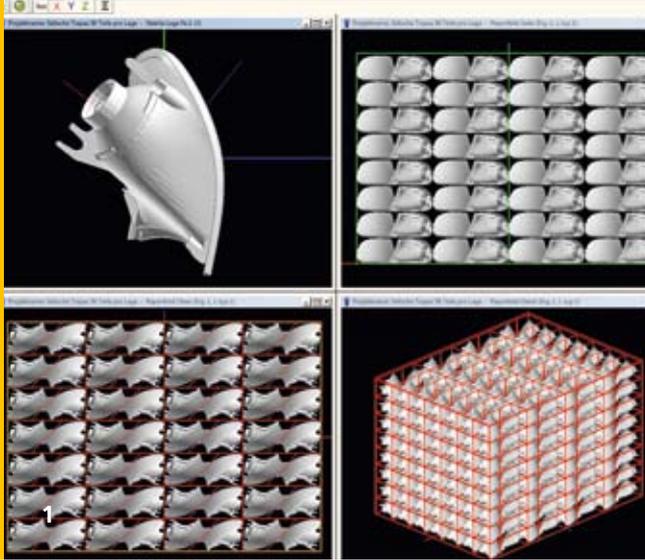
Als neueste Ergänzung zur Produktfamilie AutoNester wurde die Software AutoCompactor entwickelt. Die bereits vertriebene Software ermöglicht es, Teile in bereits vorhandenen Verschachtelungen noch dichter zusammenzuschieben. AutoCompactor ist eine ideale Ergänzung zu den AutoNester-Produkten, kann aber auch völlig eigenständig eingesetzt werden. Mit Hilfe der Software AutoCompactor können Materialeinsparungen von bis zu fünf Prozentpunkten erzielt werden.

ANSPRECHPARTNER

Dr. Ralf Heckmann

Telefon +49 2241 14-2810 | ralf.heckmann@scai.fraunhofer.de

- 1 Kompaktierung einer Verschachtelung durch AutoCompactor. Vor der Kompaktierung betrug die Materialausnutzung 77.3 Prozent.
- 2 Durch die Kompaktierung konnte sie auf 82.4 Prozent gesteigert werden.
- 3 Verschachtelung von Metallteilen über mehrere Tafeln mit einer Materialausnutzung von 94 Prozent.



MIT PACKASSISTANT DICHTER PACKEN

Ideale Behälterauslastungen, keine zeitaufwändigen Packversuche mehr, bessere Planungsmöglichkeiten und eine vorausschauende Angebotserstellung – PackAssistant erleichtert die Behälterplanung in der Industrie enorm. Die Anwender der Software erzielen bei der Berechnung von Bauteilen um mehr als 20 Prozent verbesserte Behälterauslastungen.

Die Software PackAssistant wird in der Logistik- und Produktionsplanung zur Berechnung optimierter Befüllungen von Behältern eingesetzt, und ermöglicht eine schnelle, Platz sparende und kostengünstige Behälterplanung.

Das Programm berechnet die bestmögliche Auslastung von Behältern mit baugleichen Teilen anhand beliebig komplexer dreidimensionaler Modelle aus CAD-Programmen. Seit neuestem unterstützt PackAssistant zusätzlich zu CAD-Modellen in den Formaten VRML und STL das STEP-Format. Durch die vollständige Berücksichtigung der CAD-Modelle lassen sich auch komplexe Teile optimal Platz sparend verpacken. Dabei versucht die Software gleichzeitig, die Teile so im Behälter anzuordnen, dass sie einem möglichst einfachen Muster folgen. Deshalb erhält man von PackAssistant manchmal mehrere Ergebnisse. Die Anwender entscheiden dann, ob sie ein möglichst Platz sparendes Ergebnis für den Transport nach Übersee benötigen oder ein möglichst schnell zu packendes Ergebnis für die interne Logistik.

Sie können auch einstellen, ob sich die Teile bei der Entnahme verkanten dürfen. Handelt es sich um empfindliche Teile, die beim Transport nicht beschädigt werden dürfen, so lassen sich Abstände zwischen den Teilen vorgeben. Dieser Freiraum kann dann mit Verpackungsmaterial gefüllt werden. Es können auch Transportbehälter aus expandiertem Polypropylen (EPP-Trays) oder Tiefziehfolien für die berechnete Anordnung hergestellt werden. PackAssistant liefert auch Ergebnisse für mehrere Formen von Gefachen. Dabei ist es egal, ob das Gefach letztlich aus Hohlkammerplatten, Textilien oder andere Materialien gefertigt wird.

Falls für ein Bauteil mehrere Behälter mit unterschiedlichen Maßen zu Auswahl stehen, kann PackAssistant automatisch den günstigsten Behälter für dieses Verpackungsprojekt ermitteln. Die komplette Behälterliste mit ihren Innenmaßen muss vorher einmalig als Excel-Tabelle in PackAssistant hinterlegt werden. Dabei beachtet die Software die Gewichtsbeschränkungen aus der Behälterliste.

Oft werden bestimmte Teile nicht geordnet in einen Behälter gelegt, sondern unsortiert hinein geworfen oder vom Band aus direkt in den Behälter befördert. Mit PackAssistant kann man

- 1 *Benutzeroberfläche von PackAssistant*
- 2 *Die CAD-Modelle können nun auch durch VRML, SIT und STEP eingelesen werden.*



abschätzen, wie viele Teile einer Schüttgut-Sorte in einen Behälter passen. Man muss nur die Innenmaße des Behälters, das CAD-Modell eines Teils und sein Gewicht kennen und PackAssistant schätzt die Anzahl der Teile im Behälter mit Hilfe einer physikalischen Simulation.

In der Regel dauert eine Berechnung auf einem Standard-PC nur wenige Minuten – selbst wenn das CAD-Modell sehr umfangreich ist. Das geht so schnell, weil die Modelle vorher durch verschiedene Verfahren vereinfacht werden. Alles was von außen nicht zu sehen ist und somit keinen Einfluss auf die Behälterauslastung hat, wird entfernt. Modelle ganzer Armaturenbretter lassen sich dadurch stark vereinfachen. Ein weiteres Verfahren vereinfacht die sichtbare äußere Hülle des Modells, die durch Dreiecke beschrieben wird. PackAssistant berechnet ein Modell mit weniger Dreiecken und achtet darauf, dass die Abweichung zum ursprünglichen Modell möglichst klein bleibt.

Die Software stellt die Ergebnisse dreidimensional dar. Alle Daten des Verpackungsprojekts können zusammen mit anschaulichen Grafiken nach Word exportiert werden. Für die Weiterverarbeitung der Ergebnisse in anderen CAD-Programmen gibt es einen Export nach VRML und seit neuestem auch nach STEP.

Weltweit setzen viele Kunden – vor allem aus dem Automobilbereich – PackAssistant ein. SCAI entwickelt die Software ständig weiter und verbessert sie. Kunden erhalten Unterstützung bei Fragen und Problemen zur Handhabung von PackAssistant.

ANSPRECHPARTNER

Dr. Ralf Heckmann

Telefon +49 2241 14-2810 | ralf.heckmann@scai.fraunhofer.de

3 » *Nur mit einer Technologie, wie PackAssistant sie bietet, war es uns möglich, für alle 450 Bauteile eine optimale Behälterplanung durchzuführen und standardisierte Behälter zu definieren.«*

Franco Lanzoni,

KTM Power Sports AG

VIRTUAL MATERIAL DESIGN

Die Entwicklung neuer Materialien und innovativer Werkstoffe ist für eine Vielzahl von Herausforderungen des 21. Jahrhunderts in den Feldern Energie, Umwelt, Gesundheit, Mobilität, Sicherheit und Kommunikation von entscheidender Bedeutung. Seit Sommer 2010 wird eine neue Abteilung zum Geschäftsfeld »Virtual Material Design« am Fraunhofer SCAI aufgebaut.

Materialwissenschaft und Nanotechnologie gehören zu den Schlüsseltechnologien des 21. Jahrhunderts. Als interdisziplinäre Querschnittsthemen fließen hier grundlegende Naturwissenschaften und anwendungsorientierte Ingenieurwissenschaften zusammen. Diese werden zum Beispiel benötigt, um entscheidende Fortschritte in Bereichen des Maschinenbaus, der Motoren- und Antriebsentwicklung, der Halbleitertechnik oder der Medizintechnik zu erzielen. Dies gilt auch für das Feld der erneuerbaren Energien und für den Klima- und Ressourcenschutz.

Beispiele sind:

- hoch effiziente Solarzellen für eine nachhaltige Energieerzeugung,
- neuartige Batterien zur kosten- und gewichtsgünstigen Stromspeicherung,
- Leichtbaumaterialien, die den Energieverbrauch senken und
- effiziente Elektroautos, die Kohlendioxidemissionen vermindern.

Hier spielen auch oft sogenannte Metamaterialien eine wichtige Rolle. Diese werden entwickelt, um ganz gezielte Eigenschaften aufzuweisen, die so üblicherweise nicht in der Natur vorkommen. Dabei begründen sich die speziellen makroskopischen Eigenschaften des Materials meist aus dessen Struktur auf der Mikro- und Nanoskala. Somit sind für das Design neuartiger Materialien mathematische Multiskalen-Modelle von wichtiger Bedeutung.

In der Abteilung »Virtual Material Design« werden neue Materialien auf der Nano-, Mikro- und Makroskala auf großen Parallelrechnern mit modernen numerischen Multiskalen-Methoden aus der Quantenmechanik, Moleküldynamik und der Kontinuumsmechanik simuliert. Ziel ist es, innovative Werkstoffe mit interessanten Eigenschaften im Rechner zu kreieren und zu untersuchen, um so Struktur- sowie Designvorschläge zu machen, noch bevor solche Stoffe real im Labor synthetisiert werden. Dieser Zugang verspricht, kostenintensive Experimente im Labor durch virtuelle Experimente im Rechner zu ersetzen. Somit lassen sich mit Hilfe der Numerischen Simulation die Entwicklungskosten substantiell reduzieren. Zudem können auch vollkommen neuartige Materialien gefunden werden.

In diesem Rahmen ist neben Multiskalen-Modellierung insbesondere die Entwicklung und Implementation von schneller Simulationssoftware für die Materialwissenschaft und Nanotechnologie ein zentrales Thema. Ein Schwerpunkt liegt hier auf der Effizienz der Algorithmen speziell für parallele Hochleistungsrechner und Supercomputer. Denn diese werden meist benötigt, um für die betrachteten Probleme relevante Größen- und Zeitskalen behandeln zu können.

