



Fraunhofer

SCAI

FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR ALGORITHMEN UND WISSENSCHAFTLICHES RECHNEN SCAI



JAHRESBERICHT 2016 / 17

JAHRESBERICHT 2016 / 17

TITELBILD

*Zeitabhängige niederdimensionale Darstellung
der Verformungen des Längsträgers eines Autos
bei Variation der Blechdicken. Eine Bifurkation der
Verformungsmodi ist deutlich zu erkennen.*



Vorwort	5	Virtual Material Design	30
Profil, Kuratorium, Spin-off	6	High Performance Analytics	32
Zahlen und Fakten	7	Numerische Datenbasierte Vorhersage	34
Die Fraunhofer-Gesellschaft	8	Meshfree Multiscale Methods	36
Forschung und Lehre	9	Computational Finance	38
SCAILights	10	Weiterführende Informationen	40
Ausgewählte Projekte	14	Online-Rubriken des Jahresberichts	40
Ausgewählte Produkte	16	Impressum, Anschrift	41
Maschinelles Lernen	18		
Multiphysics	20		
High Performance Computing	22		
Schnelle lineare Löser	24		
Bioinformatik	26		
Optimierung	28		

Liebe Leserinnen und Leser,

2016 war das bislang wirtschaftlich erfolgreichste Jahr für SCAI. Hervorzuheben ist die Kontinuität dieses Erfolgs: Bereits seit mehreren Jahren macht der Anteil der Wirtschaftserträge etwa die Hälfte des Betriebshaushalts des Instituts aus. Ähnlich gute Erträge werden für das Jahr 2017 erwartet.

Garanten für den wirtschaftlichen Erfolg sind unsere Software-Produkte, die bei Unternehmen weltweit im Einsatz sind. Zu nennen sind hier die »Klassiker«: AutoNester (automatische Anordnung von Schnittbildern auf verschiedenen Materialien), PackAssistant (optimierte Verpackung von Bauteilen in Behältern), MpCCI (Kopplung von Simulationsprogrammen), SAMG (schnelle Lösung großer Gleichungssysteme) und Tremolo-X (numerische Simulation in der Moleküldynamik). Zudem ist im Jahr 2017 von unserer Abteilung *Optimierung* die Software AutoBarSizer (optimierter Zuschnitt von Stahlprofilen) als neues Produkt auf den Markt gebracht worden.

Digitalisierung, Big Data und Data Analytics stehen für die Zukunft der industriellen Produktion. Als mathematisches Institut bringen wir unsere Kompetenzen unter anderem in die Forschungsprogramme der Fraunhofer-Gesellschaft zu den genannten Themen ein. Auch auf dem Gebiet des Maschinellen Lernens (ML) sind neue numerische Verfahren unsere Stärke. So entwickelt unsere Abteilung *Numerische Datenbasierte Vorhersage* neue Methoden und Algorithmen, mit denen sich Sensordaten und Ergebnisdaten aus numerischen Simulationen zusammen analysieren lassen. Mit diesen sogenannten Gray-Box-Ansätzen kann man bei der Datenanalyse bessere Ergebnisse erzielen als mit konventionellen Verfahren. In der Abteilung *Virtual Material Design* gelingt es durch innovative Ansätze im ML, neue Materialien schneller und wesentlich günstiger zu entwerfen.

Große internationale Anerkennung finden auch die Arbeiten unserer Abteilung *Bioinformatik* in der Informationsextraktion (Text Mining) und der Modellierung neurodegenerativer und psychischer Krankheiten – dies sowohl in akademischen, als auch in industriellen Forschungskreisen.

SCAI profitiert von der intensiven Kooperation mit dem Institut für Numerische Simulation der Universität Bonn und dem Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT), deren langjährige Forschungsarbeiten eine Basis für unsere anwendungsorientierten Entwicklungen bilden. Von der Kombination unserer Expertise auf dem Gebiet der Numerischen Simulation, des High Performance Computing und des Maschinellen Lernens sind in den kommenden Jahren disruptive Fortschritte für Anwendungen der industriellen Praxis zu erwarten.

Wir arbeiten an all diesen und vielen anderen spannenden Themen mit hochmotivierten und hochqualifizierten Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern, denen ich ganz herzlich für ihren hohen persönlichen Einsatz danke. Sie bilden die Grundlage für den Erfolg des Instituts.

Unseren Kunden und Partnern danken wir für die fruchtbare Zusammenarbeit, zahlreiche Impulse und die hervorragende Unterstützung.

Wir laden Sie ein, auf den folgenden Seiten unsere Forschungsarbeiten, unsere Produkte und unsere Dienstleistungen kennen zu lernen.

Prof. Dr. Michael Griebel



Sitzung des Kuratoriums am 8. Juni 2017 auf Schloss Birlinghoven. Das Bild zeigt von links: Dr. Claus Axel Müller, Dr. Richard Trethewey, Dr. Dustin Feld, Dr. Anton Schüller, Dr. Jan Hamaekers, Dr. Tanja Clees, Klaus Wolf, Prof. Dr. Martin Hofmann-Apitius, Prof. Dr. Marc Alexander Schweitzer, Stephan Springstubbe, Prof. Dr. Michael Griebel, Carl Vogt, Dr. Thomas Soddemann, Christiane Stoll, Prof. Dr. Michael Schäfer, Prof. Dr. Jochen Garcke, Prof. Dr. Alfred Gossner, Prof. Dr. Reinhard Klein, Dr. Bernhard Thomas, Dr. Ulrich Leiner, Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz.

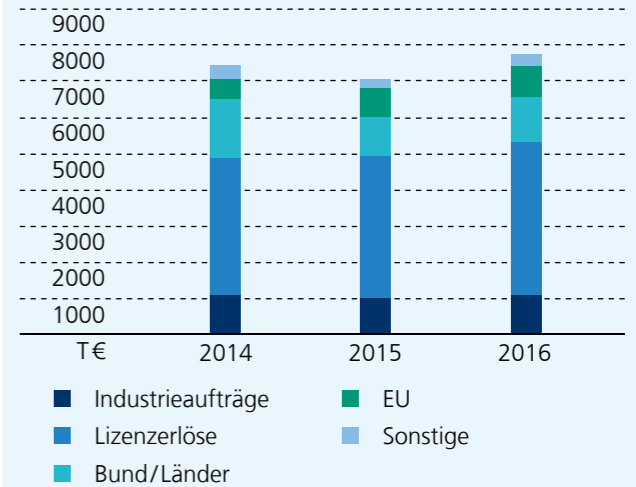
Institutsleitung	Prof. Dr. Michael Griebel
Forschungsabteilungen	
Simulationsanwendungen	Dr. Johannes Linden
Numerische Software	Prof. Dr. Marc Alexander Schweitzer
Bioinformatik	Prof. Dr. Martin Hofmann-Apitius
Optimierung	Dr. Ralf Heckmann
Virtual Material Design	Dr. Jan Hamaekers
High Performance Analytics	Dr. Tanja Clees
Computational Finance	Prof. Dr. Thomas Gerstner
Numerische Datenbasierte Vorhersage	Prof. Dr. Jochen Garcke
Zentrale Bereiche	
Planung und Controlling	Christiane Stoll
Marketing und Kommunikation	Michael Krapp
IT-Infrastruktur	Horst Schwichtenberg
Außenstelle Bonn	Dr. Jan Hamaekers

Kuratorium	Dr. Bernhard Thomas, Vorsitzender, <i>im.pulse - IT Management Consulting, Köln</i> Victoria Appelbe, <i>Stadt Bonn</i> Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz, <i>TU München</i> Prof. Dr. Reinhard Klein, <i>Universität Bonn</i> Dr. Claus Axel Müller, <i>Gauss Centre for Supercomputing, Bonn</i> Prof. Dr. Michael Schäfer, <i>TU Darmstadt</i> Ulrich Schüller, <i>Bundesministerium für Bildung und Forschung</i> Dr. Richard Trethewey, <i>BASF SE, Ludwigshafen am Rhein</i>
Spin-off	Die scapos AG wurde auf Initiative des Fraunhofer-Instituts für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI Anfang 2009 gegründet, um seine Produkte zu vertreiben. Die scapos AG, an der die Fraunhofer-Gesellschaft beteiligt ist, bietet ihre Dienstleistungen auch anderen Fraunhofer-Instituten und Forschungsorganisationen an. scapos AG Schloss Birlinghoven 53754 Sankt Augustin www.scapos.com

Externe Erträge

Fraunhofer SCAI hat im Jahr 2016 Wirtschaftserträge in Höhe von rund 5,3 Mio € erzielt und die positive Entwicklung der Vorjahre (rund 4,9 Mio € in 2014 und in 2015) fortgesetzt. Dabei stiegen die Erträge aus der Lizenzierung der Software-Produkte von 3,8 Mio € in 2014 über 3,9 Mio € in 2015 auf den neuen Rekordwert von 4,1 Mio € im Jahr 2016. Der Anteil der Wirtschaftserträge am Betriebsaufwand des Instituts lag 2014 bei 50 Prozent, 2015 bei 47 Prozent und 2016 bei 50,2 Prozent. Damit überstiegen die Wirtschaftserträge im siebten Jahr in Folge 40 Prozent deutlich.

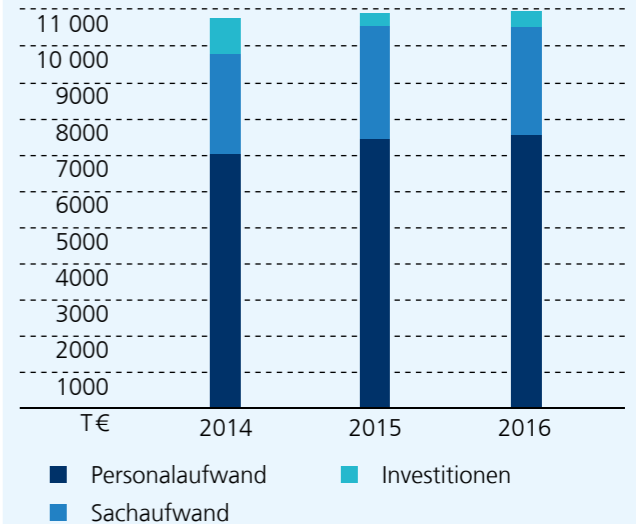
Externe Erträge



Der Großteil der Wirtschaftserträge besteht aus Lizenz Erlösen der erfolgreichen Software-Produkte des Instituts.

Aufwand

Der Anteil aller externen Erträge am Betriebshaushalt lag im Jahr 2016 bei 73,3 Prozent.



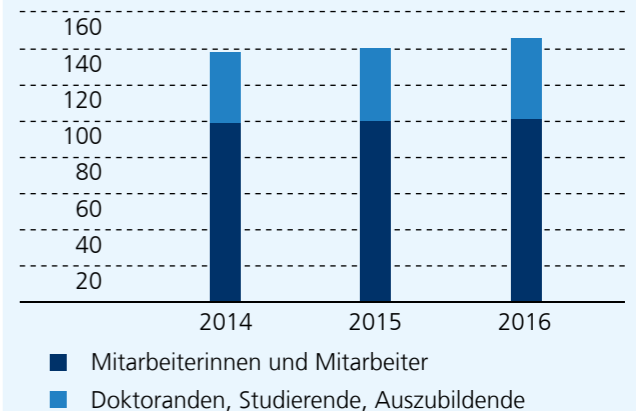
Aufwand

Der Betriebsaufwand des Instituts betrug 2014 knapp 10 Mio €, 2015 und 2016 jeweils rund 10,5 Mio €. Der Gesamthaushalt, in den auch Investitionen einfließen, stieg kontinuierlich von 10,7 Mio € im Jahr 2014 über 10,8 Mio € (2015) auf 10,9 Mio € (2016).

Personal

Zum Ende des Jahres 2016 hat Fraunhofer SCAI 146 Personen beschäftigt. Der gegenüber 2014 und 2015 zu beobachtende Anstieg beruht auf einer größeren Anzahl beschäftigter Studierender.

Personal





1

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 66 Institute und Forschungseinrichtungen. Knapp 24 000 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, überwiegend mit natur- oder ingenieurwissenschaftlicher Ausbildung, erarbeiten das jährliche Forschungsvolumen von mehr als zwei Milliarden Euro. Davon fallen rund 1,7 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 entwickeln können, die erst in fünf oder zehn Jahren für Wirtschaft und Gesellschaft aktuell werden.

Internationale Kooperationen mit exzellenten Forschungspartnern und innovativen Unternehmen weltweit sorgen für einen direkten Zugang 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



2

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 aufgrund der praxisnahen Ausbildung und Erfahrung an Fraunhofer-Instituten hervorragende Einstiegs- und Entwicklungschancen in Unternehmen.

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

Fraunhofer SCAI ist in folgenden Fraunhofer-Verbänden und Allianzen aktiv:

Fraunhofer-Verbund IUK-Technologie
www.iuk.fraunhofer.de

Fraunhofer-Allianz Cloud Computing
www.cloud.fraunhofer.de

Fraunhofer-Allianz Big Data
www.bigdata.fraunhofer.de

Fraunhofer-Allianz Numerische Simulation
www.nusim.fraunhofer.de

- 1 Das »Fraunhofer-Haus« in München.
- 2 Joseph von Fraunhofer (1787 bis 1826)



1

Institut für Numerische Simulation (INS) an der Universität Bonn

Das INS ist ein mathematisches Forschungsinstitut an der Universität Bonn mit den Schwerpunkten Wissenschaftliches Rechnen sowie Numerische Analysis und Numerische Simulation. Das Institut 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.

Ein Teil der SCAI-Abteilung *Virtual Material Design* ist seit Juni 2010 unter der Leitung von Dr. Jan Hamaekers am INS angesiedelt. Prof. Dr. Jochen Garcke, Abteilung *Numerische Datenbasierte Vorhersage*, und Prof. Dr. Marc Alexander Schweitzer, Abteilung *Meshfree Multiscale Methods*, leiten jeweils auch eine Arbeitsgruppe am INS. www.ins.uni-bonn.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* von Fraunhofer SCAI beteiligt sich in dieser Kooperation am internationalen Master-Studiengang »Life Science Informatics«. www.b-it-center.de

Goethe-Universität Frankfurt am Main

Prof. Dr. Thomas Gerstner, Leiter der Arbeitsgruppe *Computational Finance*, ist gleichzeitig Professor für Computational Finance am Institut für Mathematik der Universität Frankfurt.

Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, Sankt Augustin

Die Kooperation mit der Hochschule Bonn-Rhein-Sieg hat sich stetig weiter entwickelt. Die Verbindung mit dem Fachbereich Maschinenbau und Elektrotechnik und mit der Informatik wird über ein gemeinsames Forschungsseminar zum Thema »Numerische Simulation« sowie über die Einbindung von Master- und Bachelor-Studierenden in die Projektarbeit von SCAI gepflegt.

- 1 Das Hauptgebäude der Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

SCAILIGHTS 2016/2017



Victoria Appelbe und Dr. Richard Trethewey verstärken das Kuratorium von Fraunhofer SCAI

In der personellen Zusammensetzung des Kuratoriums von Fraunhofer SCAI sind mehrere Änderungen zu verzeichnen. Dr. Thomas Lorentz (BASF) ist am 30. Juni 2016 aus dem Kuratorium ausgeschieden.

Im Jahr 2017 ist das Kuratorium um zwei neue Mitglieder gewachsen:

- Victoria Appelbe, Leiterin des Amtes für Wirtschaftsförderung der Stadt Bonn
- Dr. Richard Trethewey, Vice President, Digitalization in Research and Development bei BASF in Ludwigshafen am Rhein.

Auf der Kuratoriumssitzung am 8. Juni 2017 überreichte Prof. Dr. Michael Griebel, Institutsleiter von Fraunhofer SCAI, die Ernennungsurkunde zum Kurator des Instituts an Dr. Richard Trethewey und hieß ihn im Kreis der Kuratoren herzlich willkommen.

Victoria Appelbe, die auf der Kuratoriumssitzung verhindert war, besuchte SCAI am 17. Juli 2017. Hier informierte sie sich ausführlich über die wissenschaftliche Arbeit und die Ziele des Instituts. Bei der Übergabe der Ernennungsurkunde an Frau Appelbe freute sich Prof. Griebel besonders darüber, dass erstmals eine Frau als Kuratorin für SCAI gewonnen werden konnte.

Das Institut trauert um Prof. Dr. Dr. h.c. Norbert Szyperski, der am 17. Mai 2016 im Alter von 84 Jahren verstorben ist. Von 2005 bis 2012 war er der Vorsitzende des Kuratoriums. Als Mitglied und langjähriger Vorsitzender in diesem Gremium war Szyperski ein hoch geschätzter Berater der Institutsleitung. Mit seiner hohen wissenschaftlichen Kompetenz und seiner Expertise auf dem Gebiet der Unternehmensgründungen engagierte er sich insbesondere auch bei der Gründung des Spin-offs scapos AG, der Software-Vertriebsfirma von SCAI.



Roboterarm faszinierte Besucher auf der Messe ISC High Performance in Frankfurt

Gleich mehrere Abteilungen von Fraunhofer SCAI präsentierten vom 19. bis 21. Juni 2017 die Ergebnisse ihrer Forschungsarbeiten auf der Messe ISC High Performance 2017 in Frankfurt/Main. Die Besucher zeigten großes Interesse an den Arbeiten zum Maschinellen Lernen (ML) und an dem Ansatz, Domänenwissen in Anwendungen des ML zu integrieren. Beispiele reichen von der intelligenten Kontrolle und Steuerung von Energienetzen bis zur Entwicklung neuer Materialien. Besuchermagnet war ein Roboterarm, der auf die Nähe von Menschen reagierte. Aktuelle Entwicklungen von SCAI zielen auf eine Verbesserung der Personensicherheit kollaborierender Roboter mit Hilfe hochpräziser Radarsysteme.



Turbo für riesige Gleichungssysteme entwickelte sich zum Welterfolg

Der Mathematiker Dr. Klaus Stüben wurde am 19. Mai 2016 für seine wissenschaftlichen Verdienste um die Entwicklung der algebraischen Mehrgittermethodik (AMG) mit dem Fraunhofer-Taler geehrt. Prof. Dr. Georg Rosenfeld, Fraunhofer-Vorstand für Technologiemarketing und Geschäftsmodelle, überreichte die Auszeichnung im Rahmen der Sitzung des Kuratoriums von SCAI. Klaus Stüben erkannte Anfang der 1980er Jahre als einer der ersten Wissenschaftler das Potenzial und die Bedeutung von AMG für die Lösung großer Gleichungssysteme. Stüben gelang es, eine Brücke zwischen der akademischen und der industriellen Welt zu bauen und AMG für eine große Breite von Problemen nutzbar zu machen. Das unter seiner Leitung entwickelte Software-Produkt SAMG wird weltweit vermarktet.



Springer-Verlag veröffentlicht Buch über aktuelle Projekte und Produkte von Fraunhofer SCAI

Im Herbst 2017 erscheint das Buch »Scientific Computing and Algorithms in Industrial Simulations – Projects and Products of Fraunhofer SCAI« im Springer-Verlag. Das Buch umfasst rund 370 Seiten und ist in die drei Kapitel »Methoden«, »Produkte« sowie »Anwendungen und Show Cases« gegliedert. Diese Strukturierung entspricht der SCAI-spezifischen Vorgehensweise, neue mathematische Algorithmen in Software-Produkte zu gießen. Das Kapitel »Methoden« zeigt anhand ausgewählter Beispiele die Bandbreite methodischer Forschung am Institut. Das Kapitel »Produkte« erläutert die Eigenschaften und Alleinstellungsmerkmale ausgewählter Software-Produkte. Das dritte Kapitel beschreibt in einer Reihe von Beiträgen die Ergebnisse zentraler Projekte im Detail.





Girls' Day 2017: Mädchen steuern Autos auf einer Carrera-Bahn mittels künstlicher Intelligenz

Mädchen-Power auf dem Fraunhofer-Campus Schloss Birlinghoven: Am 27. April 2017 tauchten 100 Schülerinnen der fünften bis zehnten Klasse in die Wissenschaft ein. In ein- bis dreistündigen Workshops nutzten sie künstliche Intelligenz, um Autos auf einer Carrera-Bahn automatisch vom Computer steuern zu lassen, setzten Daten-Analyse-Verfahren für die Produktentwicklung in der Automobilindustrie ein oder erfuhren, was es mit Kryptographie auf sich hat: Die jungen Damen lernten, was das »geheime Schreiben« mit dem Internet zu tun hat, was ein Geheimschlüssel ist und wie er verwendet wird. Insgesamt boten die drei Institute auf dem Campus 13 Workshops an.

Neue Vortragsreihe »SCAI-Café« hat sich erfolgreich am Institut etabliert

Die neue interne Vortragsreihe »SCAI-Café« möchte mehr Kommunikation über Abteilungsgrenzen hinweg initiieren. Am 4. Juli 2016 fand der erste Vortrag in dieser monatlichen Reihe statt. Klaus Wolf sprach über »Materialmodelle in CAE-Prozessketten«. Themen in den folgenden Monaten waren »Projekt IDSN: Demenz früher erkennen« (Dr. Juliane Fluck), »Globally Convergent Methods for Gas Transport Networks« (Dr. Igor Nikitin), »CarReCo-Racer – Kamera-basierte autonom fahrende Carrerabahn durch HPC und Embedded Architekturen« (Eric Schrickler) und »Der neue PackAssistant« (Dr. Sabine Bauer). Alle Vorträge führten zu spannenden Diskussionen.



Intensives Werben um den wissenschaftlichen Nachwuchs

Wissenschaftlichen Nachwuchs für eine Karriere am Fraunhofer SCAI zu begeistern, gewinnt immer mehr an Bedeutung. Das Institut beteiligt sich daher an mehreren Aktivitäten: Auf dem Absolventenkongress in Köln, einer der größten Jobmessen Deutschlands, präsentierte sich SCAI am 24. und 25. November 2016 mit einem Stand. In der 9. SCAI-Sommerschule vom 17. bis 28. Juli 2017 beschäftigten sich zwölf Schülerinnen und Schüler zwei Wochen lang mit Methoden und Arbeitsweisen des Wissenschaftlichen Rechnens. Ähnliche Inhalte bot die »Fraunhofer Talent School« vom 18. bis 21. Oktober 2016. Ziel der Talent School ist es, besonders begabte Jugendliche für die Wissenschaft zu begeistern und Nachwuchstalente zu fördern.

3D-Packungslösungen begeistern Besucherinnen und Besucher auf der Bonner Wissenschaftsnacht

»WasserWelten« lautete das Motto der Bonner Wissenschaftsnacht am 2. und 3. Juni 2016 im Wissenschaftszelt auf dem Münsterplatz. Auf den ersten Blick ein Thema, das wenig mit Fragen aus der diskreten Optimierung zu tun hat. Die Besucherinnen und Besucher der Veranstaltung konnten sich jedoch darüber informieren, dass platzsparendes Packen sehr wohl einen Beitrag zum Schutz der Meere leisten kann. Optimierte 3D-Verpackungsplanung sorgt für bestmögliche Ausnutzung von Containern und Transportbehältern und sichert somit die optimale Auslastung von Schiffen. Dies verringert die Verkehrsdichte auf Seewegen, senkt Transportkosten und reduziert die Menge der das Meer und die Atmosphäre belastenden Schadstoffe.



Ada-Lovelace-Preis 2016 für herausragende Bachelorarbeit

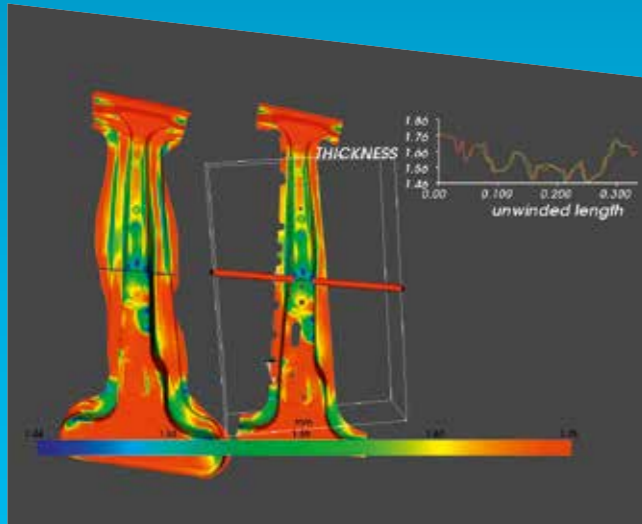
Sara Hahner, Studentin in der Abteilung *Numerische Datenbasierte Vorhersage*, hat für ihre Bachelorarbeit den Ada-Lovelace-Preis erhalten. Der mit 500 Euro dotierte Preis des Instituts für Numerische Simulation (INS) der Universität Bonn wird jährlich an Mathematikerinnen verliehen. Hahners Arbeit mit dem Titel »Untersuchung einer inversen Abbildung zu nichtlinearen Dimensionsreduktionen mit Anwendung auf Simulationsdaten« beschäftigt sich mit Methoden des maschinellen Lernens zur Analyse von Daten aus der numerischen Simulation von Fahrzeug-Crashes. Die vom INS initiierte Auszeichnung dient der Nachwuchsförderung von Frauen. Namenspatronin ist die britische Mathematikerin und Computerpionierin Ada Lovelace (1815 bis 1852).

SCAI-Forscher erhielt 5000 Euro Preisgeld für ausgezeichnete Dissertation

Dr. rer. nat. Jan Kleinert, wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Abteilung Simulationsanwendungen, hat den Dissertationspreis des Fraunhofer-Verbands Informations- und Kommunikationstechnologie erhalten. Seine Doktorarbeit mit dem Thema »Simulating Granular Material using Nonsmooth Time-Stepping and a Matrix-Free Interior Point Method« belegte den ersten Platz und wurde mit einem Preisgeld von 5000 Euro ausgezeichnet. Die Preisverleihung fand anlässlich der Jahrestagung der Gesellschaft für Informatik im September 2016 in Klagenfurt, Österreich, statt. Kleinert wurde an der TU Kaiserslautern promoviert. Seine Arbeit entstand am Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM, ebenfalls in Kaiserslautern.



AUSGEWÄHLTE PROJEKTE



Virtuelle Prozesskette Umform-Crash am Beispiel einer B-Säule.

VMAP entwickelt fehlende Software-Standards in Workflows des virtuellen Engineerings

Im August 2017 startete das Projekt VMAP, (A New Interface Standard for Integrated Virtual Material Modelling in Manufacturing Industry). In VMAP geht es darum, bisher fehlende Software-Standards in Workflows des virtuellen Engineerings in der herstellenden Industrie zu entwickeln. Aktuell erfordern inkompatible Schnittstellen für den Transfer virtueller Materialinformationen umfangreiche komplexe manuelle Anpassungen. Dies führt zu Informationsverlusten und Zeitverzögerungen im gesamten Design-Prozess. Ziel von VMAP ist es daher, einheitliche und universelle Schnittstellenansätze für Prozessabläufe im Virtual Engineering zu definieren. VMAP hat ein Budget von 16,2 Millionen Euro. Das Konsortium besteht aus Partnern in Belgien, in Kanada, in Deutschland, in den Niederlanden, in Österreich und in der Schweiz. Das Projekt leitet Klaus Wolf (Geschäftsfeld *Multiphysics*). Der deutsche Teil des Verbundprojekts wird durch das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) über das Cluster ITEA 3 der europäischen Forschungsinitiative EUREKA gefördert.

MathEnergy – Mathematische Schlüsseltechnologien für Energienetze im Wandel

Für eine nachhaltige und CO₂-neutrale Energieversorgung muss der gesamte Energiekreislauf in Strom-, Gas- und Wärmenetzen betrachtet werden. Um die Energiewirtschaft für die neuen Monitoring- und Regelungsaufgaben sowie den Daten- und Modellaustausch zu rüsten, werden im Projekt MathEnergy netzübergreifende zeitabhängige Modelle entwickelt. Hinzu kommen modellbasierte Monitoring-, Regelungs- und Bewertungskonzepte sowie Software-Werkzeuge zur Simulation und Analyse von Szenarien der Energieversorgung. Projektleiterin ist Dr. Tanja Clees (Geschäftsfeld *High Performance Analytics*). Das Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) fördert das Projekt mit sechs Millionen Euro.