Abteilungsleiter

Dr. Jan Hamaekers

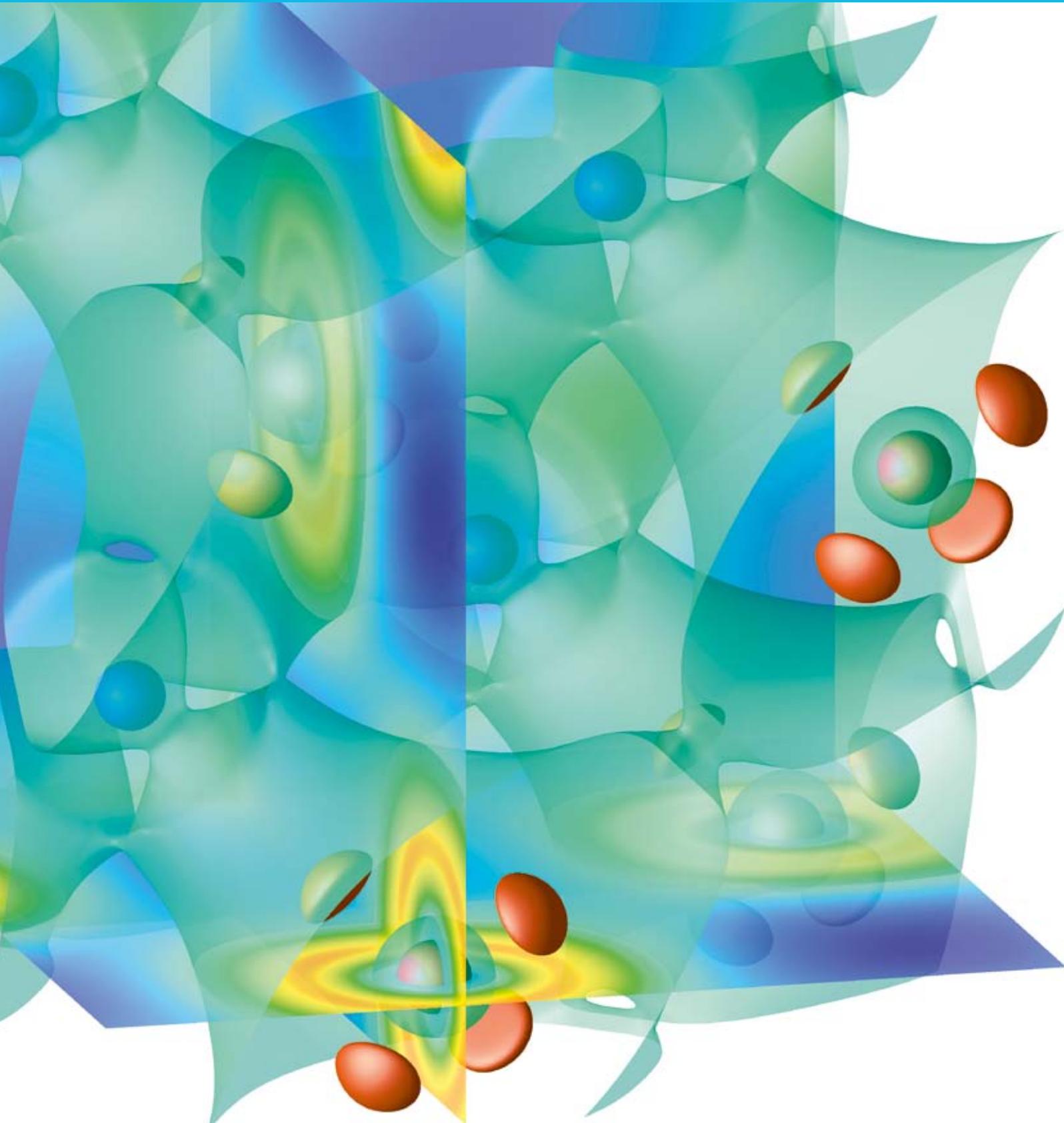
Telefon +49 2241 14-2463

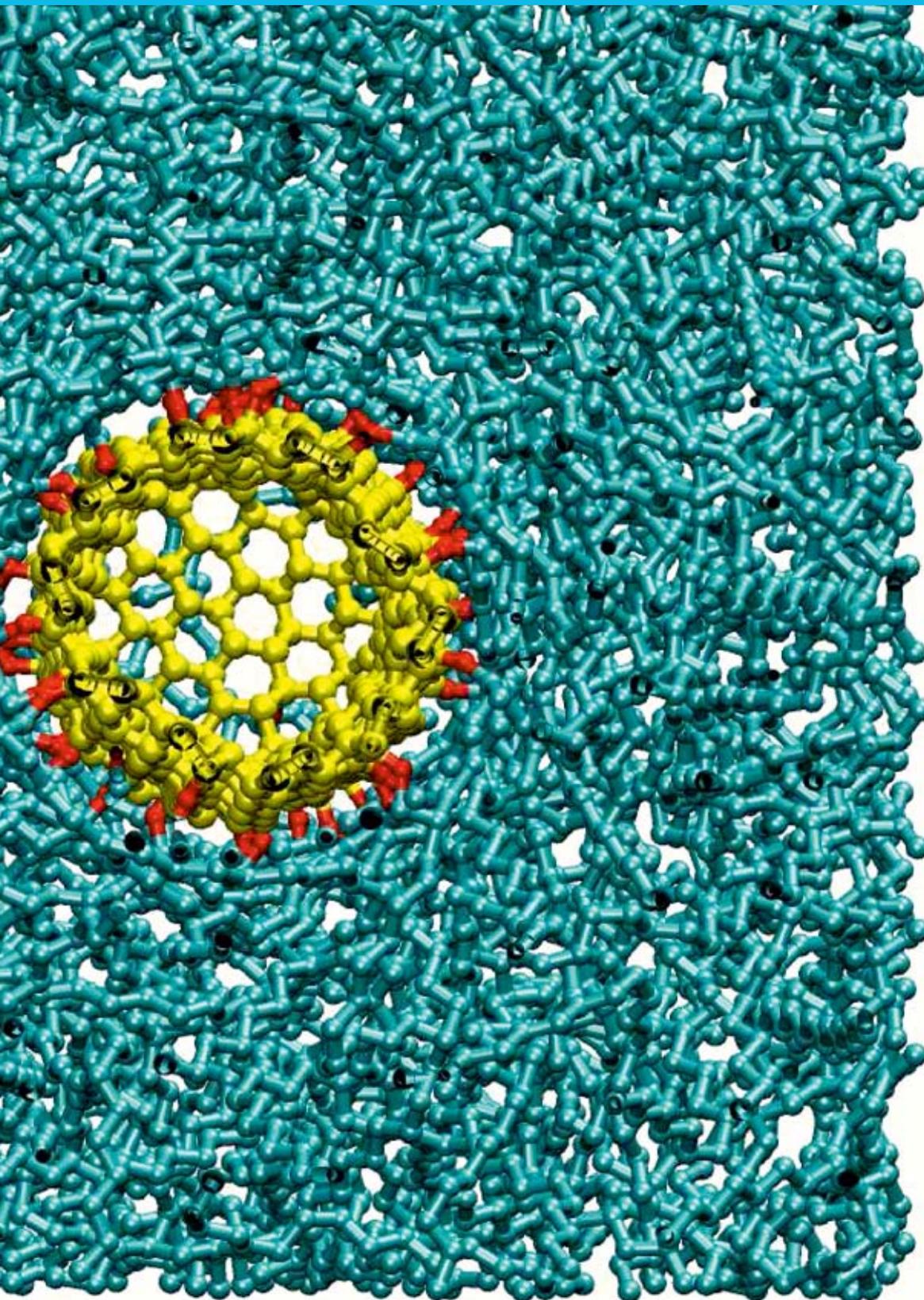
Fax +49 2241 144-2463

jan.hamaekers@

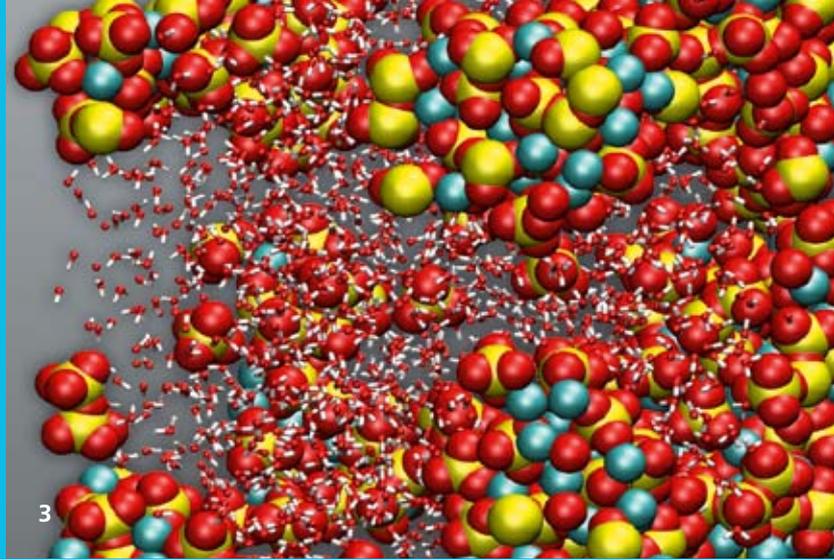
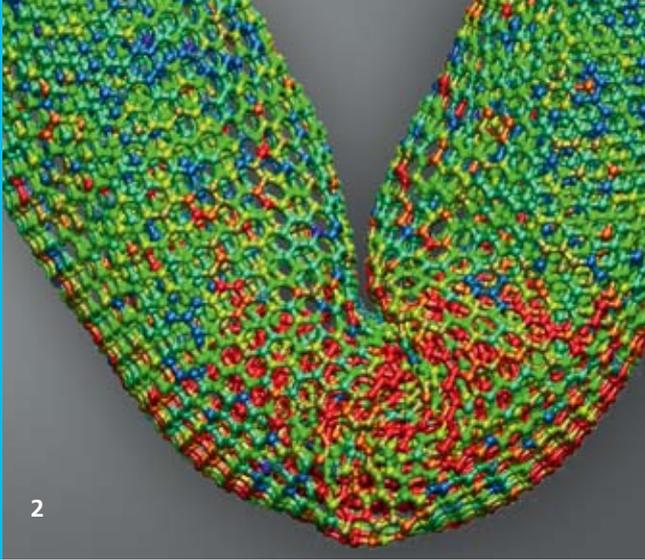
scai.fraunhofer.de

1 *Elektronenstruktur von kristallinem Galliumarsenid (GaAs): Die effiziente numerische Berechnung der Elektronenstruktur eines Materials ist in der Materialwissenschaft und Nanotechnologie von großer Bedeutung. Die Forscher berechnen hier unter anderem die Valenzelektronendichte von Galliumarsenid.*





- 1 Analyse der Materialverstärkung durch Kohlenstoff-Nanoröhren mittels numerischer Simulation mit Tremolo-X. Die mechanischen Eigenschaften von Kohlenstoff-Nanoröhren sind überragend hinsichtlich des Verhältnisses von Zugfestigkeit zu Dichte (bis zu circa 100 mal so gut wie für Stahl).
- 2 Biegeversuch einer mehrwandigen Kohlenstoff-Nanoröhre mit Tremolo-X.
- 3 Numerische Simulation mit Tremolo-X von zementartigem Gel (C-S-H). Obwohl zementartige Materialien häufig verwendet werden, ist deren Nanostruktur nicht im Detail verstanden.



NUMERISCHE SIMULATION IN DER NANOTECHNOLOGIE

Das bessere Verständnis der Eigenschaften eines Materials auf der Nanoskala ist von entscheidender Bedeutung, um neuartige Materialien zu entwerfen und zu synthetisieren. Daher liegt ein Schwerpunkt des Bereichs »Virtual Material Design« in der numerischen Simulation von Nanopartikeln, Nanomaterialien und allgemeiner von Nanostrukturen.

Materialdesign – Effektive Eigenschaften mit Nanotechnologie

Viele Anwendungen der Nanotechnologie beruhen darauf, dass Materialien in Form eines Nanopartikels oft vollkommen andere Eigenschaften aufweisen als das herkömmliche makroskopische Material. Dies begründet sich meist in dem starken Anstieg des Verhältnisses Oberfläche zu Volumen. Denn je größer die Oberfläche ist um so »aktiver« ist das Material. Eine Herausforderung besteht oft darin, die besonderen Eigenschaften der Nanopartikel bei der Verwendung innerhalb einer größeren Struktur, zum Beispiel eines makroskopischen Nanomaterials, zu erhalten oder auch zu übertragen. In vielen Fällen erhält man auch den gewünschten Effekt, wenn nur die Oberflächenstruktur eines Materials neu kreiert wird. Bereits solche Nanooberflächen oder Nanobeschichtungen können das Material zum Beispiel hinsichtlich Hitzebeständigkeit oder auch antibakterieller Wirkung stark beeinflussen. Oft spielt aber auch die dreidimensionale Nanostruktur eine entscheidende Rolle für die mechanischen oder elektromagnetischen Eigenschaften eines Nanomaterials, zum Beispiel bei vielen Metamaterialien. Die grundlegende Voraussetzung, um ein neuartiges Material zu entwerfen, ist das Verständnis seiner Eigenschaften auf der Nanoskala.

Tremolo-X – Molekulardynamische Simulation

Ein wichtiges Werkzeug zur Analyse eines Materials auf der Nanoskala ist die Moleküldynamik. Fraunhofer SCAI bietet mit »Tremolo-X« ein massiv paralleles Softwarepaket zur numerischen Simulation in der Moleküldynamik an. Es verwendet sowohl Baumalgorithmen für langreichweitige Potentiale als auch Gitteralgorithmen für kurz- und langreichweitige Potentiale. Dabei wurde der parallelen Effizienz auf Hochleistungsrechnern besondere Beachtung geschenkt und zusätzlich eine benutzerfreundliche Bedienungsfläche implementiert. Tremolo-X wurde schon erfolgreich in vielen Projekten aus unterschiedlichen Anwendungsbereichen eingesetzt, zum Beispiel in der Nanotechnologie, den Materialwissenschaften, der Biochemie und der Biophysik.

ANSPRECHPARTNER

Dr. Jan Hamaekers

Telefon +49 2241 14-2463 | jan.hamaekers@scai.fraunhofer.de

PRAKTISCHE MATHEMATIK BEGEISTERT JUNGE LEUTE

Stärkung der Kompetenzen in Mathematik, Informatik, Naturwissenschaften und Technik

Ob MP3, Navi oder Scheckkarte: In all diesen Geräten ist Mathematik real geworden. Ein zeitgemäßer Mathematikunterricht sollte an solchen lebensnahen Beispielen anknüpfen, um das Interesse für mathematik-basierte Fächer zu wecken und entsprechende Fähigkeiten zu fördern. Das Fraunhofer SCAI entwickelt Angebote zur Schulung des mathematisch-algorithmischen Denkens und leistet damit einen Beitrag zur Überwindung des Fachkräftemangels.

Fachkräftelücke schwächt Innovations- und Wirtschaftskraft

Die Innovations- und Wirtschaftskraft hängt zunehmend von der Aufstellung in den sogenannten MINT-Fächern (Mathematik, Informatik, Naturwissenschaften, Technik) ab. Dem steht eine Abnahme der mathematischen Kompetenzen von Schulabgängern entgegen, das Interesse vieler junger Menschen an mathematisch-technisch-naturwissenschaftlichen Fächern sinkt, und die Abbruchquoten bei Studierenden solcher Fächer ist hoch. Dies ist im Wesentlichen auf mangelnde mathematische Kompetenzen zurückzuführen. Der daraus – auch im Zusammenhang mit demografischen Entwicklungen – resultierende Fachkräftemangel ist enorm: Die Lücke in den MINT-Fächern betrug (laut der Initiative »MINT Zukunft schaffen«) 40 000 auf dem Höhepunkt der Krise 2009, beläuft sich heute auf 70 000 und wird (ohne Gegensteuerung) bis 2015 voraussichtlich auf 250 000 anwachsen.

Engagement zur Verbesserung der mathematischen Bildung und Ausbildung

Zu den Hauptursachen der beschriebenen Situation zählen nach wie vor Imageprobleme der Mathematik und vor allem überholte Ansätze in Bildung, Aus- und Weiterbildung. »Die Mathematik und ihre Anwendungen haben sich in den letzten Jahrzehnten rasant weiter entwickelt. In unserer Schulwirklichkeit sind diese Entwicklungen bisher jedoch kaum angekommen«, sagt Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, Institutsleiter des Fraunhofer SCAI. Auch nach dem »Jahr der Mathematik 2008« setzt das Institut sein Engagement fort, um Interesse an und Kompetenzen in der Mathematik zu fördern. Dazu gehören unter anderem der große vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderte Kongress »Mathematik in der Praxis« (den das SCAI zusammen mit dem Fraunhofer ITWM 2009 in Berlin veranstaltet hat), eine Reihe von Sommerschulen und Schülerpraktika im Institut und Workshops bei der Fraunhofer-Talent-School, öffentliche Vorträge zur Mathematik und die Mitveranstaltung von zwei Sylter-Runden zur Mathematik.

Innovative Lehrmodule stärken das mathematisch-algorithmische Denken

In einem von der WestLB-Stiftung Zukunft NRW geförderten Pilotprojekt hat das SCAI innovative Lehrmodule zur Schulung des mathematisch-algorithmischen Denkens entwickelt und getestet. Die Module greifen die Mathematik hinter moder-



nen, lebenspraktischen Anwendungen auf, folgen dem Konzept des forschend-entdeckenden («inquiry based») Lernens und geben den Lehrkräften Material für spannende, innovative Unterrichtseinheiten an die Hand. Die Projektergebnisse finden große Aufmerksamkeit in Öffentlichkeit und Fachpublikum sowie Akzeptanz bei Lehrern und Lehramtsanwärtern. Eine Präsentation dieses Ansatzes und der Entwicklungen ist im September 2010 auf dem großen europäischen Fibonacci-Kongress auch international auf begeisterte Resonanz gestoßen.

1 Motiv aus der Anzeigenkampagne zum Jahr der Mathematik 2008.

Seminar für Lehramtsstudierende der Universität zu Köln

In Kooperation mit dem Mathematischen Institut der Universität zu Köln veranstaltet das Institut seit einigen Semestern für Lehramtsstudierende die Seminarreihe »Algorithmen für den Schulunterricht«. In diesem Seminar haben die angehenden Lehrerinnen und Lehrer die oben genannten Module teilweise mit entwickelt und erfolgreich im Schulunterricht erprobt. Im Wintersemester 2010/2011 wird das Seminar in einem von der Universität zu Köln geförderten Projekt unter Genderaspekten begleitet. Aktuelle Studien zeigen, dass der schulische Mathematikunterricht vor allem eine stärkere Praxis- und Lebensweltorientierung aufweisen muss, um für Mädchen attraktiv – und auch für Jungen besser – zu sein.

Von Pilotprojekten in die Breite

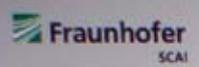
Die innovativen Lehrmodule des SCAI sollen an möglichst viele Schulen und Lehrkräfte weitergegeben werden, unter anderem auch in einer Kooperation mit Schulen ans Netz e.V. Diese Pilot-Entwicklungen sollen für eine umfassend angelegte Initiative zur Stärkung des mathematisch-algorithmischen Denkens erweitert werden. Geplant sind weitere Angebote zur unmittelbaren und inhaltlichen Unterstützung der Schulen und Lehrer mit anwendungsnahen Unterrichtsmaterialien und entsprechenden Fortbildungen. Zudem sollen Angebote an außerschulischen Lernorten – wie mathematische Schülerlabore – gemacht werden.

www.scai.fraunhofer.de/mathematik-fuer-die-praxis

ANSPRECHPARTNER

Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, Dr. Anton Schüller

Telefon +49 2241 14-2572 | anton.schueller@scai.fraunhofer.de



- Über uns
- Geschäftsführer
- Projekte
- Presse und Medien
- Publikationen**
- Newsletter
- Jahresberichte
- Fachpublikationen
- Habilitationen
- Dissertationen
- Masterarbeiten
- Bachelorarbeiten
- Diplomarbeiten
- Vereinstellungen
- Karrieren
- Kontakt

Schnellstart

- Fraunhofer-Gesellschaft
- Fraunhofer-Verband
- Informations- und Kommunikationstechnik
- Fraunhofer-Institut für Software- und Informationstechnik
- Fraunhofer-Institut für Software- und Informationstechnik
- Fraunhofer-Institut für Software- und Informationstechnik

Publikationen

Fraunhofer-Statistik für Mitarbeiter und Wissenschaftliches Personal 2018



Jahresbericht 2018/2019

→ Der aktuelle Jahresbericht zum Download



Fraunhofer Publica

Zur Recherche in der Fraunhofer-Publica IT. Diese Datenbank dokumentiert die im Rahmen der Forschungstätigkeit der Fraunhofer-Institute entstandenen Publikationen und Patente.