Datenanalyse optimiert cyber-physische Systeme in Telekommunikation und Gebäudeautomation

Im Projekt Flex4Apps geht es darum, mittels Datenanalyse die Prozesse in cyber-physischen Systemen (CPS) besser zu verstehen, die Systeme fehlertoleranter und verlässlicher zu gestalten und neue Dienstleistungen zu ermöglichen. CPS bestehen aus softwaretechnischen Komponenten, elektronischen Elementen und Sensoren, die oft über das Internet miteinander kommunizieren. Beispiele sind Telekommunikation oder Gebäudeautomation. Koordiniert wird das Projekt von Prof. Dr. Jochen Garcke (Geschäftsfeld *Numerische Datenbasierte Vorhersage*). Das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) fördert den deutschen Teil des Projekts über das Cluster ITEA 3 der europäischen Forschungsinitiative EUREKA mit 2,7 Millionen Euro.

ES-FLEX-Infra untersucht neue Ansätze einer flexiblen Energieversorgung

Das Projekt ES-FLEX-Infra soll Energieversorger in die Lage versetzen, Lastverlagerungen und die Integration von Speichern in der städtischen Infrastruktur zu analysieren, zu bewerten und letztlich betreiben zu können. Konkret untersucht wird dazu die Verwertung bisher ungenutzter Wärme (Abwärme, Flüsse) mit Wärmepumpen und Wärmespeichern, die Verwendung von Überschussstrom in der Elektromobilität sowie für die Erzeugung von Methan (Power-to-Gas) und gleichzeitig die Nutzung des hohen Prozesswärmeanteils durch Kraft-Wärme-Kopplung. Das Projekt ES-FLEX-Infra wird aus Mitteln des Europäischen Fonds für regionale Entwicklung gefördert. Projektleiterin ist Dr. Tanja Clees (Geschäftsfeld *High Performance Analytics*).

Projekt PHAGO: Neuer Ansatz zur Hilfe für Patienten mit Alzheimer

Erst seit Kurzem ist bekannt, dass die angeborenen Immunrezeptor-Gene TREM2 und CD33/SGLEC3 eine Rolle bei der Alzheimer-Erkrankung spielen. Die Bedeutung der identifizierten Gene und des zellulären Mechanismus ist jedoch nicht ausreichend erforscht. Das Projekt PHAGO soll diese Wissenslücke schließen und neue Tools und Testverfahren entwickeln, die an diesen Immunrezeptoren ansetzen. Sie sollen den Weg bereiten zur Entwicklung von Medikamenten, die den Verlauf der Krankheit hemmen. Damit werden neue Therapien für Alzheimer-Patienten möglich. Das von der europäischen Innovative Medicines Initiative (IMI) geförderte Projekt PHAGO hat ein Gesamtbudget von knapp 18 Millionen Euro. Den SCAI-Anteil von PHAGO leitet Prof. Dr. Martin Hofmann-Apitius (Geschäftsfeld *Bioinformatik*).



Roboterarm im Labor bei Fraunhofer SCAI

RoKoRa – Sichere Mensch-Roboter-Kollaboration mit Hilfe hochauflösender Radare

Im Projekt RoKoRa geht es darum, Gefährdungen von Menschen durch Roboter auszuschließen. Dazu kommen kompakte Radarsysteme zum Einsatz. Diese bieten viele Vorteile: Radarsysteme arbeiten unabhängig von jeder Beleuchtung und sind weitgehend unempfindlich gegenüber Umweltbedingungen. Zudem können Radarsensoren nicht nur den Abstand zum Sensor, sondern auch den Bewegungsvektor der detektierten Ziele messen. Das zu entwickelnde Sensorsystem verbessert die Personensicherheit bei der Mensch-Roboter-Kollaboration entscheidend, so dass neue Freiheitsgrade in der sicheren Zusammenarbeit mit größeren Robotern und bei höheren abstandsabhängigen Ausführungsgeschwindigkeiten entstehen. SCAI entwickelt eine Software-Komponente zur Umgebungswahrnehmung für die Situationsanalyse und Entscheidungsfindung unter Verwendung von Verfahren des maschinellen Lernens. Das vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) geförderte Projekt hat ein Budget von 2,7 Millionen Euro. Dr. Thomas Soddemann (Geschäftsfeld *High Performance Computing*) leitet den SCAI-Teil des Verbundvorhabens.

AUSGEWÄHLTE PRODUKTE

	Optimierte 3D-Verpackungsplanung	<i>PackAssistant</i> ist die führende Software zur optimierten Verpackung baugleicher Bauteile in Containern. <i>PackAssistant</i> reduziert Kosten und bietet Verpackungsplanern eine schnelle, intuitive Lösung. www.packassistant.de
	Optimierte automatische Anordnung von Schnittbildern	<i>AutoNester</i> optimiert die automatische Anordnung von Schnittbildern für Textilien, Leder, Metalle, Holz, Kunststoffe oder Verbundwerkstoffe, etwa bei der Herstellung von Bekleidung, Möbeln, Automobilen, Maschinen, Flugzeugen oder Schiffen. Die Software verschachtelt die Schnittbilder optimal und minimiert so den Verschnitt. www.scai.fraunhofer.de/autonester
	Reduzierung von Materialverschnitt in der Holz-, Glas-, Metall- und Kunststoffindustrie	<i>AutoPanelSizer</i> erstellt in kurzer Zeit hocheffiziente Schnittpläne. Durch eine genauere Modellierung sowie durch bessere Optimierungsalgorithmen konnte mit <i>AutoPanelSizer</i> bei ersten Kunden gegenüber der bisher verwendeten Optimierungssoftware der Materialverschnitt um etwa 14 Prozentpunkte reduziert werden. www.scai.fraunhofer.de/autopanelSizer
	Optimierte Schnittpläne für den Zuschnitt von Stahlprofilen	<i>AutoBarSizer</i> ermittelt optimierte Schnittpläne für den Zuschnitt von Stahlprofilen und anderem Stangenmaterial (Langgut) in kürzere Teile (Fixmaße). Die generierten Lösungen zeichnen sich durch einen hohen Materialnutzungsgrad (Ausnutzung, Ausbeute) aus, Schnittverluste werden minimiert. www.scai.fraunhofer.de/autobarsizer
	Automatische Produktionsplanung	<i>CutPlanner</i> ist ein Software-Paket zur automatischen Produktionsplanung (Cut Order Planning) in der textilverarbeitenden Industrie, das dazu beiträgt, die aus Material- und Produktionskosten bestehenden Gesamtkosten zu minimieren. www.scai.fraunhofer.de/cutplanner
	Kopplung von Simulationsprogrammen	<i>MpCCI</i> koppelt Simulationsprogramme und löst auf diesem Weg multidisziplinäre Probleme. Die Software unterstützt die führenden industriellen Simulationswerkzeuge. Dank <i>MpCCI</i> können Unternehmen schwierige Aufgaben durch gekoppelte Simulation bewältigen. www.mpcci.de
	Berücksichtigung der Herstellung von Kfz-Bauteilen in Crash-Simulationen	Der <i>MpCCI Mapper</i> verknüpft die Simulation des Herstellungsprozesses von Kfz-Bauteilen (Umformung, lokale Wärmebehandlung, Fugen) mit der Crash-Simulation und erhöht so die Aussagekraft von Crash-Berechnungen. www.mpcci.de/mapper
	Dateninterpolation zwischen CFD- und FEM-Rechennetzen	Der <i>MpCCI FSIMapper</i> übernimmt die Aufgabe der Dateninterpolation zwischen CFD- und FEM-Rechennetzen, auch für unterschiedliche Netzfeinheit und -ordnung. www.mpcci.de/fsimapper

	Algebraische Mehrgitterverfahren	<i>SAMG</i> ist ein Software-Paket zur hocheffizienten Lösung großer dünnbesetzter Gleichungssysteme mit algebraischen Mehrgittermethoden. Eingesetzt wird es in der Strömungs- und Strukturmechanik, der Simulation von Ölreservoir- und Grundwasservorkommen sowie von Prozessen und elektronischen Bauelementen. www.scai.fraunhofer.de/samg
	Analyse und Optimierung parameterabhängiger Aufgaben	<i>DesParO</i> ist eine Software-Toolbox zur interaktiven Exploration und automatisierten Analyse und Optimierung parametrisierter Anwendungen. Sie kann dabei sowohl für Simulationsanwendungen als auch für physikalische Experimente genutzt werden. www.scai.fraunhofer.de/desparo
	Multiphysikalischer Netzwerksimulator	<i>MYNTS</i> ist ein multiphysikalischer Netzwerksimulator, der für elektrische Schaltungen sowie für Gas-, Wasser- und Energienetze eingesetzt werden kann. www.scai.fraunhofer.de/mynts
	Identifikation von Gen- und Proteinnamen	Die Software <i>ProMiner</i> identifiziert Namen von Genen und Proteinen, Krankheiten und Medikamenten in wissenschaftlichen Texten. Die Identifikation basiert auf automatisch erzeugten Wörterbüchern, die insbesondere Mehrdeutigkeiten ausschließen. www.scai.fraunhofer.de/prominer
	Knowledge-Discovery für die Life Sciences	<i>SCAIVIEW</i> ist eine Knowledge-Discovery-Software für die Life Sciences. Sie erlaubt das schnelle Auffinden aggregierter Informationen aus großen Textmengen. Dazu integriert <i>SCAIVIEW</i> die Information von <i>ProMiner</i> und erlaubt eine semantische Suche. www.scai.fraunhofer.de/scaiview
	Vergleich ähnlich diskretisierter Finite-Element-Modelle	<i>ModelCompare</i> ist ein Plug-In für Pre- und Postprocessing-Werkzeuge der Finite-Element-Methode (FEM). <i>ModelCompare</i> vergleicht zwei ähnlich diskretisierte FE-Modelle und identifiziert ihre Unterschiede in Geometrie (Mesh), Material und Dicke. www.scai.fraunhofer.de/modelcompare
	Numerische Simulation in der Moleküldynamik	<i>Tremolo-X</i> ist ein Software-Paket für Moleküldynamiksimulationen. <i>Tremolo-X</i> kommt in der Nanotechnologie, den Materialwissenschaften, der Biochemie und der Biophysik zum Einsatz. www.tremolo-x.com



Die SCAI-Firmenausgründung *scapos AG* (www.scapos.com) vertreibt die Software-Produkte des Instituts.



ML UND HPC ERÖFFNEN NEUE MÖGLICHKEITEN

Maschinelles Lernen (ML) ist ein Paradigma in Wissenschaft und Technik, bei dem Daten die treibende Kraft bilden. Im ML lernt ein System mit Hilfe von Lerndaten und wendet seine erworbenen Kenntnisse auf neue Daten an. ML ist ein aktuelles Thema, weil die Rechnerleistungen erst heute ausreichen, um die erforderlichen großen Datenmengen und komplexen Berechnungen hinreichend schnell zu bearbeiten. ML und seine Anwendungen benötigen Technologien des High Performance Computing (HPC). Fraunhofer SCAI entwickelt neuartige ML-Methoden und setzt sie in die industrielle Praxis um.

Die in unterschiedlichen Anwendungsbereichen seit Jahren stetig wachsenden Datenmengen generieren neue Herausforderungen für einen effizienten Umgang mit Daten. Sie ermöglichen aber auch neuartige Analyseansätze, um aus umfangreichen Datenbeständen neue Erkenntnisse zu gewinnen. Unter dem Schlagwort »Big Data« wurden in den letzten Jahren Methoden entwickelt, um mit großen Datenmengen umzugehen, wobei die Analyseansätze oft noch recht einfach sind.

Mehr Zuverlässigkeit bei prädiktiven Analysen

Die Arbeiten von SCAI konzentrieren sich auf die Entwicklung effizienter algorithmischer Methoden sowie auf die Entwicklung von Gray-Box-Verfahren. Bei diesen Verfahren werden Daten nicht nur aus Messungen oder Sensoren gewonnen, sondern mit Ergebnissen aus physikalischer Modellierung oder numerischer Simulation und allgemeinem Anwendungswissen kombiniert und angereichert. Indem man die maschinellen Lernansätze

KONTAKT

Prof. Dr. Jochen Garcke
Telefon +49 2241 14-2286
jochen.garcke@
scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/ml

BILD

In der modernen Produktion fallen große Datenmengen an, die analysiert werden sollen.

um Domänenwissen erweitert, beispielsweise über die physikalischen und technischen Prozesse, die durch die Daten beschrieben werden, eröffnet der Gray-Box-Ansatz neue Perspektiven, um Wissen automatisch zu generieren und zu nutzen. Insbesondere in den Ingenieur- und Naturwissenschaften bietet dieser Ansatz mehr Zuverlässigkeit bei prädiktiven Analysen und bereichert das Potenzial der ML-Technologie. Er unterscheidet sich von einem »Black-Box-Ansatz«, der Daten mit generischen Datenanalyseverfahren behandelt, die verfügbares spezifisches Domänenwissen und entsprechende Strukturen unberücksichtigt lassen.

SCAI entwickelt entsprechende mathematische Konzepte, die es ermöglichen, erwartete physikalische Eigenschaften und Verhaltensweisen in die maschinellen Lernmethoden zu integrieren. Dadurch vereinfachen solche Gray-Box-Methoden Arbeitsprozesse und erlauben den Ingenieuren, sich in ihrer Arbeit auf die zugrunde liegenden ingenieurwissenschaftlichen Aspekte zu konzentrieren.

Dimensionsreduktion – ein Schlüssel zur effizienten Datenanalyse

Anstatt mit Standard-Algorithmen zu arbeiten, die riesige Mengen an Rechenleistung erfordern, verfolgt SCAI einen innovativen algorithmischen Ansatz. In der Datenanalyse ist bekannt, dass hochdimensionale Daten typischerweise niedrig dimensionale Strukturen bilden. Die Entdeckung und Rekonstruktion dieser Strukturen ist der Schlüssel zur effizienten Datenerforschung und -analyse. SCAI entwickelt Algorithmen, um solche niederdimensionalen Darstellungen der Daten zu entdecken und zu berechnen.