Software und Services für die Automobilindustrie

Diese Broschüre stellt einen Schwerpunkt des Instituts, die Zusammenarbeit mit der Automobilindustrie – sowohl mit den Herstellern als auch den Zulieferern – vor. Fraunhofer SCAI steht für innovative mathematische Verfahren in wichtigen Zukunftsfeldern: numerische Simulation und Optimierung von Multiphysik, Robust Design, Datenkompression und Logikoptimierung.

→ Download (2,1 MB)



Approaching the Cloud: Better Business Using Grid Solutions

PUBLIKATIONEN

Diese Auflistung ist ein Auszug der im Jahre 2009 und 2010 erschienenen Publikationen. Alle Veröffentlichungen sind auch online recherchierbar unter www.scai.fraunhofer.de/publikationen.html

2009

- Ballenegger, V.; Arnold, A.; Cerdà, J.J.: *Simulations of non-neutral slab systems with long-range electrostatic interactions in two-dimensional periodic boundary conditions*. In: The journal of chemical physics. 131 (2009), 9, Art.094107, 10 S.
- Birkenheuer, G.; [...] Ziegler, W.: *Connecting communities on the meta-scheduling level: the DGSi approach*. Poster at Cracow Grid Workshop 2009, Krakow, Poland, October 12-14, 2009.
- Brühl, B.; Hülsmann, M.; Borscheid, D.; Friedrich, C. M.; Reith, D.: *A Sales Forecast Model for the German Automobile Market Based on Time Series Analysis and Data Mining Methods*. In: Perner, P. (Hrsg.): Advances in data mining: applications and theoretical aspects. Berlin [u.a.]: Springer, 2009, S. 146-160.
- Clees, T.: *Computer aided robust design for multi-disciplinary processes*. In: Wolf, Klaus (Hrsg.): 10th MpCCI User Forum: February 17th and 18th, 2009, Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin, Germany; proceedings. Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2009, S. 20-29.
- Clees, T.: *Towards physics-oriented algebraic multigrid for systems of partial differential equations*. In: Brandt, A. (Hrsg.) [...]: Mini-Workshop: Numerical Upscaling for Flow Problems: Theory and Applications: March 1-7, 2009. Oberwolfach: Mathematisches Forschungsinstitut, 2009, S. 689-691. (Report/Mathematisches Forschungsinstitut Oberwolfach 2009, 12).
- Clees, T.; Steffes-lai, D.; Helbig, M.; Roll, K.; Feucht, M.: *Process chain forming to crash: efficient stochastic analysis*. In: 7th European LS-DYNA Users' Conference: Salzburg, May 14-15, 2009. Stuttgart: DYNAMore, 2009, 12 S.
- Degliesposti, G.; Kasam, V.; [...]: *Design and discovery of plasmepsin II inhibitors using an automated workflow on large-scale grids*. In: ChemMedChem. 4 (2009), 7, S. 1164-1173.
- Ebeling, C.; Huguett, J.; Arbona, A.; Friedrich, C. M.: *@neuBrowser – Interactive information system browsing*. Poster at the VPH Initiative Integration Day, 9.9.2009, Bruxelles. 2009.
- Friedrich, C. M.: *The @neuLink approach to literature*. In: ESMINT Teaching Course journal. ESMINT, 2009, S. 62-67.
- Friedrich, C. M.; Ebeling, C.; [...] Hofmann-Apitius, M.: *@neuLink – Knowledge Discovery in Unstructured and Structured Data Sources*. Poster at the VPH Initiative Integration Day, 9.9.2009, Bruxelles. 2009.
- Friedrich, C. M.; Gündel, M.: *Combining text mining and microarray analysis*. In: R Foundation for Statistical Computing: UseR!: the R User Conference 2009, July 8-10, Agrocampus-Ouest, Rennes, France, 2009, S. 63.
- Friedrich, C. M.; Klinger, R.: *rSMILE, an interface to the Bayesian Network package GeNIe/SMILE*. In: R Foundation for Statistical Computing: UseR!: the R User Conference 2009, July 8-10, Agrocampus-Ouest, Rennes, France, 2009, S. 104.
- Gerndt, H. M. (Hrsg.); [...] Ziegler, W. (Hrsg.): *Service Level Agreements in Grids – Dagstuhl Seminar 09131*. Schloß Dagstuhl, Germany, 22.-27.3.09; Abstracts collection (Dagstuhl seminar proceedings), Wadern, 2009.
- Groeper, R.; Grimm, C.; Makedanz, S.; Pfeiffenberger, H.; Ziegler, W.; Gietz, P.; Schiffers, M.: *A concept for attribute-based authorization on D-Grid resources*. In: Future generation computer systems. 25 (2009), 3, S. 275-280.
- Guitart, J.; [...] Ziegler, W.: *SLA-based resource management and allocation*. In: Buyya, R. (Hrsg.); [...]: Market-oriented grid and utility computing. Hoboken, NJ: Wiley, 2009, S. 261-284.
- Gurulingappa, H.; Kolárik, C.; Hofmann-Apitius, M.; Fluck, J.: *Concept-based semi-automatic classification of drugs*. In: Journal of chemical information and modeling. 49 (2009), 8, S. 1986-1992.
- Gurulingappa, H.; Müller, B.; Klinger, R.; Mevissen, H.-T.; Hofmann-Apitius, M.; Fluck, J.; Friedrich, C. M.: *Patent retrieval in chemistry based on semantically tagged named entities*. In: National Institute of Standards and Technology: Proceedings of the eighteenth Text Retrieval Conference: (TREC 2009), November 16-17, 2009, Gaithersburg, Maryland. Washington, DC: NIST, 2009, 9 S.
- Hagemeyer, B.; Mallmann, D.; Ziegler, W.: *Securing software licenses in a location independent manner*. Poster at Cracow Grid Workshop 2009, Krakow, Poland, October 12-14, 2009.

- Heilgeist, J.; Soddemann, T.; Richter, H.: *Design and implementation of a distributed metascheduler*. In: Institute of Electrical and Electronics Engineers/Malta Section: 2009 Third International Conference on Advanced Engineering Computing and Applications in Sciences: ADVCOMP, Sliema, Malta, October 11-16, 2009. Piscataway, NJ [u.a.]: IEEE Computer Society, 2009, S. 63-72.
- Heilgeist, J.; Soddemann, T.; Richter, H.: *Distributed decision making for metaschedulers*. Clausthal: Institut für Informatik, 2009. (IfI technical report series; 2009, 6).
- Helbig, M.; Andrieux, F.; Steffes-lai, D.; Clees, T.: *Development of a material model for the process chain forming to crash taking stochastic and deterministic influences into account*. In: ANSYS Conference & 27. CADFEM Users' Meeting: 18.-20. November 2009, Congress Center Leipzig. Grafing: CADFEM, 2009, S. 2.6.13.
- Hofmann-Apitius, M.; Younesi, E.; Kasam, V.: *Direct use of information extraction from scientific text for modeling and simulation in the life sciences*. In: Library Hi Tech 27 (2009), 4: Special issue: »Upgrading the eLibrary: Enhanced information services driven by technology and economics«: Proceedings of the 9th International Bielefeld Conference, Bielefeld, Germany, 3-5 February 2009, S. 505-519.
- Hülsmann, M.; Friedrich, C. M.; Reith, D.: *A new approach to explicable sales forecast models for the German automobile market*. In: ERCIM News. (2009), 78, S. 30-31.
- Joosten, R. P.; [...] Kasam, V. [...]: *PDB-REDO: automated re-refinement of X-ray structure models in the PDB*. In: Journal of applied crystallography. 42 (2009), 3, S. 376-384.
- Joseph, L. C.; Bennett, J. A.; Kirschner, K. N.; Shields, G. C.; Hughes, J.; Lostritto, N.; Jacobson, H. I.; Andersen, T. T.: *Antiestrogenic and anticancer activities of peptides derived from the active site of alpha-fetoprotein*. In: Journal of peptide science. 15 (2009), 4, S. 319-325.
- Kalkbrenner, T.; Arnold, A.; Tans, S. J.: *Internal dynamics of supercoiled DNA molecules*. In: Biophysical journal. 96 (2009), 12, S. 4951-4955.
- Kasam, V.; [...] Maaß, A.; [...] Hofmann-Apitius, M.; Breton, V.: *WISDOM-II: Screening against multiple targets implicated in malaria using computational grid infrastructures*. In: Malaria journal. 8 (2009), 1, 16 S.
- Keller, V.; Rasheed, H.; Wäldrich, O.; Ziegler, W.; Gruber, R.; Sawley, M.-C.; Wieder, P.: *Models and internals of the IANOS resource broker*. In: Computer Science, Research + Development. 23 (2009), 3-4, S. 259-266.
- Keller, V.; Ziegler, W.: *IANOS: how to do more science with less energy*. In: ERCIM News. (2009), 79, S. 26-27.
- Klinger, R.; Friedrich, C. M.: *Feature subset selection in conditional random fields for named entity*. In: Angelova, G. (Hrsg.) [...]: Proceedings of the International Conference Recent Advances in Natural Language Processing: RANLP 2009, 14.-16. September 2009, Borovets, Bulgaria, 2009, S. 185-191.
- Klinger, R.; Friedrich, C. M.: *User's choice of precision and recall in named entity recognition*. In: Angelova, G. (Hrsg.) [...]: Proceedings of the International Conference Recent Advances in Natural Language Processing: RANLP 2009, 14-16 September 2009, Borovets, Bulgaria, 2009, S. 192-196.
- Klinger, R.; Pesch, R.; Mevissen, H.-T.; Fluck, J.; International Society for Biocuration: *Text mining in full text articles*. Methodical and representation issues. Berlin, 2009.
- Köddermann, T.; Fumino, K.; Ludwig, R.; Lopes, J. N. C.; Padua, A. A. H.: *What far-infrared spectra can contribute to the development of force fields used in molecular dynamics simulations*. In: ChemPhysChem. 10 (2009), 8, S. 1181-1186.
- Kolárik, C.; Hofmann-Apitius, M.: *Linking chemical and biological information with natural language processing*. In: Banville, Debra L. (Hrsg.): Chemical information mining: facilitating literature-based discovery. Boca Raton, Fla. [u.a.]: CRC Press, 2009, S. 123-150.
- Kolárik, C.; Klinger, R.; Hofmann-Apitius, M.: *Identification of histone modifications in biomedical text for supporting epigenomic research*. In: BMC bioinformatics 10: Supplement 1 (2009), S28: Selected papers from the Seventh Asia-Pacific Bioinformatics Conference (APBC 2009): Beijing, China. 13-16 January 2009.
- Krämer-Fuhrmann, O.: *RCE – Reconfigurable Computing Environment: an open integration platform for distributed design*. In: International Association for the Engineering Analysis Community: Simulation Data Management – Integration into the Product Development Process: NAFEMS Seminar, Wiesbaden, 18.-19.03.2009. Wiesbaden, 2009, 9 S.
- Krämer-Fuhrmann, O.: *Rette sich wer kann – Feuersimulation auf Fährschiffen*. In: Trottenberg, U. (Hrsg.); Neunzert, H. (Hrsg.); Prätzel-Wolters, D. (Hrsg.): Mathematik in der Praxis: Zukunft gestalten – angewandte Mathematik. Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2009, S. 46-47.

- Krämer-Fuhrmann, O.; Klein, J.: **RCE – Remote Component Environment**. In: NAFEMS Mag. 14 (2009), 3, S. 33-43.
- Lidzba, J.; Rettenmeier, M.; Hahn, D.; Thole, C.-A.; Iza-Teran, R.: **Compression of NVH simulation results**. In: Proceedings. Glasgow: NAFEMS, 2009, 12 S. (The analysis advantage: perspectives on engineering simulation for today and beyond).
- Maaß, A.; Müller, T. J.; Nikitina, L.; Hülsmann, M.: **The perfect fit?: Balancing predictive power and computational complexity for an atomistic model as prerequisite for nano-scale simulations**. In: Chemistry central journal 3 (2009), Supplement 1: 4th German Conference on Chemoinformatics: 22. CIC-Workshop, Goslar, Germany. 9-11 November 2008; meeting abstracts.
- Peetz, J.-V.: **3ZM-GRIMEX – coupled simulation environment for flood**. In: Wolf, Klaus (Hrsg.): 10th MpCCI User Forum: February 17th and 18th, 2009, Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin, Germany; proceedings. Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2009, S. 122-125.
- Pichot, A.; Wieder, P.; Wäldrich, O.; Ziegler, W.: **Towards dynamic Service Level Agreement negotiation: an approach based on WS-agreement**. In: Cordeiro, J. (Hrsg.): Web information systems and technologies: 4th international conference, WEBIST 2008, Funchal, Madeira, Portugal, May 4-7, 2008; revised selected papers. Berlin [u.a.]: Springer, 2009, S. 107-119. (LNBIP 18).
- Raekow, Y.; Simmendinger, C.; Krämer-Fuhrmann, O.: **License management in grid and high performance computing**. In: Computer Science, Research + Development 23 (2009), 3-4: ISC ,09 Scientific Day proceedings: International Supercomputing Conference, 23. bis 26. Juni 2009, Hamburg., S. 275-281.
- Risselada, R.; Friedrich, C. M.; Ebeling, C.; Klinger, R.; [...] Hofmann-Apitius, M.: **Workflows for Data Mining in Integrated multi-modal Data of Intracranial Aneurysms using KNIME**. In: R Foundation for Statistical Computing: UseR!: the R User Conference 2009, July 8-10, Agrocampus-Ouest, Rennes, France. Rennes, 2009, S. 166.
- Rümpler, C.; Stammberger, H.; Zachari- as, H.; Reichert, F.: **Weiterentwicklung eines Lichtbogensimulationsmodells für die Anwendung in der Schalter- geräteentwicklung**. In: Berger, F. (Hrsg.): Kontaktverhalten und Schalten: 20. Fachtagung H.-Keil-Kontaktseminar, 7.-9. Oktober 2009, Universität Karlsruhe. Berlin, Offenbach: VDE-Verlag, 2009, S. 129-136. (VDE-Fachbericht 65).
- Salisbury, A. M.; Deline, A. L.; Lexa, K. W.; Shields, G. C.; Kirschner, K. N.: **Ramachandran-type plots for glycosidic linkages: Examples from molecular dynamic simulations using the Glycam06 force field**. In: Journal of computational chemistry. 30 (2009), 6, S. 910-921.
- Schüller, A.; Trottenberg, U.: **Algorithmen versus Lösungsformalen – Lehreraus- und Weiterbildung**. In: Trottenberg, U. (Hrsg.); Neunzert, H. (Hrsg.); Prätzel-Wolters, D. (Hrsg.): Mathematik in der Praxis: Zukunft gestalten – angewandte Mathematik. Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2009, S. 34-37.
- Shahid, M.; Hofmann-Apitius, M.; Wäldrich, O.; Ziegler, W.: **A robust framework for rapid deployment of a virtual screening laboratory**. In: Solomonides, T. (Hrsg.); Hofmann-Apitius, M. (Hrsg.); [...]: Healthgrid research, innovation and business case: proceedings of HealthGrid 2009, 29 June – 1 July, Berlin. Amsterdam [u.a.]: IOS Press, 2009, S. 212-221. (Studies in health technology and informatics 147).
- Sherbiny, F. F.; Schiedel, A. C.; Maaß, A.; Müller, C. E.: **Homology modelling of the human adenosine A(2B) receptor based on X-ray structures of bovine rhodopsin, the beta(2)-adrenergic receptor and the human adenosine A(2A) receptor**. In: Journal of computer-aided molecular design. 23 (2009), 11, S. 807-828.
- Sodemann, T.: **GridPower**. In: Trottenberg, U. (Hrsg.); Neunzert, H. (Hrsg.); Prätzel-Wolters, D. (Hrsg.): Mathematik in der Praxis: Zukunft gestalten – angewandte Mathematik. Sankt Augustin: Fhl SCAI, 2009, S. 48-49.
- Solomonides, T. (Hrsg.); Hofmann-Apitius, M. (Hrsg.); [...]: **Healthgrid research, innovation and business case: proceedings of HealthGrid 2009, 29 June – 1 July, Berlin**. Amsterdam [u.a.]: IOS Press, 2009. (Studies in health technology and informatics; 147).
- Sommer, T.; Karpf, C.; Etrich, N.; Weichel, T.; Peetz, J.-V.; Steckel, B.; Eulitz, K.; Ullrich, K.: **Coupled modeling of subsurface water flux for an integrated flood risk management**. In: Natural hazards and earth system sciences 9 (2009), 4, S. 1277-1290.
- Trottenberg, U.: **Das Superrechnerprojekt SUPRENUM (1984-1989)**. In: Reuse, B. (Hrsg.); Vollmar, R. (Hrsg.): Informatikforschung in Deutschland. Berlin: Springer, 2009, S. 176-185.
- Trottenberg, U.; Clees, T.: **Multigrid software for industrial applications – From MG00 to SAMG**. In: Hirschel, E. H. (Hrsg.); [...]: 100 volumes of »notes on numerical fluid mechanics«: 40 years of numerical fluid mechanics and aerodynamics in retrospect. Berlin [u.a.]: Springer, 2009, S. 423-436. (Notes on numerical fluid mechanics and multidisciplinary design 100).

Trottenberg, U. (Hrsg.); Neunzert, H. (Hrsg.); Prätzel-Wolters, D. (Hrsg.): **Mathematik in der Praxis: Zukunft gestalten – angewandte Mathematik.** Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2009.

Wolf, A.; Hofmann-Apitius, M.; [...] Kasam, V.: **DockFlow – a prototypic PharmaGrid for virtual screening integrating four different docking tools.** In: Solomonides, T. (Hrsg.); Hofmann-Apitius, M. (Hrsg.); [...]: Healthgrid research, innovation and business case: proceedings of Health-Grid 2009, 29 June – 1 July, Berlin. Amsterdam [u.a.]: IOS Press, 2009, S. 3-12. (Studies in health technology and informatics 147).

Wolf, K. (Hrsg.): **10th MpCCI User Forum: February 17th and 18th, 2009, Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin, Germany; proceedings.** Sankt Augustin: Fraunhofer SCAI, 2009.

2010

Azam, N.; [...] Wolf, A.; Kasam, V.; Wang, Y.; Hofmann-Apitius, M.: **DockFlow: Achieving interoperability of protein docking tools across heterogeneous Grid middleware.** In: International journal of ad hoc and ubiquitous computing. 6 (2010), 4, S. 235-251.

Battré, D.; [...] Wäldrich, O.; [...] Ziegler, W.: **A proposal for WS-Agreement Negotiation.** In: Association for Computing Machinery: Proceedings of the 2010 11th IEEE/ACM International Conference on Grid Computing. New York [u. a.]: IEEE, 2010, S. 233-241.

Battré, D.; Hovestadt, M.; Wäldrich, O.: **Lessons learned from implementing WS-Agreement.** In: Wieder, P. (Hrsg.); Jahyapour, R. (Hrsg.); Ziegler, W. (Hrsg.): Grids and service-oriented architectures for service level agreements. New York [u.a.]: Springer, 2010, S. 23-34. (CoreGrid series 13).

Battré, D.; Kübert, R.; Tenschert, A.; Wäldrich, O.; Ziegler, W.: **A service level agreement layer for the D-Grid infrastructure.** In: eChallenges 2010: Warsaw, 27.9.-29.9.2010. 2010

Battré, D. (Hrsg.); Wieder, P. (Hrsg.); Ziegler, W. (Hrsg.): **WS-Agreement Specification Version 1.0 Experience Document.** Open Grid Forum, 2010. (OGF document series). – Reportnr. GFD-E.167

Batycky, R.; Förster, M.; Thiele, M.; Stüben, K.: **Parallelization of a commercial streamline simulator and performance on practical models.** In: SPE journal of reservoir evaluation & engineering. 13 (2010), 3, S. 383-390.

Benkner, S.; [...] Friedrich, C. M.; [...] Lonsdale, G.; [...]: **@neurIST infrastructure for advanced disease management through integration of heterogeneous data, computing, and complex processing services.** In: IEEE transactions on information technology in biomedicine. 14 (2010), 6, S. 1365-1377.

Birkenheuer, G.; [...] Ziegler, W.: **Connecting communities on the meta-scheduling level: the DGS approach.** In: Bubak, M. (Hrsg.); [...]: Cracow Grid Workshop 09: October 12-14, 2009, Cracow, Poland; proceedings. Cracow: Academic Computer Centre CYFRONET AGH, 2010, S. 96-103.