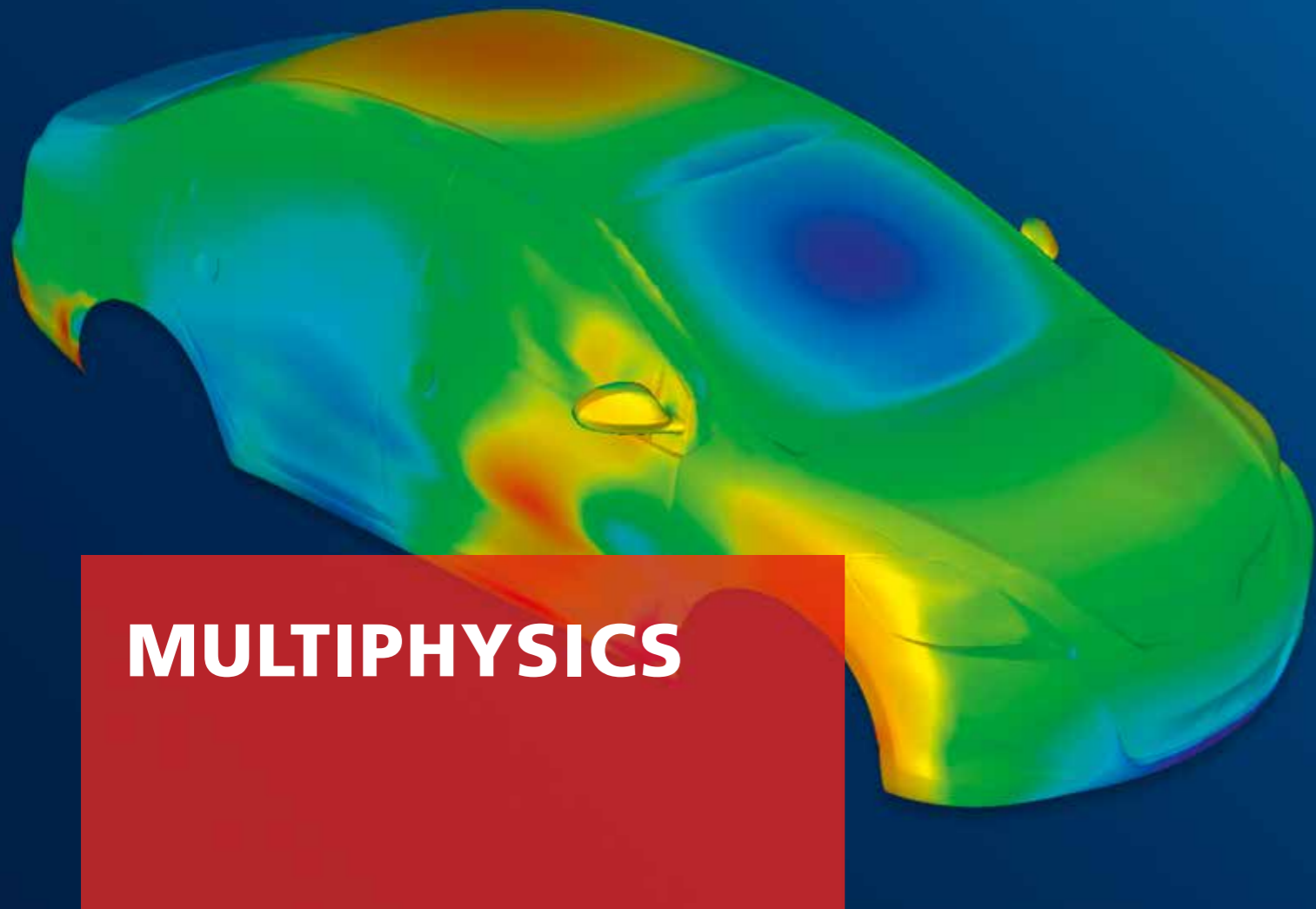
Anwendungen

SCAI nutzt ML in mehreren Anwendungsgebieten:

- Die neu entwickelten ML-Methoden können den Forschungs- und Entwicklungsprozess in der virtuellen Produktentwicklung deutlich vereinfachen und beschleunigen, da der Entwicklungsingenieur weniger Zeit für die Datenaufbereitung und -analyse benötigt und sich auf die eigentlichen ingenieurtechnischen Kernaufgaben konzentrieren kann.
- Maschinelle Lernverfahren bilden den algorithmischen Kern bei der prädiktiven Wartung technischer Systeme mit Hilfe von Sensordaten. Ein Beispiel ist die prädiktive Wartung von Windenergieanlagen auf Basis von Daten

aus Vibrationssensoren, die das Schwingungsverhalten der Rotorblätter messen. Effiziente ML-Methoden können Anomalien besser erkennen, beispielsweise um eine Eisdetektion zu ermöglichen oder um in den Daten frühzeitig Hinweise auf mögliche Schäden zu entdecken.

- In der rechnergestützten Materialentwicklung werden innovative Werkstoffe und Moleküle mit gewünschten Eigenschaften im Rechner kreiert, noch bevor sie real im Labor synthetisiert werden. Dazu müssen Modelle auf verschiedenen Größenskalen und die gesamte Prozesskette zur Herstellung und Verarbeitung des Materials berücksichtigt werden. Mit Hilfe von Gray-Box-Ansätzen lassen sich die Vorzüge physikalischer und empirischer Modelle kombinieren.
- Die rapide Zunahme hochdimensionaler Daten im Bereich der Biomedizin (Molekularbiologie, Gen- und Genomforschung, klinische Forschung) bringt ganz neue Herausforderungen an die intelligente Datenanalyse und -interpretation mit sich. Bei SCAI kommen Verfahren der Statistik und des Maschinellen Lernens zum Einsatz, um signifikante Muster und Zusammenhänge zwischen Variablen in den Daten zu erkennen und weiteren Analysen zuzuführen.
- Fraunhofer SCAI entwickelt gemeinsam mit seinen Partnern smarte Robotersysteme. Diese werden in der Lage sein, ihre Umgebung mit Hilfe verschiedener Sensorsysteme zu erkennen und auf diese Weise mit Menschen interagieren können, ohne eine Gefährdung darzustellen. In der Steuerungssoftware der Roboter kommen von SCAI entwickelte Module aus dem Maschinellen Lernen zum Einsatz.
- Maschinelle Lernverfahren kommen auch in Arbeiten zum datengetriebenen Energiemanagement zum Einsatz. Im SCAI-Geschäftsfeld *High Performance Analytics* werden modellbasierte Monitoring-, Regelungs- und Bewertungskonzepte sowie eine Software-Bibliothek zur integrierten Simulation und Analyse netzübergreifender Szenarien der Energieversorgung mit Strom und Gas entwickelt.



MULTIPHYSICS

Das Geschäftsfeld *Multiphysics* entwickelt Methoden, Software und Produkte für Aufgaben, bei denen Effekte aus mehreren physikalischen Disziplinen berücksichtigt werden müssen.

Kern der Entwicklungen im Geschäftsfeld *Multiphysics* ist die Entwicklung der Kopplungs-umgebung MpCCI Coupling Environment. Sie bietet eine herstellerunabhängige Lösung zur Simulationskopplung und zur dateibasierten Datenübertragung. MpCCI unterstützt eine große Anzahl kommerzieller Codes und Forschungscodes aus unterschiedlichen Anwendungsdisziplinen.

Das Geschäftsfeld *Multiphysics* betreibt Forschung, Software-Entwicklung und Anwendungsmodellierung auf mehreren Ebenen:

- Ausbau und Verbesserung der MpCCI-Schnittstellensoftware und der internen Algorithmen
- Entwicklung von Anwendungslösungen
- Engineering-Dienstleistungen und Beteiligung an Forschungs- und Entwicklungsprojekten zu neuen Themenfeldern im Multiphysics-Bereich

MpCCI CouplingEnvironment hat eine offene Schnittstelle zu Anwendungsprogrammen (API), die genutzt werden kann, um interne oder neue kommerzielle Codes anzukoppeln.

Anwendungen von MpCCI

Multidisziplinäre Probleme tauchen in vielen Anwendungsfeldern auf. Nachfolgend sind einige Beispiele genannt, in denen MpCCI zum Einsatz kommt:

ABTEILUNG SIMULATIONS-ANWENDUNGEN

ABTEILUNGSLEITER

Dr. Johannes Linden
 Telefon +49 2241 14-2910
 johannes.linden@scai.fraunhofer.de

LEITER DES

GESCHÄFTSFELDES

Dipl.-Informatiker
 Klaus Wolf
 Telefon +49 2241 14-2557
 klaus.wolf@scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/mp

BILD

Strömungsinduzierte Lasten auf einer Fahrzeugkarosserie

- Aeroelastik und Maschinenbau (Aerodynamik bei Rennfahrzeugen, aeroelastische Effekte in der Luftfahrt)
- Anwendungen bei Turbomaschinen (Einfluss der Turbinenschaufeldeformation auf die Strömung)
- Fahrzeug- und Maschinendynamik (Extremlasten auf Einzelkomponenten, Einfluss externer Strömungen auf die Fahrzeugdynamik)
- Thermisches Management im Automobilbau (Kombination von numerischer Strömungsmechanik mit effizienten Strahlungsmodellen, Gesamtfahrzeugmodelle)
- Elektrische Anlagen (elektrischer Lichtbogen in Schaltern, dynamische Lasten und Vibrationen in Elektromotoren)
- Prozessketten für die passive Sicherheit (Crash-Verhalten und Lebensdauervorhersage durch integrierte Prozessketten im Computer-Aided Engineering, Abgleich von Simulation und Experiment)
- Numerische Simulation in den Lebenswissenschaften (Entwicklung eines Systems zur Aerosolmessung, Mikrofluidik)

Weitere Beispiele für Multiphysics-Anwendungen sind die thermische Spannungsanalyse in Fahrzeugen, Motoren oder Turbinen (Einfluss heißer Strömungen auf Strukturbauteile), das dynamische Verhalten flexibler Bauteile unter Strömungsbelastung (Ventilklappen, Flugzeugflügel, Schläuche) oder auch die Prozessketten-Integration (Umform-Fügen-Crash) für Karosseriebauteile.

Fraunhofer SCAI kooperiert mit vielen Anbietern kommerzieller Simulationsprogramme und Entwicklern universitärer Forschungscores. Bei der ständigen Weiterentwicklung von MpCCI arbeitet Fraunhofer SCAI eng mit den weltweit führenden Software-Anbietern zusammen, darunter ANSYS Inc., CD adapco Group, Cedrat SA, Ceetron, CEI, JSOL, Mentor Graphics, MSC, NUMECA Intl., SIMPACK AG, Simulia 3DS und ThermoAnalytics Inc.

Multiphysics-Projekte

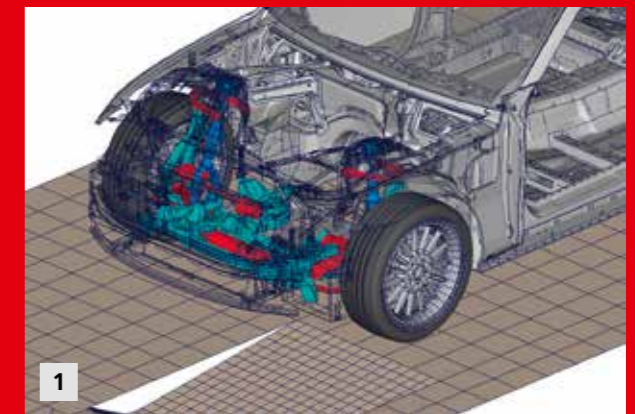
Im Geschäftsfeld *Multiphysics* werden auch Projekte zur Weiterentwicklung methodischer Grundlagen bearbeitet und kundenspezifische Sonderlösungen realisiert.

In dem von der Europäischen Kommission geförderten Projekt Fortissimo ist SCAI daran beteiligt, kleinen und mittelgroßen Unternehmen (KMUs) den Zugang zu und die Nutzung von Höchstleistungsrechnern zu erleichtern. Hier besteht bislang eine Hemmschwelle, zum einen aufgrund des Preises, der bei bis zu einigen Millionen Euro pro HPC-System liegen kann, und zum anderen, weil KMUs häufig weder

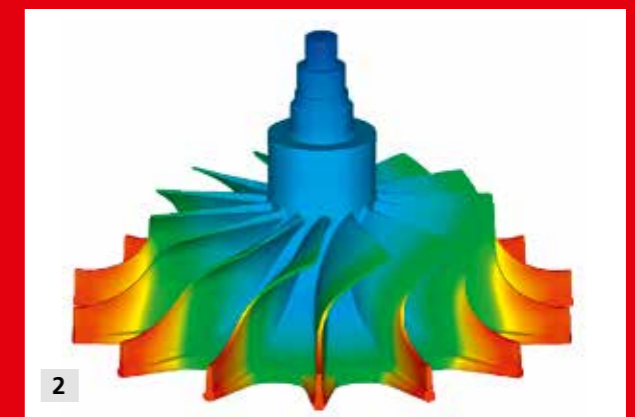
das Know-how noch die Fachleute haben, um schwierige numerische Rechenaufgaben programmieren und lösen zu können. Fraunhofer SCAI arbeitet in Fallstudien daran, KMUs den Zugang zu High-Performance-Computing-Zentren als Pay-per-Use über die Cloud zu erleichtern. Dann können auch kleinere Unternehmen Simulationen einsetzen, um Produkte zu entwickeln oder Herstellungsprozesse zu optimieren.

SCAI beteiligt sich dabei an der Entwicklung von Musterlösungen, die Firmen nutzen und individuell modifiziert einsetzen können. Der sogenannte Fortissimo-Marktplatz bietet den Unternehmen ein Komplettpaket an: den Zugang zum Rechner plus Software plus Experten, die den Unternehmen zur Seite stehen.

Beispiele für derartige Musterlösungen sind die Herstellung und Simulation leistungsfähiger Verbundstrukturen oder die Herstellung blasgeformter Behälter.



1



2

- 1 MpCCI ermöglicht die gekoppelte Simulation einer Autofahrt durch Schlaglöcher.
- 2 Berechnung der thermischen Spannungen in einem Turbinenrotor

HIGH PERFORMANCE COMPUTING

Vom Supercomputer zur intelligenten Maschinensteuerung: Im Geschäftsfeld *High Performance Computing* (HPC) entwickelt Fraunhofer SCAI Lösungen, um rechenzeitintensive Algorithmen schnell und effizient auf unterschiedlicher Hardware ausführbar zu machen. Dabei reicht die Spanne der Zielarchitekturen von eingebetteten Systemen (embedded Systems) über Multicore-PCs, Hochleistungs-Workstations mit Hardware-Beschleunigern und Grafikprozessoren bis zu traditionellen hochskalierenden Supercomputern.

Um die Eigenschaften der unterschiedlichen Rechnerarchitekturen optimal zu nutzen und gleichzeitig den Anteil der an die Hardware-Eigenschaften anzupassenden Code-Teile zu minimieren, verfolgt das Geschäftsfeld den Ansatz, fachliche Aspekte der Implementation vom Tuning relevanter Teile für eine konkrete Hardware-Architektur zu trennen. Dabei bedienen sich die SCAI-Forscher unter anderem eigener Domänensprachenansätze und Compiler-Frameworks.

Dieses Vorgehen ist für Anwendungen aus vielen Bereichen geeignet, ganz gleich, ob es um intelligente Maschinensteuerung, die Auswertung von Satellitendaten oder ein komplexes Simulationsprogramm geht. SCAI unterstützt Partner und Kunden dabei, Anwendungen aus verschiedenen Bereichen für aktuelle Hardware-Architekturen zu optimieren.

Natürlich wird gleichzeitig darauf geachtet, dass alle Software-Entwicklungen für einen nahtlosen Übergang auf zukünftige Hardware-Architekturen vorbereitet werden. Das hält nicht nur Wartungskosten gering. Vor allem erlaubt es den Entwicklern, ihre Algorithmen im Blick zu behalten.

ABTEILUNG SIMULATIONS-ANWENDUNGEN

ABTEILUNGSLEITER

Dr. Johannes Linden
Telefon +49 2241 14-2910
johannes.linden@
scai.fraunhofer.de

LEITER DES GESCHÄFTSFELDES

Dr. Thomas Soddemann
Telefon +49 2241 14-3414
thomas.soddemann@
scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/hpc

SCAI bietet eine leistungsfähige Rechnerinfrastruktur zur Ausführung von Auftragsrechnungen. Zum Angebot gehören auch HPC-Testsysteme, die Kunden zu Entwicklungszwecken nutzen können.

LAMA – ein versatiles Framework für Performanz und Wartbarkeit rechenintensiver Code-Segmente

Ein wertvolles Werkzeug bei der Hardware-übergreifenden Code-Optimierung ist das hochperformante Software-Framework LAMA. Mit der Hilfe von LAMA ist es Entwicklern auf einfache und Hardware-unabhängige Art und Weise möglich,

- schnelle und skalierende Software zu erstellen, die auf nahezu jeder Rechnerarchitektur effizient läuft,
- die Zeit für die Entwicklung neuer Software erheblich zu reduzieren,
- den Übergang auf neue Hardware-Entwicklungen weitestgehend zu automatisieren und
- die Wartung vorhandener Software wesentlich zu erleichtern.

Ein typisches Anwendungsfeld von LAMA ist die Lösung von Gleichungssystemen, wie sie beispielsweise in strömungs- und strukturmechanischen Simulationen vorkommen. Die Stärke von LAMA liegt in dem Ansatz, verteilte und hierarchische Speichermodelle nahtlos und hochperformant zu unterstützen. Die Anwendungsfelder für LAMA sind vielfältig. Die Software-Bibliothek kommt vor allem Software-Entwicklern zu Gute, die komplexe Algorithmen aus der numerischen Mathematik, der Optimierung und dem maschinellen Lernen implementieren.

MACH: Software für eingebettete Systeme und Hochleistungsrechner gleichzeitig entwickeln

Ziel im Projekt MACH war es, die Kluft zu überwinden, die zwischen der Entwicklung von Software für eingebettete Systeme und der Entwicklung von Software für Hochleistungsrechner lag. Fraunhofer SCAI hat seine Kompetenzen in das Projekt eingebracht und die erzielten Ergebnisse zur Weiterentwicklung von LAMA genutzt. Das im Oktober 2016 erfolgreich abgeschlossene Projekt wurde vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) über das Cluster ITEA der europäischen Forschungsinitiative EUREKA gefördert.

Ziel des ebenfalls vom BMBF geförderten Projekts WAVE ist die Entwicklung und Implementierung einer portablen

HPC-Toolbox zur Simulation und Inversion von Wellenfeldern (Reverse Time Migration). Diese Toolbox soll

- generische numerische Datenstrukturen und Algorithmen sowie
- Lastbalancierung

unterstützen und 3D-Finite-Differenzen-Wellenfeldsimulatoren für akustische, elastische sowie elektromagnetische Wellen auf räumlich variablen Gittern enthalten. Dabei soll die Toolbox die Eigenschaften aktueller und künftiger HPC-Architekturen – insbesondere hinsichtlich ihrer Größe, ihrer Heterogenität und ihres hierarchischen Aufbaus – berücksichtigen.



1



2

- 1 LAMA erleichtert die Entwicklung portabler Software.
- 2 Spezialschiff zur seismischen Exploration des Meeresbodens: Im Projekt WAVE werden Algorithmen für die seismische Bildgebung beschleunigt.

SCHNELLE LINEARE LÖSER

In vielen Industriezweigen werden Computersimulationen eingesetzt, um Entwicklungszeiten zu reduzieren, aufwändige Experimente zu ersetzen, Prototypen kostengünstiger zu konstruieren oder Produktionsprozesse zu optimieren. Häufig müssen dabei große Systeme linearer Gleichungen mit dünnbesetzten Matrizen gelöst werden. Diese Aufgabe benötigt meist einen großen, oft sogar den größten Anteil der Simulationszeit. Die SCAI-Bibliothek SAMG (algebraische Mehrgitterverfahren für Systeme) enthält Algorithmen zur hocheffizienten Lösung solcher Gleichungssysteme. Sie wird Kunden aus Industrie und Wissenschaft als Lizenzprodukt angeboten.

Gegenüber klassischen Verfahren (zum Beispiel vorkonditionierten konjugierten Gradienten) nutzt SAMG hierarchische Mehrgittertechniken und erreicht damit den großen Vorteil numerischer Skalierbarkeit. Das bedeutet, dass die mit SAMG erzielbare Beschleunigung gegenüber klassischen Lösungsverfahren um so größer ist, je größer die Gleichungssysteme sind. Diese Skalierbarkeit von SAMG führt in der industriellen Praxis zu deutlich kleineren Rechenzeiten und macht vielfach effiziente Simulationen überhaupt erst möglich.

SAMG wird ständig entsprechend den Anforderungen des Marktes weiter entwickelt. Die Eigenschaften neuer mit SAMG zu lösender Klassen von Gleichungssystemen werden, unabhängig von der schieren Größe, auch mathematisch immer komplizierter. Die rein numerische Forschung zur Erweiterung von SAMG ist also ein fortlaufender Prozess.

SAMG kommt in vielen Bereichen kommerziell zum Einsatz, etwa in Ölreservoir-Simulationen, Strömungsmechanik, Strukturmechanik, Gießereitechnik (Bild oben), Grundwassersimulationen

ABTEILUNGSLEITER

Prof. Dr. Marc Alexander
Schweitzer

Telefon +49 2241 14-2037
marc.alexander.schweitzer@
scai.fraunhofer.de

LEITER DES

GESCHÄFTSFELDES

Dr. Hans-Joachim Plum
Telefon +49 2241 14-2350
hans-joachim.plum
@scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de /
nuso

BILD

Aushärtung eines
Druckgusses

(hierfür wurde die spezielle Version SAMG-MODFLOW entwickelt), hydrothermale Erzanlagerungssimulation, Prozesssimulation in der Halbleiterphysik und Schaltkreissimulation.

SAMG ist in mehreren Versionen verfügbar:

- SAMG, OpenMP parallel (für Nutzer, die reinen Multicore-/Multithreading-Parallelismus benötigen)
- SAMGp, MPI/OpenMP hybrid parallel (für Rechencluster mit verteiltem Parallelismus, kombinierbar mit Multithreading)
- XSAMG (nutzt die Parallelität eines Rechenclusters durch die automatische Verteilung der Daten auf mehrere Knoten; das übergeordnete Simulationsprogramm selbst braucht gar nicht für eine parallele Cluster-Infrastruktur ausgelegt zu sein)

Dabei werden die Rechnerarchitekturen in optimaler Weise unterstützt, etwa durch den Einsatz optimierter Libraries wie der Math Kernel Library (MKL) von Intel.

Ansätze und Arbeitsweisen des Teams

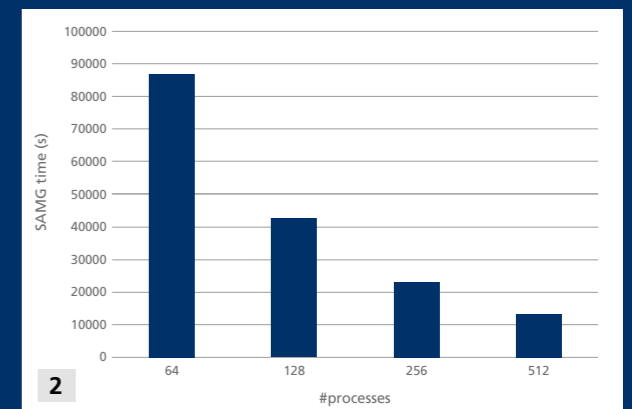
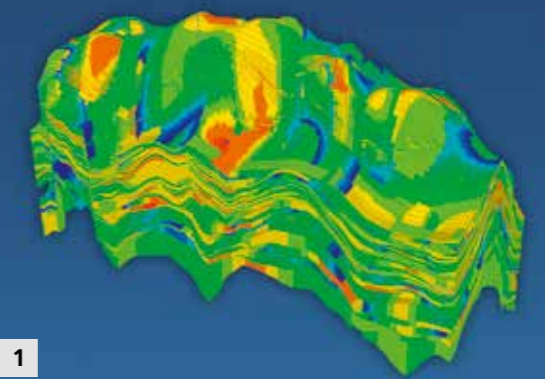
Die Schwerpunkte der Arbeit des SAMG-Teams sind neben Betreuung und Beratung von Kunden aus Industrie und Wissenschaft auch die Fortentwicklung des Produktes sowie Projekte – öffentlich oder bilateral mit aktuellen und potenziellen Kunden. Unsere Beratungsleistung ist kunden- und anwendungsspezifisch. Wir unterstützen Kunden bei der optimalen Eingliederung von SAMG in ihre Anwendung und bei der Wahl einer optimalen Parametersteuerung von SAMG, zugeschnitten auf den jeweiligen Anwendungsfall. SAMG umfasst alle bekannten Mehrgitteransätze in optimierter Form. Das Geschäftsfeld kooperiert mit weltweit führenden Experten (Marian Brezina, John Ruge, Klaus Stüben).

Entwicklungen in den Jahren 2015 und 2016

Ölreservoir-Simulationen beruhen im Kern auf Strukturen, die für die Anwendung algebraischer Mehrgitterverfahren prädestiniert sind (Bild 1). Die hohe physikalische Komplexität verhindert jedoch, dass diese Strukturen unmittelbar ausnutzbar sind. Es bedarf vielmehr eines Vorbereitungs-schrittes und einer gezielten Anpassung der AMG-Strategie, um algebraische Mehrgitterverfahren erfolgreich einsetzen zu können. Mit dem neuen Interface SAMG OIL steht nun ein Werkzeug zur Verfügung, das diese Anpassungen übernimmt. Für den Anwender wird der Lösungsprozess damit zu einer »Gray Box«, da nur grundlegende Informationen über die Physik benötigt werden.

SCAI entwickelt mit dem Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM die Simulationssoftware MESHFREE für strömungs- und kontinuumsmechanische Probleme. MESHFREE diskretisiert das Simulationsgebiet durch eine flexible Punktelwolke. Diese Art der Diskretisierung eignet sich besonders für Simulationen mit freien Oberflächen oder beweglichen Geometrien. MESHFREE verwendet SAMG zur Lösung der entstehenden linearen Gleichungssysteme.

Interessant für die Automobilindustrie ist eine Version des Software-Paketes OpenFOAM, in das SAMG integriert wurde. Ein wichtiger Aspekt ist dabei die Skalierbarkeit von SAMG im Sinne von Parallelismus: Die Kunden rechnen mittlerweile routinemäßig auf Konfigurationen bis zu 512 Prozessen (Bild 2). In Studien ist SAMG aber auch schon auf 3000 Cores erfolgreich eingesetzt worden. Eine weitere interessante SAMG-Anwendung für diese Branche ist die Berechnung der Wärmeentwicklung im Innenraum von Autos bei Sonneneinstrahlung.



- 1 Ein komplexes dreidimensionales Modell eines Ölreservoirs
- 2 SAMG im hochparallelen Einsatz: Doppelt so viele eingesetzte Prozessoren halbieren in etwa die Rechenzeit.

BIOINFORMATIK

Fraunhofer SCAI entwickelt im Geschäftsfeld *Bioinformatik* (BIO) Methoden zur Unterstützung des Informationsmanagements im Pharma-Forschungsprozess. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Extraktion relevanter Informationen aus biomedizinischer Fachliteratur («Text Mining») und der Nutzung dieser Information für die Modellierung neurodegenerativer und psychiatrischer Erkrankungen. Diese wissensbasierten Ansätze werden mit Data-Mining-Verfahren und Simulationsansätzen kombiniert, um rationale Entscheidungsprozesse in der Pharma-Forschung zu unterstützen.

Zu den Partnern und Kunden im Geschäftsfeld gehören die forschende Pharmaindustrie, Unternehmen der Biotechnologie und Software-Häuser der Life-Science-Informatik. Fraunhofer SCAI beteiligt sich auch an der Ausbildung von Studierenden des Studiengangs »Life Science Informatics« am Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT). Das Geschäftsfeld umfasst drei Problemlösungsfelder der angewandten biomedizinischen Informatik sowie spezielle Anforderungen des Cloud Computing:

Erstens: Bei der *Modellierung neurodegenerativer Erkrankungen* ist die Forschung bisher nicht modellgetrieben, sondern befindet sich weitgehend noch in der »Daten-Sammelphase«. Es mangelt nicht an Ideen, wie Alzheimer zustande kommen könnte, aber es mangelt an einem umfassenden Modell von Alzheimer, das für die Identifizierung neuer Therapieansätze genutzt werden könnte.

Zweitens: *Informations- und Wissensextraktion in den Life Sciences*: Biomedizinisches Wissen ist zum überwiegenden Teil nicht in Datenbanken, sondern nur in unstrukturiertem Text

ABTEILUNGSLEITER

Prof. Dr. Martin

Hofmann-Apitius

Telefon +49 2241 14-2802

martin.hofmann-apitius@scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/bio

(Veröffentlichungen in Zeitschriften und auf Websites) vorhanden. Aktuelle Information lässt sich aufgrund von circa 3500 neuen biomedizinischen Publikationen pro Arbeitstag nur mit Hilfe von Computern extrahieren. Unsere modularen Informationsextraktionsdienste können flexibel kombiniert und so schnell an verschiedene Anforderungen adaptiert werden.