Cacciari, C.; [...] Rumpl, A.; Ziegler, W. [...]: **elasticLM: A novel approach for software licensing in distributed computing infrastructures.** In: Qiu, J. (Hrsg.); [...]: 2nd IEEE International Conference on Cloud Computing Technology and Science: CloudCom 2010, 30 November-3 December 2010, Indianapolis, Indiana, USA. Los Alamitos, Calif.: IEEE Computer Society, 2010, S. 67-74.

Cacciari, C.; [...] Rumpl, A.; Ziegler, W.; [...]: **elasticLM – software license management for Distributed Computing Infrastructures.** In: ERCIM News. (2010), 83, S. 43.

Cacciari, C.; [...] Rumpl, A.; Ziegler, W.; [...]: **Software licenses as mobile objects in distributed computing environments.** In: Euro-Par 2010 workshops: Ischia, Italien, 31.8.-3.9. 2010. Berlin [u.a.]: Springer, 2010

- Cacciari, C.; [...] Rumpl, A.; Ziegler, W.; Martrat, J.: *SLA-based management of software licenses as web service resources in distributed environments*. In: Altmann, J. (Hrsg.); Rana, O. F. (Hrsg.): Economics of grids, clouds, systems, and services: 7th international workshop, GECON 2010, Ischia, Italy, August 31, 2010. Berlin [u.a.]: Springer, 2010, S. 78-92. (Lecture notes in computer science 6296).
- Cai, Y.; [...] Lei, Gu: *A novel sequence-based method of predicting protein DNA-binding residues, using a machine learning approach*. In: Molecules and cells. 30 (2010), 2, S. 99-105.
- Christmann, C.; [...] Klein, J.; Krämer-Fuhrmann, O.; Weisbecker, A. (Hrsg.); Hepp, E. (Hrsg.); Kassem-Manthey, K. (Hrsg.); Schreiber, A. (Hrsg.): *Partner-Grid – Kooperative Grid-Lösungen für industrielle Anwendungen*. Stuttgart: Fraunhofer-Verlag, 2010.
- Clees, T.; Ganzer, L.: *An efficient algebraic multigrid solver strategy for adaptive implicit methods in oil-reservoir simulation*. In: SPE journal. 15 (2010), 3, S. 670-681.
- Clees, T.; Steffes-lai, D.: *Effiziente stochastische Analyse ganzer Prozessketten mit einer Anwendung im Automobilbau*. In: Symposium »Simulation für robuste Produkte und Prozesse«: 9.-11. Februar 2010, Bremen. Berlin [u.a.]: Springer, 2010
- Clees, T.; Steffes-lai, D.: *PRO-CHAIN: efficient statistical analysis of process chains*. In: ERCIM News (2010), 81: Special theme: Scientific computing / computational science simulation & modeling for research and industry., S. 29-30.
- Clees, T.; Steffes-lai, D.: *PRO-CHAIN efficient statistical analysis of process chains applied to a forming-to-crash example*. In: DYNAmore: 9th LS-DYNA Forum 2010: 12.-13. Oktober 2010 in Bamberg. Stuttgart, 2010, 11 S.
- Clees, T.; Steffes-lai, D.; Helbig, M.; Sun, D.-Z.: *Statistical analysis and robust optimization of forming processes and forming-to-crash process chains*. In: International journal of material forming 3 (2010), Supplement 1: Proceedings of the 13th ESAFORM Conference on Material Forming, Brescia (Italy), 7-9 April 2010., S. 45-48.
- Déspréz, Frederic; Krämer-Fuhrmann, O.; Yahyapour, R.: *Cloud Computing – Introduction to the Special Theme*. In: ERCIM News. (2010), 83, S. 12-13.
- Fally, B.; Ahtes, J.; Martensmeier, T.: *Approaching the Cloud: better business using Grid solutions: twenty-five successful case studies from BEinGRID*. BEinGRID, 2010.
- Friedrich, C. M.; Ebeling, E.; Manset, D.: *Cross-project uptake of biomedical text mining results for candidate gene searchers*. In: ERCIM News. (2010), 82, S. 45-46.
- Gaeta, A.; [...] Schwichtenberg, H.; Gemünd, A.; [...] *Bringing it all together*. In: Dimitrakos, T. (Hrsg.); Martrat, J. (Hrsg.); Wesner, S. (Hrsg.): Service oriented infrastructures and cloud service platforms for the enterprise: a selection of common capabilities validated in real-life business trials by the BEinGRID consortium. Heidelberg [u.a.]: Springer, 2010, S. 179-210.
- Gerstner, T.; Griebel, M.: *Sparse grids*. In: Cont, R. (Hrsg.): Encyclopedia of Quantitative Finance, Chichester, Wiley, 2010, S. 1661-1666.
- Griebel, M.; Hamaekers, J.: *Tensor product multiscale many-particle spaces with finite-order weights for the electronic Schrödinger equation*. In: Zeitschrift für Physikalische Chemie. 224 (2010), 3/4, S. 527-543.
- Griebel, M.; Hamaekers, J.: *Tensor product multiscale many-particle spaces with finite-order weights for the electronic Schrödinger equation*. In: Dolg, Franz M. (Hrsg.): Modern and universal first-principles methods for many-electron systems in chemistry and physics. München: Oldenbourg, 2010, S. 237-253. (Progress in physical chemistry 3).
- Griebel, M.; Hegland, M.: *A finite element method for density estimation with Gaussian priors*. In: SIAM journal on numerical analysis. 47 (2010), 6, S. 4759-4792.
- Griebel, M.; Holtz, M.: *Dimension-wise integration of high-dimensional functions with applications to finance*. In: Journal of complexity. 26 (2010), 5, S. 455-489.
- Griebel, M.; Klitz, M.: *Homogenisation and numerical simulation of flow in geometries with textile microstructures*. In: Multiscale modeling & simulation. 8 (2010), 4, S. 1439-1460.
- Griebel, M.; Kuo, F. Y.; Sloan, I. H.: *The smoothing effect of the ANOVA decomposition*. In: Journal of complexity. 26 (2010), 5, S. 523-551.
- Griebel, M.; Zaspel, P.: *A multi-GPU accelerated solver for the three-dimensional two-phase incompressible Navier-Stokes equations*. In: Computer Science, Research and Development, 25 (2010), 1-2, S. 65-73.

- Grigoriev, D.; Schwarz, F.: **Absolute factoring of non-holonomic ideals in the plane**. In: Watt, S. M. (Hrsg.): ISSAC 2010: proceedings of the 2010 ACM-SIGSAM International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation, Munich, July 20-23, 2010. New York, NY: ACM, 2010, S. 93-97.
- Gurulingappa, H.; Hofmann-Apitius, M.; Fluck, J.: **Concept identification and assertion classification in patient health records**. In: Fourth i2b2/VA Shared-Task and Workshop Challenges in Natural Language Processing for Clinical Data: Washington, DC, November 12-13, 2010. Albany, NY: State University of New York, 2010, 5 S.
- Gurulingappa, H.; Klinger, R.; Hofmann-Apitius, M.; Fluck, J.: **An empirical evaluation of resources for the identification of diseases and adverse effects in biomedical literature**. In: Ananiadou, S. (Hrsg.); [...]: 2nd Workshop on Building and Evaluating Resources for Biomedical Text Mining: March 18, 2010 Valletta, Malta. Valletta, 2010, S. 15-22.
- Hagemeyer, B.J.; Mallmann, D.; Ziegler, W.: **Securing software licenses in a location independent manner**. In: Bubak, M. (Hrsg.); [...]: Cracow Grid Workshop 09: October 12 – 14, 2009, Cracow, Poland; proceedings. Cracow: Academic Computer Centre CYFRONET AGH, 2010, S. 112-119.
- Hornung, N.; Nikitina, L.; Clees, T.: **Multi-objective optimization using surrogate functions**. In: Rodrigues, H. (Hrsg.) [...]: 2nd International Conference Engineering Optimization, Lisbon, 6-9 September 2010. Lisboa: APMTAC – Associação Portuguesa de Mecânica Teórica, Aplicada e Computacional, 2010, S. 270.
- Hülsmann, M.; Köddermann, T.; Reith, D.: **Engineering chemical substances via molecular simulations utilizing efficient gradient-based optimization algorithms**. In: ERCIM News (2010), 81: Special theme: Scientific computing/computational science simulation & modelling for research and industry, S. 25-26.
- Hülsmann, M.; Köddermann, T.; Vrabc, J.; Reith, D.: **GROW: a gradient-based optimization workflow for the automated development of molecular models**. In: Computer physics communications. 181 (2010), 3, S. 499-513.
- Hülsmann, M.; Müller, T. J.; Köddermann, T.; Reith, D.: **Automated force field optimisation of small molecules using a gradient-based workflow package**. In: Molecular simulation. 36 (2010), 14, S. 1182-1196.
- Hülsmann, M.; Vrabc, J.; Maaß, A.; Reith, D.: **Assessment of numerical optimization algorithms for the development of molecular models**. In: Computer physics communications. 181 (2010), 5, S. 887-905.
- Kirschner, K. N.; Arnold, A.; Maaß, A.: **Reliable pathways toward multiscale modelling**. In: ERCIM News (2010), 81: Special theme: Scientific computing/computational science simulation & modelling for research and industry., S. 22-23.
- Kirschner, K. N.; Heikamp, K.; Reith, D.: **Atomistic simulations of isotactic poly(methyl methacrylate) melts: Exploring the backbone conformation**. In: Molecular simulation 36 (2010), 15: Fourth International Conference on the Foundations of Molecular Modeling and Simulation (FOMMS 2009), S. 1253-1264.
- Klatt, T.; Rasheed, H.; Shahid, M.; Wäldrich, O.; Ziegler, W.: **SCAI-VHTS – a fully automated virtual high throughput screening framework**. In: ERCIM News. (2010), 82, S. 23-24.
- Krämer-Fuhrmann, O.: **Shipbuilding integrates Grid technology**. In: Fally, B.; Ahtes, J.; Martensmeier, T.: Approaching the Cloud: better business using Grid solutions: twenty-five successful case studies from BEinGRID. BEinGRID, 2010, S. 20-21.
- Krämer-Fuhrmann, O.; Raekow, Y.: **Business experiment ship building**. In: Stanoevska-Slabeva, K. (Hrsg.); Wozniak, T. (Hrsg.); Ristol, S. (Hrsg.): Grid and cloud computing: a business perspective on technology and applications. Heidelberg [u.a.]: Springer, 2010, S. 159-172.
- Lawrence, A.; Wäldrich, O.; Ziegler, W.; [...]: **Using service level agreements for optimising cloud infrastructure services**. In: ServiceWave 2010 workshops: Ghent, December 13-15, 2010. Berlin [u.a.]: Springer, 2010 (LNCS).
- Maaß, A.; Nikitina, L.; Kirschner, K. N.; Reith, D.: **Multi-objective force field optimization on basis of random models for ethylene oxide**. In: Molecular simulation 36 (2010), 15: Fourth International Conference on the Foundations of Molecular Modeling and Simulation (FOMMS 2009), S. 1208-1218.
- Maaß, A.; [...] Schüller, A.; [...] Reith, D.; [...]: **Comparing the folding and unfolding characteristics of short peptides using principal component analysis**. In: BBA: Proteins and proteomics. 1804 (2010), 10, S. 2003-2010.