Drittens: *Skalierende Text- und Data-Analytics-Services* dienen der automatisierten Analyse unstrukturierter Wissensquellen (etwa Journal-Publikationen, elektronische Patientenakten, Patente). Sie erfordern hohe Rechenleistungen; skalierende Systeme für die Informationsextraktion müssen jedoch für HPC-Umgebungen angepasst und optimiert werden. Fraunhofer SCAI macht komplexe Text-Mining-Workflows auf HPC- und Cloud-Umgebungen lauffähig. Die angebotenen Leistungen konzentrieren sich hierbei auf die kostengünstige Indexierung von Firmenarchiven mit dem Schwerpunkt Chemie sowie auf die Erschließung klinischer Routedaten.

Noch nicht umfassend gelöste Fragen des *Cloud Computing* betreffen die Interoperabilität (Anbieterabhängigkeit), Sicherheit, Datenschutz, Service Level Agreements und Software Lizenzmanagement in der Cloud. Fraunhofer SCAI hat Lösungsansätze für das Lizenzmanagement in der Cloud entwickelt und bietet diese Expertise Kunden und Partnern an.

Ausgewählte Forschungsprojekte

AETIONOMY, ein Flaggschiff-Projekt der europäischen Innovative Medicine Initiative (IMI), zielt darauf ab, »Mechanismus-basierte Taxonomien« für Alzheimer und Parkinson zu generieren, wobei ein Schwerpunkt auf den molekularen Ursachen liegt.

Ziel des IMI-Projekts PHAGO ist, den Prozess der »Neuro-Inflammation« besser zu verstehen. SCAI liefert in diesem Projekt die gesamte Bioinformatik-Plattform für das Daten- und Wissensmanagement sowie die fortgeschrittene Datenanalyse.

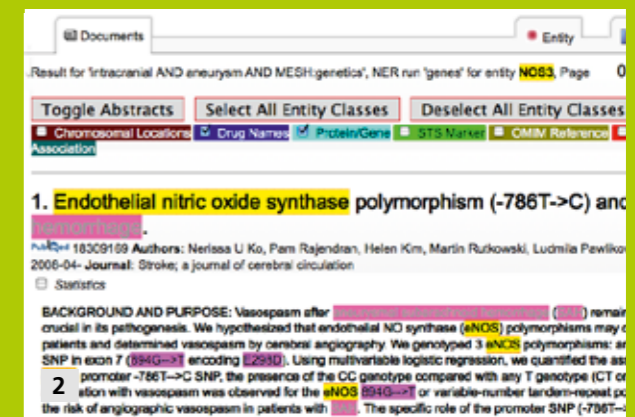
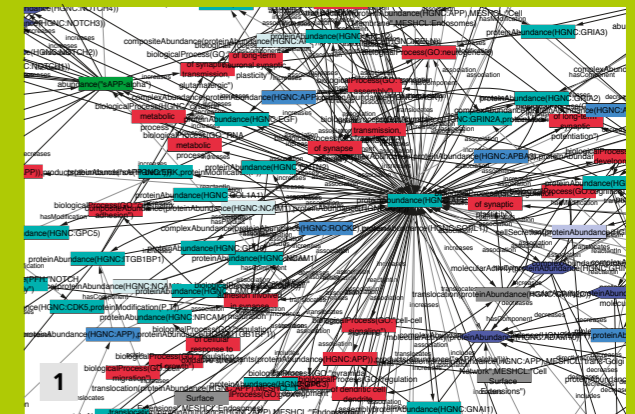
Das IMI-Projekt EPAD konzentriert sich darauf, die frühen Phasen von Alzheimer besser zu verstehen und Maßnahmen zu entwickeln, die zur Prävention von Alzheimer beitragen.

In Kooperation mit der Stiftung »Cohen Veterans BioScience« in den USA entwickelt SCAI wissensbasierte Modelle für psychiatrische Erkrankungen. Hier steht das »post-traumatische Stress-Syndrom« im Mittelpunkt, eine Erkrankung, die nicht nur bei Soldaten, sondern auch bei Flüchtlingen überproportional häufig ist.

Im Verbundprojekt IDSN, gefördert von Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) arbeitet SCAI an einer besseren Früherkennung von Demenzerkrankungen und analysiert klinische Daten und Forschungsdaten in einer Gesamtsicht. Der semantische Verknüpfungs-Service für die Datenintegration aus deutsch- und englischsprachigen Texten über neurodegenerative Erkrankungen wird öffentlichen Einrichtungen und der Pharmaindustrie angeboten.

Das europäische Projekt Fortissimo 2 zielt darauf ab, die globale Wettbewerbsfähigkeit europäischer kleiner und mittlerer Unternehmen durch die Nutzung von Simulations-Services zu verbessern, die auf einer High-Performance-Computing-Cloud-Infrastruktur laufen. BIO trägt zu Fortissimo 2 mit seiner Expertise in zwei Bereichen bei:

- hochentwickelte Methoden der Datenanalyse für große Mengen von Daten aus numerischen Simulationen und
- flexible Lizenzierungsmechanismen für Pay-per-Use-Modelle in Cloud-Umgebungen.



- 1 Halbautomatisch erzeugte biochemische Netzwerke helfen Zusammenhänge darzustellen und zu erkennen.
- 2 Informationsextraktion aus medizinischen Fachtexten mit Hilfe der SCAI-Software ProMiner



OPTIMIERUNG

Die effiziente Nutzung von Ressourcen und damit einhergehende Kosteneinsparungen sind in der industriellen Praxis von fundamentaler Bedeutung. Wenn Transport- und Lagerkapazitäten oder vorhandenes Material optimal genutzt, Produktionsanlagen effizient betrieben oder Kosten minimiert werden sollen, stellen sich immer komplexe Optimierungsaufgaben. In der industriellen Produktion, im Handel und beim Transport von Waren können Optimierungsalgorithmen erstaunliche Verbesserungen erzielen, indem sie die jeweiligen Anwendungsprobleme lösen. Dabei helfen Methoden der mathematischen Optimierung und der diskreten Simulation.

Ein Schwerpunkt im Geschäftsfeld *Optimierung* ist die Material- und Ressourceneffizienz. Hier entwickelt Fraunhofer SCAI zahlreiche Software-Produkte und bietet seinen Entwicklungspartnern und Kunden zudem maßgeschneiderte Lösungen für ihre Optimierungsprobleme in Produktion und Vertrieb. Das Angebot reicht von der Problemaufnahme beim Kunden, der mathematischen Problemformulierung und/oder Modellierung in einer Simulationsumgebung, der präzisen Berücksichtigung aller unternehmensspezifischen Randbedingungen, der Entwicklung und Bereitstellung von Algorithmen und Software bis hin zur Implementierung. Beratung und Schulung runden das Angebot ab.

Zusätzlich zu den bereits seit einigen Jahren vertriebenen Software-Produkten

- PackAssistant (zur platzsparenden Befüllung von Behältern mit baugleichen, komplexen Bauteilen),
- AutoNester (Suite zur Generierung von Schnittbildern für Leder, Stoffe, Metall, Holz, Pappe, Glas mit minimalem Verschnitt),

ABTEILUNGSLEITER

Dr. Ralf Heckmann

Telefon +49 2241 14-2810

ralf.heckmann@

scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/opt

BILD

PackAssistant, die weltweit führende Software für optimierte 3D-Packungsplanung, ist besonders beliebt bei Automobil-Zulieferern.

- AutoPanelSizer (zur Ermittlung optimierter Schnittpläne für die Produktion rechteckiger Teile aus rechteckigem Grundmaterial mit minimalem Verschnitt) und
 - CutPlanner (zur automatischen Produktionsplanung – Cut Order Planning – in der textilverarbeitenden Industrie)
- hat Fraunhofer SCAI das neue Software-Produkt AutoBarSizer entwickelt.

Die übrigen Produkte wurden weiterentwickelt und verbessert sowie teilweise grundlegend überarbeitet, um den industriellen Partnern und Nutzern weiterhin die beste Optimierungsqualität und höchste Materialeffizienz gepaart mit moderner Technologie anbieten zu können.

Neues Software-Produkt AutoBarSizer

AutoBarSizer ermittelt optimierte Schnittpläne für den Zuschnitt von Stahlprofilen und anderem Stangenmaterial (Langgut) in kürzere Teile (Fixmaße). Die generierten Lösungen zeichnen sich durch einen hohen Materialnutzungsgrad (Ausnutzung, Ausbeute) aus, Schnittverluste werden minimiert.

AutoBarSizer löst Aufgaben, die bei der Planung in Walzwerken und bei Stahlhändlern, aber ebenso in der Holzverarbeitenden Industrie sowie bei Herstellern und Verarbeitern von Leisten aller Art auftreten. Dabei dauern die Berechnungen für einen Schnittplan in üblicher Größe nur wenige Sekunden bis maximal einige Minuten.

Mit einer computergestützten Optimierung von Längenkombinationen beim Zuschnitt von Stangenware lassen sich erhebliche Mengen an Material einsparen. Dies schont Ressourcen und senkt die Produktionskosten, ohne die Produkt- und Servicequalität zu beeinträchtigen. Durch individuelle Gewichtungen von Restverwertung und Resterzeugung können mit AutoBarSizer zudem die Restlagerbestände reguliert und unnötige Lagerkosten vermieden werden.

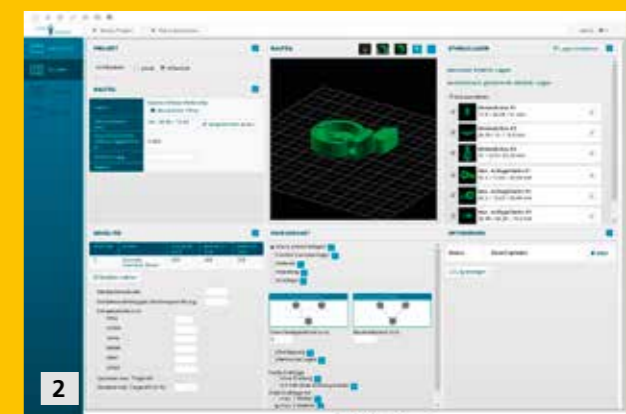
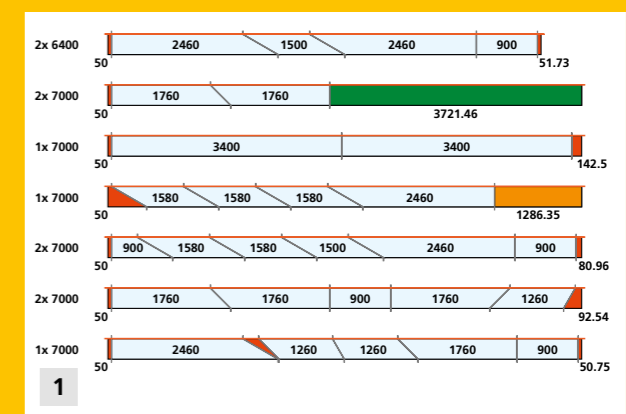
Weiterentwicklung der Software PackAssistant

Das Software-Produkt PackAssistant befindet sich bereits seit über zehn Jahren im täglichen Einsatz bei einer stetig wachsenden Zahl von Industriekunden und ist die weltweit führende Software für optimierte 3D-Packungsplanung. Seit dem ersten Release wurde die reine Desktop-Anwendung regelmäßig um neue Features erweitert. Damit das Produkt reibungslos in moderne informationstechnische Infrastrukturen seiner Nutzer integriert werden kann, wurden die zu Grunde liegende Software-Architektur und die Benutzeroberfläche

modernisiert. Unter anderem wurde dazu die Desktop-Anwendung in eine moderne Web-Applikation überführt. Die wesentlichen Vorteile einer Web-Applikation liegen in der zentralen Verwaltung aller Packungsprojekte in einer Datenbank und einem zentralen Rechenkern, zu dem sich verschiedene Clients verbinden können.

Durch den Einsatz einer Datenbank lassen sich bestehende Projekte schnell wiederfinden. Denn es kann nach sämtlichen Projektparametern einzeln oder auch gleichzeitig nach mehreren Projektparametern gefiltert werden.

Die neue Web-Benutzeroberfläche ist einfach und intuitiv benutzbar und unabhängig vom Betriebssystem. Die Bauteile und Packungsergebnisse werden dreidimensional in einer 4-Fenster-Ansicht dargestellt, wie aus CAD-Anwendungen gewohnt. Ein neues Feature der 3D-Darstellung ist die Live-Anpassung der Bounding-Box und der maximalen Auflagefläche zur einfachen manuellen Erstellung stabiler Lagen.



- 1 Ein mit AutoBarSizer berechneter Schnittplan mit Gehrungsschnitten und wiederverwendbaren Resten
- 2 Die neue Web-Benutzeroberfläche von PackAssistant bietet den Nutzern mehr Übersicht.

VIRTUAL MATERIAL DESIGN

Die Entwicklung neuer Materialien und innovativer Werkstoffe bildet eine Schlüsseltechnologie für viele Anwendungsfelder in den Bereichen Umwelt Energie, Gesundheit, Mobilität, Sicherheit und Kommunikation. Um hier neue Entwicklungen erfolgreich voranzutreiben, ist es notwendig, mathematische Methoden und natur- und ingenieurwissenschaftliche Erkenntnisse mit modernen datengetriebenen Ansätzen zusammenzubringen.

SCAI entwickelt und untersucht im Geschäftsfeld *Virtual Material Design* (VMD) innovative Werkstoffe und Materialien mit interessanten und vielversprechenden Eigenschaften, auch bevor solche Stoffe im Labor synthetisiert werden. Damit lassen sich die Anzahl der notwendigen Experimente im Labor sowie Entwicklungskosten und -zeit substantiell reduzieren.

VMD kombiniert dazu Methoden der hochdimensionalen Optimierung, des maschinellen Lernens und der Multiskalen-Simulation. Dabei wird in sogenannten Gray-Box-Ansätzen die gesamte Prozesskette einbezogen. Diese Vorgehensweise bildet auch die Grundlage zur Entwicklung sogenannter simulationsbasierter Entscheidungsunterstützungssysteme.