- Müller, B.; Klinger, R.; Gurulingappa, H.; Mevissen, H.-T.; Hofmann-Apitius, M.; Fluck, J.; Friedrich, C. M.: **Abstracts versus full texts and patents: a quantitative analysis of biomedical entities**. In: Cunningham, H. (Hrsg.); Hanbury, A. (Hrsg.); Rüger, S. (Hrsg.): Advances in multidisciplinary retrieval: 1st Information Retrieval Facility Conference, IRFC 2010, Vienna, Austria, May 31, 2010. Berlin [u.a.]: Springer, 2010, S. 152-165. (LNCS 6107)
- Naumovich, A.; Förster, M.; Dwight, R.: **Algebraic multigrid within defect correction for the linearized Euler equations**. In: Numerical linear algebra with applications. 17 (2010), 3-4, S. 307-324.
- Raekow, Y.; Simmendinger, E.; [...]: **License management in grid and cloud computing**. In: Fukuoka Institute of Technology: 2010 International Conference on P2P, Parallel, Grid, Cloud and Internet Computing: Fukuoka, Fukuoka Prefecture Japan, November 04-November 06, 2010. Piscataway, NJ [u.a.]: IEEE, 2010, S. 9-15.
- Rana, O.; Ziegler, W.: **Research challenges in managing and using Service Level Agreements**. In: Desprez, F. (Hrsg.); Getov, V. (Hrsg.); Priol, T. (Hrsg.); Yahyapour, R. (Hrsg.); European Research Consortium for Informatics and Mathematics: Grids, P2P and services computing: based on the CoreGrid ERCIM Working Group Workshop on Grids, P2P and Service Computing in Conjunction with EuroPar 2009, August 24th, 2009 in Delft, The Netherlands. New York [u.a.]: Springer, 2010, S. 187-200. (CoreGrid series 12).
- Rasheed, H.; Ruml, A.; Ziegler, W.; Gozalo, M.: **Demonstration of the SmartLM license management technology for distributed computing infrastructures**. In: DiNitto, E. (Hrsg.); Yahyapour, R. (Hrsg.): Towards a service-based internet: third european conference, ServiceWave 2010, Ghent, Belgium, December 13-15, 2010. Berlin [u.a.]: Springer, 2010, S. 190-192. (Lecture notes in computer science 6481).
- Risselada, R.; [...] Friedrich, C. M.; [...]: **Prediction of 60 day case-fatality after aneurysmal subarachnoid haemorrhage: results from the International Subarachnoid Aneurysm Trial (ISAT)**. In: European journal of epidemiology. 25 (2010), 4, S. 261-266.
- Ruml, A.; Wäldrich, O.; Ziegler, W.: **Extending WS-AGREEMENT with multi-round negotiation capability**. In: Wieder, P. (Hrsg.); Jahyapour, R. (Hrsg.); Ziegler, W. (Hrsg.): Grids and service-oriented architectures for service level agreements. New York [u.a.]: Springer, 2010, S. 89-103. (CoreGrid series 13).
- Schiedel, A. C.; [...] Maaß, A.; Müller, C. E.: **Adenosine A(2B) receptors: Mutagenesis, modeling and new ligands to study drug-receptor interaction and activation**. In: Purinergic signalling. 6 (2010), 1, S. 69.
- Schlauch, T.; [...] Soddemann, T.; Schreiber, A.: **A data management system for UNICORE 6**. In: Lin, H.-X. (Hrsg.); Alexander, M. (Hrsg.); Forsell, M. (Hrsg.) [u.a.]: Euro-Par 2009 parallel processing workshops: HPPC, HeteroPar, PROPER, ROIA, UNICORE, VHPC, Delft, The Netherlands, August 25-28, 2009. Berlin [u.a.]: Springer, 2010, S. 353-362. (Lecture notes in computer science 6043).
- Schwarz, F.: **Ideal intersections in rings of partial differential operators**. In: Advances in applied mathematics. 46 (2010).
- Schwarz, F.: **Solving inhomogeneous linear partial differential equations**. In: Journal of partial differential equations. 23 (2010), 4, S. 374-388.
- Sherbiny, F. F.; Schiedel, A. C.; Maaß, A.; Müller, C. E.: **Homology modelling of the human adenosine A(2B) receptor based on X-ray structures of bovine rhodopsin, the beta(2)-adrenergic receptor and the human adenosine A(2A) receptor**. In: Purinergic signalling. 6 (2010), 1, S. 109-110.
- Simmendinger, E.; Raekow, Y.; Krämer-Fuhrmann, O.; Jenz, D.: **License management**. In: Dimitrakos, T. (Hrsg.); Martrat, J. (Hrsg.); Wesner, S. (Hrsg.): Service oriented infrastructures and cloud service platforms for the enterprise: a selection of common capabilities validated in real-life business trials by the BEinGRID consortium. Heidelberg [u.a.]: Springer, 2010, S. 125-139.
- Steffens, M.; [...] Gerstner, T.; Griebel, M.; [...]: **Feasible and successful: Genome-wide Interaction Analysis (GWIA) involving all 1.9x10¹¹ pair-wise interaction tests**. In: Human heredity. 69 (2010), 4, S. 268-284.
- Streit, A.; [...] Soddemann, T.; Ziegler, W.: **UNICORE 6 – recent and future advancements**. Jülich: Forschungszentrum, 2010. (Berichte des Forschungszentrums Jülich; 4319). – Reportnr. Jül – 4319
- Streit, A.; [...] Soddemann, T.; Ziegler, W.: **UNICORE 6 – Recent and Future Advancements**. In: A.I.s of telecommunications. 65 (2010), 11-12, S. 757-762.

Thole, C.-A.: *Advanced mode analysis for crash simulation results*. In: 11th International LS-DYNA Users Conference 2010: June 6-8, 2010, Dearborn, Michigan, USA. Livermore, Calif.: Livermore Software Technology Corporation, 2010, 7 S.

Thole, C.-A.; Nikitina, L.; Nikitin, I.; Clees, T.: *Advanced mode analysis for crash simulation results*. In: DYNAmore: 9th LS-DYNA Forum 2010: 12.-13. Oktober 2010 in Bamberg. Stuttgart, 2010, S.I/1/11-I/1/20.

Thum, P.; Clees, T.: *Towards physics-oriented smoothing in algebraic multigrid for systems of partial differential equations arising in multi-ion transport and reaction models*. In: Numerical linear algebra with applications. 17 (2010), 2-3, S. 253-271.

Thum, P.; Clees, T.; [...]: *Efficient algebraic multigrid for migration-diffusion-convection-reaction systems arising in electrochemical simulations*. In: Journal of computational physics. 229 (2010), 19, S. 7260-7276.

Trottenberg, U.; Poutré, H. L.: *Scientific computing/computational science: simulation & modelling for research and industry: introduction to the special theme*. In: ERCIM News (2010), 81: Special theme: Scientific computing/computational science simulation & modelling for research and industry., S. 10-11.

Wieder, P. (Hrsg.); Jahyapour, R. (Hrsg.); Ziegler, W. (Hrsg.): *Grids and service-oriented architectures for service level agreements*. New York [u.a.]: Springer, 2010. (CoreGrid series; 13). – ISBN 978-1-4419-7319-1

Wolf, A.; Shahid, M.; Kasam, V.; Ziegler, W.; Hofmann-Apitius, M.: *In silico drug discovery approaches on Grid computing infrastructures*. In: Current clinical pharmacology. 5 (2010), 1, S. 37-46.

Wolf, K.; Bayrasy, P.: *Generic coupling of 1D system codes with 3D CFD tools*. In: ERCIM News (2010), 81: Special theme: Scientific computing/computational science simulation & modelling for research and industry., S. 27-28.

Yasuno, K.; [...] Friedrich, C. M.; [...]: *Genome-wide association study of intracranial aneurysm identifies three new risk loci*. In: Nature genetics. 42 (2010), 5, S. 420-425.

Yilmaz, S.; [...] Ebeling, C.; Friedrich, C. M.; [...]: *Gene expression signature in peripheral blood cells detects intracranial aneurysm*. In: Neurosurgery. 67 (2010), 2, S. 540.

GRADUIERUNGSARBEITEN

Dissertationen

Rümppler, C.: *Lichtbogensimulation für Niederspannungsschaltgeräte*.

Stuttgart, Fraunhofer Verlag, 2009, ISBN 978-3-8396-0037-5; Zugl.: Technische Universität Ilmenau, 2009.

Croce, R.: *Numerische Simulation der Interaktion von inkompressiblen Zweiphasenströmungen mit Starrkörpern in drei Raumdimensionen*. Universität Bonn, 2010.

Feuersänger, C.: *Sparse Grid Methods for Higher Dimensional Approximation*. Universität Bonn, 2010.

Hohmann, C.: *Kinetic Analysis of MP4A PET Images of Human Brain using Voxel based Nonlinear Least Squares Fitting*. Universität zu Köln, 2010.

Kasam, V. Kumar: *In silico drug discovery on computational Grids for finding novel drugs against neglected diseases*. Universität Bonn, 2010.

Diplom- und Masterarbeiten

Aab, T.; Nakhumovich, V.: *Workflow-basierte Automatisierung chemischer Simulationen unter Berücksichtigung verschiedener Möglichkeiten der parallelen Ausführung*. Universität Bonn, 2009.

Gurulingappa, H.: *Concept-based semi-automatic extension of drug hierarchies*. Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT), 2009.

Haupt, C. S.: *Mesh structure reconstruction: a prototype for their reconstruction from image and text into a searchable, context sensitive grammar based extension of SMILES*. Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, 2009.