Leistungsangebot

SCAI bietet Partnern und Kunden Forschung, Entwicklung und individuelle Lösungen für

- Multiskalen-Modellierung und numerische Simulation in Materialwissenschaft, Chemie und Nanotechnologie,

ABTEILUNGSLEITER
Dr. Jan Hamaekers
Telefon +49 2241 14-2463
jan.hamaekers@
scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/
vmd
www.tremolo-x.de

BILD
Ein atomistisches Modell
des Tabakmosaikvirus

- numerische Algorithmen für hochdimensionale Probleme, Optimierung, maschinelles Lernen und (Big) Data Analysis,
- computergestütztes Material-, Molekular- und Prozessdesign,
- Integrated Computational Materials Engineering (ICME), Virtual Chemical Reactor,
- computergestützte Analyse und Vorhersage chemischer Reaktionen und physikalischer Prozesse sowie
- Hochleistungsrechnen in Quantenmechanik, Molekulardynamik und Kontinuumsmechanik.

Software-Produkt Tremolo-X

Um neue Materialien mit speziellen Eigenschaften zu entwerfen, ist ein tiefes Verständnis ihres Verhaltens auf der Nanoskala notwendig. Ein wichtiges Werkzeug hierfür ist das Software-Produkt Tremolo-X, das effiziente molekular-dynamische Simulationen auf massiv parallelen Rechnern ausführt. Eine spezielle Version von Tremolo-X bildet die Grundlage für das Classical Modul der Software-Umgebung Atomistix Toolkit/Virtual Nanolab des Unternehmens QuantumWise in Kopenhagen, Dänemark.

Entwicklungskosten neuer Werkstoffe reduzieren

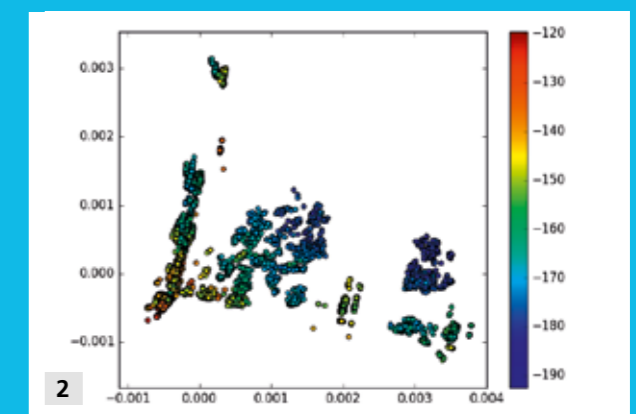
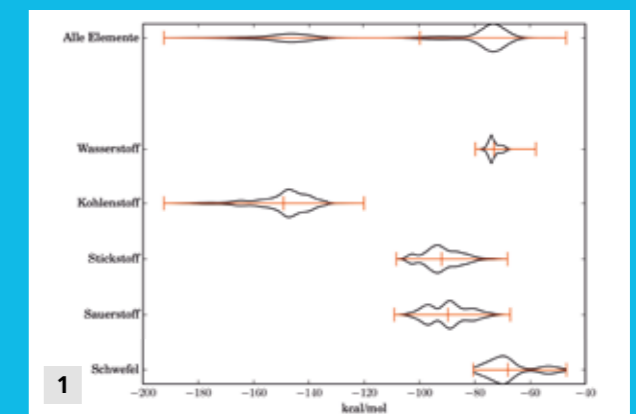
Nanotechnologische Entwicklungen erfordern eine Präzision auf atomarer Skala, die experimentell nur mit Mühe zu erreichen ist. Im Projekt MULTIMODEL fördert das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) die Entwicklung eines neuen Software-Werkzeugs, mit dem Mechanismen auf atomarer Skala unter verschiedenen Prozessbedingungen simuliert und Erkenntnisse für die Prozessoptimierung gewonnen werden können. So lassen sich die Kosten für die Entwicklung neuer Werkstoffe reduzieren.

Das von der Europäischen Kommission geförderte »Human Brain Project« (HBP) zielt darauf ab, das menschliche Gehirn besser zu verstehen. Dazu dient die Entwicklung neuer Simulationsverfahren auf Hochleistungsrechnern, die dazu beitragen, neue Therapieansätze zur Behandlung von Erkrankungen des Gehirns zu entwickeln.

Im Projekt »Skalierbare HPC-Software für Simulationen in der chemischen Industrie« (SKASIM) ging es um die Vorhersage von Eigenschaften reiner Stoffe, das Gemischverhalten fluider Phasen, die Analyse nanoskaliger Prozesse sowie um neue Methoden im Bereich fluider Phasengrenzen und Nukleation in reagierenden Systemen. SKASIM wurde vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie (BMWi) gefördert.

Elektronikkomponenten sind mittlerweile so klein, dass einzelne Atome Einfluss auf ihre Leistung und Zuverlässigkeit haben. Um diese Vorgänge zu modellieren, können parametrisierte Potentialmodelle (PM) eingesetzt werden, deren Entwicklung ein aufwändiger manueller Prozess ist. In dem vom BMBF geförderten Eurostars-Projekt ATOMMODEL hat SCAI eine neue Methode zur automatischen Generierung reaktiver PM entwickelt und in Tremolo-X integriert.

Im BMBF-Projekt »Schaltbare, intelligente Tribosysteme mit minimalen Reibverlusten und maximaler Lebensdauer« (SchmiRmaL) hat SCAI eine molekulare Modellierung zur Simulation von Octanol-Wasser- und Membran-Wasser-Verteilungskoeffizienten verwendet. Beide Bestandteile sind wichtig, um die Giftigkeit bestimmter Chemikalien zu schätzen. Da die Experimente aufgrund der in der Praxis extrem geringen Konzentrationen nicht leicht durchzuführen sind, stellt die Simulation in Bezug auf die Genauigkeit und den Preis eine kostengünstige Alternative dar.



- 1 *Atomare Energiebeiträge eines gelernten Modells zur Vorhersage der Bindungsenergie von Molekülen*
- 2 *Hauptkomponentenanalyse zur Charakterisierung von Zuständen von Kohlenstoff mit Hilfe kleiner Moleküle*



HIGH PERFORMANCE ANALYTICS

Das Geschäftsfeld *High Performance Analytics* (HPA) beschäftigt sich mit der Analyse, Simulation und Optimierung von Netzwerken für den Transport von Gas, Strom, Wasser, Fernwärme und Öl. Ein weiterer Schwerpunkt ist das robuste Design zur statistischen Analyse und Optimierung parameterabhängiger Aufgaben. Kooperationspartner und Kunden stammen aus den Branchen Öl und Gas, Chemie, Infrastruktur, Mikroelektronik, Automobilbau, Engineering und Datenverarbeitung.

Die Anwendungen von HPA sind für mehrere Bereiche von Bedeutung:

- Netzwerke: Modellierung, Simulation, Analyse/Optimierung in den Bereichen Gas, Wasser, Strom, Fernwärme, Öl, Kühlkreisläufe in Rechenzentren und Bürogebäuden
- Analyse von Messdaten zur Überwachung und Steuerung von Energienetzwerken
- Analyse und Parameteroptimierung industrieller Prozesse und Produkte unter Berücksichtigung von Schwankungen und Toleranzen
- Zustandsüberwachung von Maschinen (Condition Monitoring) oder von industriellen Prozessen (Process Monitoring)

Im Geschäftsfeld HPA kommen Methoden aus der Numerik, dem Data Mining und dem Maschinellen Lernen zum Einsatz: Es werden beispielsweise Löser für differential-algebraische Gleichungssysteme, Methoden zur Erstellung von Interpolations- oder Approximationsmodellen (response surfaces) und Verfahren der Statistik entwickelt und implementiert. Genutzt werden auch eigene patentgeschützte Verfahren zur statistischen Analyse und zur robusten Optimierung parameterabhängiger Ketten von (Simulations-)Prozessen.

ABTEILUNGSLEITERIN
 Dr. Tanja Clees
 Telefon +49 2241 14-2983
 tanja.clees@
 scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/
 hpa

Software-Produkte: MYNTS, DesParO und net'O'graph

Die Analyse und Optimierung ihrer Netzwerke ist für Energieversorger und große Energieverbraucher heute ein wesentlicher Wettbewerbsfaktor. Mit der von HPA entwickelten Software MYNTS (Multiphysical Network Simulation Framework) lassen sich komplexe Netze planen und ihr Verhalten im Betrieb vorherberechnen. MYNTS modelliert Transportnetze für Gas, Strom, Fernwärme oder Wasser. Durch numerische Simulation lassen sich die Netze flexibel analysieren, besser planen und optimieren. In der Simulation zeigt sich sofort, wie sich Änderungen verschiedener Faktoren auswirken.

Die Software MYNTS ist mit einem optionalen Interface zur Software DesParO erhältlich, die ebenfalls von HPA entwickelt wurde. DesParO ist eine Software-Toolbox zur interaktiven Exploration und automatisierten Analyse und Optimierung parametrisierter Anwendungen. Sie kann dabei sowohl für Simulationsanwendungen als auch für physikalische Experimente genutzt werden. Gemeinsam erlauben MYNTS und DesParO beschleunigte und detaillierte statistische Analysen bis hin zur robusten (kontinuierlichen) Mehrziel-Optimierung.

Ein drittes Software-Produkt ist net'O'graph. Es dient der Analyse und Optimierung von Netzwerken sowie dem Graph-Mining und ist in MYNTS integriert.

Szenarien für die zukünftige Energieversorgung mit Strom, Gas und Wärme

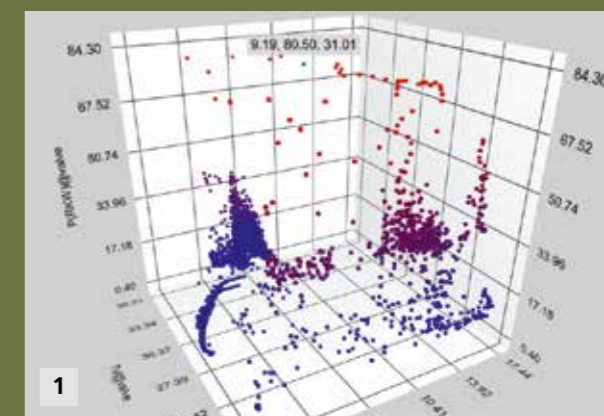
In dem erfolgreich abgeschlossenen Projekt SIMOPEK wurden Methoden und Werkzeuge entwickelt, um den Energiekreislauf von Klimatisierungsnetzen für Rechenzentren unter Berücksichtigung von Supercomputer-Betriebsszenarien zu simulieren und zu optimieren. Das Projekt wurde vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) gefördert.

Die Ergebnisse aus dem Projekt ES-Flex-Infra sollen Energieversorger und Dienstleister in die Lage versetzen, Lastverlagerungen und Integration von Speichern in der städtischen Infrastruktur zu untersuchen, zu bewerten und letztlich betreiben zu können (siehe Seite 15).

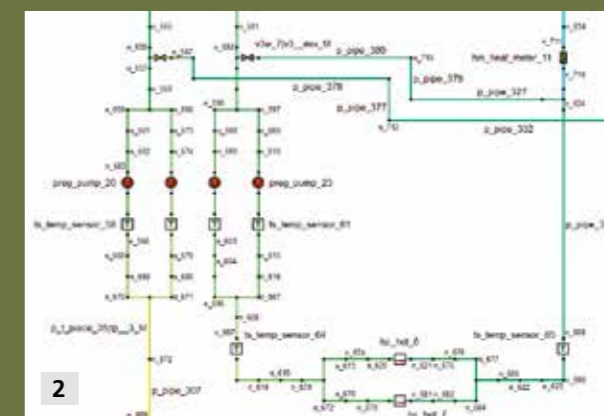
In dem von der Forschungsvereinigung der Arbeitsgemeinschaft der Eisen und Metall verarbeitenden Industrie e.V. (AVIF) geförderten Projekt CharMe-uPS arbeitet HPA an der Charakterisierung und Meta-Modellierung ungleichartiger Punktschweißverbindungen für die Crash-Simulation.

Im Verbundprojekt MathEnergy erstellen Wissenschaftler aus vier Universitäten, zwei Fraunhofer-Instituten, der Energiewirtschaft und dem Max-Planck-Institut für Dynamik komplexer technischer Systeme in Magdeburg eine Software-Bibliothek, die das komplette gekoppelte Gas- und Stromnetz Deutschlands in allen Ebenen abzubilden vermag.

Die Software soll in der Lage sein, langfristige Entscheidungen zu unterstützen, um Versorgung und Rohstoffzufuhr zu sichern, Netzstabilität zu gewähren oder den Netzausbau lokal voranzutreiben. In Zukunft soll so die Steuerung des Gesamtnetzes signifikant verbessert werden. Dafür müssen mathematische Methoden entwickelt werden, die Gas- und Stromflüsse in großen, komplexen Netzwerken effizient und zuverlässig berechnen können. Die Herausforderung besteht darin, umfassende, hierarchisch aufgebaute Systeme und starke Abhängigkeiten zwischen den einzelnen Netzen zu erfassen und abzubilden.



1



2

- 1 Die dreidimensionalen Daten zeigen den Betriebszustand der Kühlung eines HPC-Rechenzentrums.
- 2 Eine mit der Software MYNTS erstellte schematische Darstellung eines Energienetzwerks

NUMERISCHE DATENBASIERTE VORHERSAGE

Das Geschäftsfeld *Numerische Datenbasierte Vorhersage* (NDV) entwickelt, erforscht und nutzt numerische Verfahren und Methoden des Maschinellen Lernens zur datenbasierten Vorhersage. Ziel ist es, Daten zeitnah zu analysieren und Prognosen über zukünftiges Verhalten zu generieren.

Ein wissenschaftlicher Fokus der Forschungsarbeiten im Geschäftsfeld NDV ist die Entwicklung effizienter Methoden zur Analyse komplexer Daten. SCAI entwickelt Software-Lösungen, die es Anwendern erlauben, einfach und interaktiv große Datenmengen aus der virtuellen Produktentwicklung oder dem Monitoring zu untersuchen. So unterstützen die Analysemethoden von SCAI den Ingenieur dabei, Entscheidungen mit Hilfe der vorhandenen Datenbasis zu treffen.

Mit Hilfe mathematischer Konzepte kann in der Datenanalyse ausgenutzt werden, dass den Daten physikalisch-technische Prozesse zugrunde liegen. Die so entwickelten Gray-Box-Methoden erlauben eine gezielte Unterstützung der Entwicklungsingenieure. Ihre Entwicklungsarbeit wird einfacher und effizienter, was eine Konzentration auf die eigentlichen ingenieurtechnischen Aspekte ermöglicht.