Klimm, B.: *A minimization based mapping algorithm for data transfer between simulation meshes*. Universität zu Köln, 2009.

Kuhn, J. A. M.: *Beschleunigung der Echtzeit-Interpolation von FE-Daten mittels SVD*. Universität zu Köln, 2009.

Müller, B.: *Visualization and analysis of extracted information from full text and patent corpora*. B-IT, 2009.

Praveen, P.: *Computational modeling of host-pathogen protein interactions*. B-IT, 2009.

Sahadevan, S.: *Adaptation of the mining environment SCAIView to the needs of animal scientists*. B-IT, 2009.

Weuffel, T.: *Vorbelegung und lose Reservierung von Ressourcen in lokalen Cluster-Umgebungen: Evaluation, Modellierung und Implementierung eines objektorientierten Cluster-Schedulers unter Berücksichtigung von Advance Reservation und loser Reservierung*. Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, 2009.

Asadulina, A.: *A dictionary of chemical names and synonyms merged from different resources based on 2d graph representation for the purpose of recognition of chemical names in the text*. B-IT, 2010.

Bohn, B.: *Einbettung von Zeitreihen nach Takens' Theorem*. Universität Bonn, 2010.

Burkow, M.: *Numerische Simulation stroemungsbedingten Sediment-transports und der entstehenden Gerinnebettformen*. Universität Bonn, 2010.

Gu, L.: *Analyzing human complex diseases by applying genome-wide association study, candidate approach, pathway-based approach and endophenotype analysis*. B-IT, 2010.

Lohmar, A.: *Untersuchungen zur Interpolation in AMG bei positiven Kopplungen und Blockstrukturen am Beispiel der Elastizitätsgleichung. Hochpass-Quantisierung für die Kompression von Simulationsergebnissen*. Universität zu Köln, 2010.

Müller, S.: *Hochpass-Quantisierung für die Kompression von Simulationsergebnissen*. Universität zu Köln, 2010.

Neuen, C.: *Ein Multiskalenansatz zur Poisson-Nernst-Planck Gleichung (A Multiscale Approach to the Poisson-Nernst-Planck Equation)*. Universität Bonn, 2010.

Rüttgers, A.: *Multiscale Modelling of Dilute Polymeric Fluids with Stochastic and Fokker-Planck-based Methods*. Universität Bonn, 2010.

Simeon, P.: *Das Gram-Schmidt-Verfahren auf Graphikprozessoren*. Universität zu Köln, 2010.

Tallam, A.: *Extraction of numerical measures, statistical evidences and units, their relation extraction with the text*. B-IT, 2010.

Bachelorarbeiten

Buschulte, K.: *Analyse und Implementierung von Verfahren zur Kompression des Dynamikumfangs von digitalen Bildern mit hohem dynamischen Kontrastumfang für die Parallelprozessorarchitektur Cell/B.E*. Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, 2009.

Car, Ö. F.: *Auswahl und Implementierung eines parallelen Verfahrens zur Ausrichtung von digitalen Fotografien unter Nutzung einer heterogenen Hardwarearchitektur*. Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, 2009.

Comans, P.: *Auswahl und Implementierung eines Verfahrens zur Reduktion von Ghosting in HDR-Bildern unter Nutzung der NVIDIA CUDA-Plattform*. Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, 2009.

Gosselin, C.: *Anwendung der spektralen Kompression auf 3D-Gitter aus Simulationsergebnissen*. Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, 2009.

Wielpütz, M.: *Mesoskopische Simulation von Polymeren unter Verwendung der Latice-Boltzmann-Methode auf dem Cell-Prozessor*. Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, 2009.

LEHRTÄTIGKEITEN

Sommersemester 2009, Wintersemester 2009 / 2010, Sommersemester 2010

Fluck, J.; Friedrich, C. M.; Hofmann-Apitius, M.; Klinger, R.: <i>Life Science Knowledge Discovery</i> . Vorlesung und Übung. Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT)	Hofmann-Apitius, M.: <i>LSI Colloquium</i> . Vortragsreihe. B-IT	Trottenberg, U.; Smith, E.: <i>Mathematik I für Wirtschaftsinformatiker</i> . Vorlesung und Übungen. Universität zu Köln
Förster, M.: <i>Ingenieurwissenschaftliche Werkzeuge 3</i> . Vorlesung und Praktikum. Universität zu Köln	Hofmann-Apitius, M.: <i>Current Trends in Applied Life Science Informatics</i> . Seminar. B-IT	Trottenberg, U.; Smith, E.: <i>Mathematik II für Wirtschaftsinformatiker</i> . Vorlesung und Übungen. Universität zu Köln
Friedrich, C. M.; Hofmann-Apitius, M.: <i>Life Science Knowledge Discovery Technologies</i> . Seminar. B-IT	Hofmann-Apitius, M.: <i>Introduction to BioDatabases</i> . Vorlesung und Übung. B-IT	Trottenberg, U., Wienands, R.: <i>Numerische Mathematik III</i> . Vorlesung und Übungen. Universität zu Köln
Griebel, M.: <i>Numerische Mathematik</i> . Vorlesung. Universität Bonn	Hofmann-Apitius, M.: <i>Grid Computing</i> . Seminar und Praktikum. B-IT	Trottenberg, U.; Tischendorf, C.; Seydel, R.: <i>Numerische und angewandte Mathematik</i> . Oberseminar. Universität zu Köln
Griebel, M.: <i>Advanced Topics in Scientific Computing – Optimization with PDEs</i> . Vorlesung. Universität Bonn	Hofmann-Apitius, M.: <i>Computer-aided Medicinal Chemistry</i> . Kurs und Praktikum. B-IT	Trottenberg, U.; Tischendorf, C.; Seydel, R.: <i>Doktorandenseminar</i> . Universität zu Köln
Griebel, M.: <i>Graduate Seminar on Efficient Simulation</i> . Oberseminar. Universität Bonn	Hofmann-Apitius, M.: <i>Life Science Knowledge Discovery</i> . Vorlesung und Übung. B-IT	Trottenberg, U.: <i>Kolloquium Wissenschaftliches Rechnen</i> . Universität zu Köln
Griebel, M.: <i>Master's Thesis Seminar</i> . Seminar. Universität Bonn	Hofmann-Apitius, M.: <i>Knowledge Engineering Jambouree</i> . Workshop. B-IT	Trottenberg, U.: <i>Algorithmen im Schulunterricht</i> . Seminar. Universität zu Köln
Griebel, M.: <i>Wissenschaftliches Rechnen</i> . Seminar. Universität Bonn	Kraus, J.: <i>Mathematik I+II für Maschinenbauer</i> . Kurs. Hochschule Bonn-Rhein-Sieg	
Griebel, M.: <i>Numerical Simulation – Computational Fluid Dynamics</i> . Praktikum. Universität Bonn	Maaß, A.: <i>Computersimulation in der Polymer-Forschung</i> . Praktikum. Fachhochschule Koblenz/ RheinAhrCampus Remagen	
Griebel, M.; Hamaekers, J.: <i>Programmierpraktikum numerische Algorithmen – Partikelmethode und gitterlose Diskretisierungen</i> . Praktikum. Universität Bonn	Raekow, Y.: <i>Objektorientiertes Programmieren mit Java</i> . Vorlesung. Hochschule Bonn-Rhein-Sieg	
Griebel, M.: <i>Programmierpraktikum numerische Algorithmen - Wissenschaftliches Rechnen</i> . Praktikum. Universität Bonn	Reith, D.: <i>Mathematische Modellbildung und Simulation</i> . Vorlesung. Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, Sankt Augustin	



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 Bus und Bahn

Von und nach Hangelar Ost verkehrt die Buslinie 516 (meistens im 30-Minuten-Takt). Hangelar Ost erreicht man tagsüber alle 10 Minuten mit der Straßenbahn aus Richtung Bonn oder Siegburg (Bahnlinie 66). Die Fahrzeit von Hangelar Ost nach Schloss Birlinghoven beträgt 10 Minuten.

Vom Hauptbahnhof Bonn beträgt die Fahrzeit mit dem Taxi etwa 20 Minuten. Mit der Buslinie 608 (Richtung Hoholz) ab Platz B3 fahren Sie bis zur Endstation Schloss Birlinghoven. Die Linie fährt meist alle 20 Minuten, die planmäßige Fahrzeit beträgt 41 Minuten.

Von den Bahnhöfen Bonn und Siegburg/Bonn beträgt die Fahrzeit mit dem Taxi je 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 IC oder ICE nach Bonn Hauptbahnhof oder Siegburg/Bonn. Weiter siehe »Bahn«.



ADRESSEN

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

Telefon +49 2241 14-2500
Fax +49 2241 14-2460

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

Institutsleitung

Prof. Dr. Ulrich Trottenberg (geschäftsführend)
Telefon +49 2241 14-2500
ulrich.trottenberg@scai.fraunhofer.de

Prof. Dr. Michael Griebel
Telefon +49 2241 14-2500
michael.griebel@scai.fraunhofer.de

Bildquellen

Seite 10: Dr. Thomas Mauersberg/Universität Bonn (1),
Norbert Jaehrling/Universität zu Köln (2)
Seite 15: Forschungszentrum Jülich (4)
Seite 20: Barbara Frommann/Universität Bonn (1)
Seite 24: Daimler AG
Seite 26: Metzeler Automotive Profile Systems (2), TWT (3)
Seite 28: Faurecia
Seite 31: Hennecke GmbH
Seite 37: Elsyca
Seite 38: Volkswagen AG (2)

IMPRESSUM

© 2011
Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches
Rechnen SCAI, Sankt Augustin

Alle Rechte vorbehalten.

Ohne schriftliche Genehmigung des Herausgebers ist es nicht
gestattet, den Bericht oder Teile daraus in irgendeiner Form
durch Fotokopie, Mikrofilm oder andere Verfahren zu repro-
duzieren oder in eine für Maschinen, insbesondere Datenver-
arbeitungsanlagen, verwendbare Form zu übertragen.
Dasselbe gilt für die öffentliche Wiedergabe. Warennamen
werden ohne Gewährleistung der freien Verwendbarkeit
benutzt.

Der Herausgeber bedankt sich bei den Kooperationspartnern
für die überlassenen Bilder.

Fachtexte

Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des Fraunhofer SCAI

Redaktion

Diplom-Journalist (TU Dortmund) Michael Krapp

Gestaltung und Produktion

Diplom-Designer (FH) Till Martensmeier
Martin Strubich (Auszubildender Mediengestalter)

Alle anderen Abbildungen: © Fraunhofer SCAI