In der industriellen Produktentwicklung werden numerische Simulationen vielfältig genutzt, um komplexe Phänomene zu verstehen, beispielsweise für Parameterstudien zur Untersuchung des Crash-Verhaltens von Fahrzeugen bei unterschiedlichen Designauslegungen. Dazu entwickelt NDV innovative maschinelle Lernmethoden, die Daten vieler Simulationen gleichzeitig, vergleichend und interaktiv analysieren. Bei Crash-Versuchen ermöglichen diese Methoden erstmalig einen detaillierten und hochauflösenden Abgleich von Simulationen mit realen Crash-Tests.

ABTEILUNGSLEITER
Prof. Dr. Jochen Garcke
Telefon +49 2241 14-2286
jochen.garcke@
scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/ndv

Neues Software-Produkt ModelCompare

ModelCompare ermöglicht einen einfachen und direkten Vergleich zweier ähnlich diskretisierter Finite-Element-Modelle und berechnet Unterschiede der Modelle hinsichtlich Geometrie (Gitter), Material-Identifikation oder Dicke. ModelCompare identifiziert die Unterschiede anhand der durch das Gitter beschriebenen Geometrie und ist unabhängig von den Namen und Bezeichnungen einzelner Komponenten. Dank kurzer Laufzeiten können Ingenieure, die mit vielen unterschiedlichen Finite-Element-Modellen arbeiten, leicht und schnell die jeweiligen Unterschiede erkennen.

Projekte: Fortissimo 2, VAVID und Flex4Apps

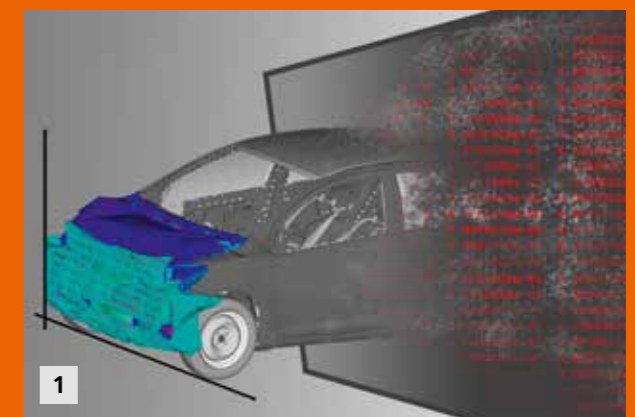
Das von der Europäischen Kommission geförderte Projekt Fortissimo 2 zielt darauf ab, die globale Wettbewerbsfähigkeit europäischer kleiner und mittlerer Unternehmen durch die Nutzung von Simulations-Services zu verbessern, die auf High-Performance-Computing-Cloud-Infrastrukturen laufen. SCAI bringt seine Expertise im Technologiebereich hochentwickelter Methoden der Datenanalyse für große Mengen von Daten aus numerischen Simulationen in dieses Projekt ein.

Im Projekt VAVID werden Methoden entwickelt, um die enormen Datenmengen zu bewältigen, die in ingenieurtechnischen Branchen anfallen. Bei den in VAVID untersuchten Daten handelt es sich um Ergebnisdaten aus numerischen Simulationen der Automobilindustrie sowie um Messdaten von Monitoring-Systemen von Windenergieanlagen. Durch vergleichende Analysen werden die Daten auf ihren relevanten Kern reduziert. Das verschafft Ingenieuren einen besseren Durchblick, um Produkte zu optimieren. Die Projektpartner entwickeln Verfahren zur effizienten Datenanalyse. Diese fließen in ein leistungsfähiges Datenmanagement-System ein, das eine zentrale Datenhaltung sowie einen schnellen Datenzugriff und eine effiziente Datenbereitstellung erlaubt.

Eine Anwendung ist die prädiktive Wartung von Windenergieanlagen. Die Daten stammen hierbei aus Systemen zur Zustandsüberwachung. Dazu werden Methoden des Maschinellen Lernens untersucht und entwickelt, die eine bessere Anomalieerkennung ermöglichen. Insbesondere werden neue mathematische Ansätze betrachtet, die über Standardverfahren hinausgehen. Das Ziel dabei ist, eine kleine Anzahl signifikanter Indikatoren zu berechnen, mit denen sich Abweichungen vom Normalzustand messen lassen. VAVID wird vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) gefördert.

Ziel im Projekt Flex4Apps ist es, die Nutzungsmöglichkeiten sogenannter cyber-physischer Systeme (CPS) unter Berücksichtigung der gesamten Datenverarbeitungskette maßgeblich zu verbessern. Moderne Infrastrukturen für die Telekommunikation oder die Gebäudeautomation sind komplexe Systeme. Sie bestehen aus softwaretechnischen Komponenten, elektronischen Elementen und Sensoren, die oft über das Internet kommunizieren. In solchen cyber-physischen Systemen fallen große Datenmengen an.

In Flex4Apps entsteht mit Hilfe domänenübergreifender Datenanalysetools ein Rahmen für die Systemüberwachung. Dies erlaubt es, den Gesamtzustand des Systems aus den Zusammenhängen gesammelter Daten zu erschließen. So kann einerseits vor einem Fehler gewarnt werden. Andererseits ist es möglich, Defekte zu entdecken, die aufgrund ausgebliebener Fehlermeldungen unerkannt blieben. Das BMBF fördert den deutschen Teil des Projekts über das Cluster ITEA 3 der europäischen Forschungsinitiative EUREKA.



- 1 Bei der Simulation eines Crash-Versuchs fallen große Datenmengen an.
- 2 Sensor- und Zählerdaten in Smart Homes werden im Projekt Flex4Apps für Bewohner analysiert.

MESHFREE MULTISCALE METHODS

Die Vorhersage des Materialversagens und des Bruchverhaltens großer Bauteile spielt in der Industrie eine wichtige Rolle. Beispiele hierfür sind die Lebenszeitprognosen von Flugzeugen, von Staudämmen oder von Radreifen bei Schienenfahrzeugen.

Im Geschäftsfeld *Meshfree Multiscale Methods* werden effiziente Mehrskalmethoden entwickelt, die es ermöglichen, Materialversagen und Bruchverhalten großer Bauteile zu analysieren. Dazu gehören gitterfreie Methoden wie Partikel-basierte Mehrskalverfahren und die Verallgemeinerung von Finite-Element-Methoden. Der Bedarf an solchen neuen Simulationstechniken zeigt sich gerade in Anwendungsbereichen, die bei der Simulation an die Grenzen der klassischen Finite-Element-Technik stoßen.

Die in der Abteilung entwickelten Verfahren sind insbesondere zur Lösung von Problemen geeignet, in denen große Geometrie- und Topologieänderung auftreten – beispielsweise große Deformationen oder freie Oberflächen. Da gitterfreie Verfahren in diesen Fällen keine globale konsistente Gittergenerierung benötigen, sind sie den klassischen gitterbasierten Methoden überlegen.

Ein Schwerpunkt der Arbeiten liegt auf der Entwicklung der Partition-of-Unity-Methode (PUM) – einer gitterfreien Verallgemeinerung der Finite-Element-Methode, in der auf einfache Art und Weise problemabhängige Basisfunktionen direkt verwendet werden können. Diese anwendungsspezifischen Basisfunktionen können hier analytisch oder auch nur als numerische oder experimentelle Daten gegeben sein. Insgesamt ermöglicht dieser Ansatz eine deutlich bessere Approximation mit weniger Freiheitsgraden. Insbesondere bei Problemen mit

ABTEILUNGSLEITER

Prof. Dr. Marc Alexander
Schweitzer

Telefon +49 2241 14-2037
marc.alexander.schweitzer@
scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de /
mmm

BILD

Verallgemeinerte Finite-
Element-Verfahren
verbessern die Simulation
in Gebieten mit
Löchern und anderen
Singularitäten.

singulären oder oszillierenden Lösungen zeigt dieser Ansatz deutliche Rechenzeitvorteile gegenüber klassischen Finite-Element-Methoden. Auch bei der Simulation dynamischer Prozesse lassen sich mit diesen verallgemeinerten Methoden enorme Effizienzsteigerungen erzielen.

Software-Umgebung PUMA

Das Verständnis der Eigenschaften moderner Materialien, beispielsweise von Verbundwerkstoffen, ist in vielen Bereichen der Industrie von Bedeutung. Hierbei sind umfangreiche Modellierungs- und Simulationsaufgaben zu bewältigen. Besondere Herausforderungen sind die unterschiedlichen intrinsischen Zeit- und Längenskalen, die eine direkte numerische Simulation des Feinskalenmodells häufig unmöglich machen. Daher sind Software-Werkzeuge, die eine einfache und schnelle Umsetzung neuer Modelle sowie die effiziente Approximation dieser Modelle unterstützen, von großem praktischen Interesse.

Die von SCAI entwickelte Software-Umgebung PUMA ist ein *Rapid Enriched Simulation Application Development Framework* und ermöglicht die schnelle Umsetzung und Evaluation neuer mathematischer Modelle. PUMA verwendet verallgemeinerte Finite-Element-Techniken für die Approximation dieser Modelle und kann anwendungsspezifisches Wissen zur präzisen und effizienten Diskretisierung leicht ausnutzen. Zudem bietet PUMA eine einheitliche Schnittstelle, um mit allen klassischen Finite-Element-Paketen gekoppelt eingesetzt zu werden. So lassen sich neue verbesserte lokale Modelle und PUMAs erhöhte Genauigkeit auch leicht in großen realen Anwendungsfällen einsetzen und bewerten.

Architektur von PUMA

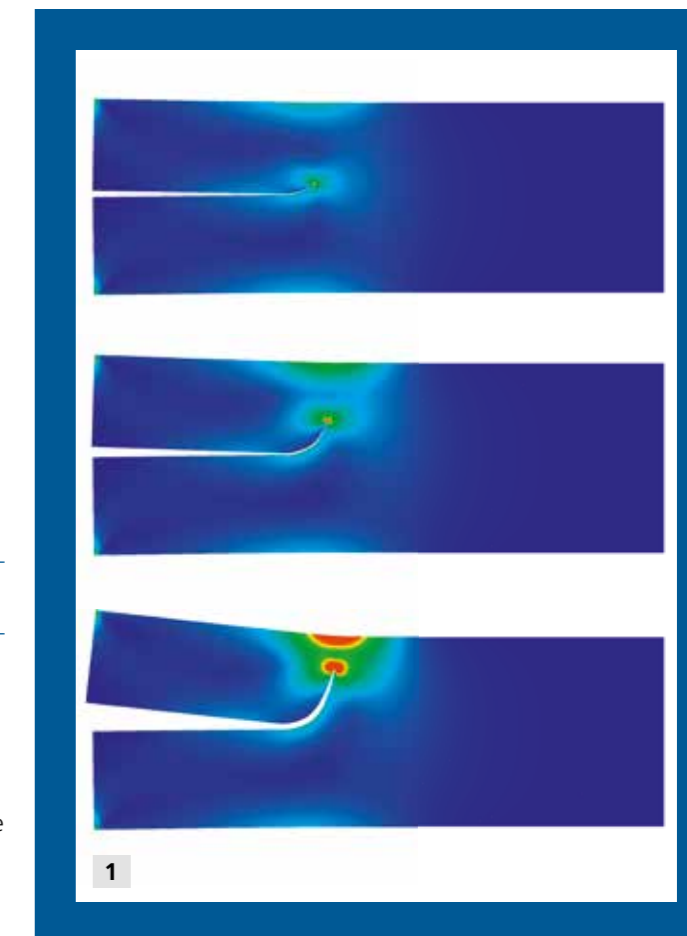
Aufgrund einer mehrschichtigen Architektur verbirgt PUMA die interne methodische und Implementierungskomplexität vom Benutzer. Das Modul PaUnT, das den rechnerischen Kern von PUMA enthält, sorgt auch für Plattformunabhängigkeit, Recheneffizienz und die Möglichkeit, weitere wissenschaftliche Software-Bibliotheken zu nutzen.

PUMA hat eine Python-Schnittstelle, die einen einfachen Zugriff auf die übergeordnete Funktionalität von PaUnT ermöglicht. Auf der Anwendungsebene implementiert der Anwender die Simulationsanwendung mit Hilfe dieser Schnittstelle.

Damit ist es möglich, die verwendeten Methoden im Detail zu steuern. Es ist aber nicht erforderlich, dass der Benutzer alle technischen Einzelheiten oder ihre Implementierung im rechnerischen Kern von PUMA kennt.

Anwendungen

PUMA eignet sich besonders für bruchmechanische Probleme. Es ist bekannt, dass solche Probleme für klassische Finite-Element-Methoden eine große Herausforderung darstellen. Beim Auftreten von Rissen entstehen in der Lösung Diskontinuitäten entlang des Risses, in der Risspitze wird die Lösung singular. In PUMA sind diese Schwierigkeiten durch die Verwendung geeigneter Anreicherungsfunktionen und passender Lösungsmethoden für die resultierenden Gleichungssysteme einfach zu beheben.



1 Kontur-Plots zeigen die Entwicklung der Materialspannungen bei der Entstehung und dem Wachstum eines Risses.



COMPUTATIONAL FINANCE

Im Geschäftsfeld *Computational Finance* werden effiziente und robuste numerische Verfahren entwickelt und auf parallelen Hochleistungs-Rechnersystemen realisiert. Hierbei kommen moderne finanzmathematische Methoden wie dimensionsadaptive Dünngitter-Quadratur sowie Multilevel-Monte-Carlo- und Quasi-Monte-Carlo-Simulation zum Einsatz. Diese Verfahren erlauben Berechnungen mit hoher Genauigkeit bei gleichzeitiger substanzieller Verringerung der Rechenzeiten.

Computational Finance ist ein neues interdisziplinäres Teilgebiet des Wissenschaftlichen Rechnens. Das Hauptziel ist es hierbei, die Risiken, die Finanzprodukte generieren, so genau wie möglich zu bestimmen.

Anwendungsgebiete des Geschäftsfelds *Computational Finance* sind

- die Bewertung und der Handel von Wertpapieren,
- die Bestimmung von Sensitivitäten und Hedging-Strategien,
- Risikoabschätzungen und Risikomanagement,
- Asset-Liability-Management,
- Investitionsentscheidungen und
- die strategische Unternehmensplanung.

Aktuelle Herausforderungen sind dabei die immer größer werdende Komplexität moderner Finanzprodukte, Marktmodelle mit mehreren Unsicherheitsquellen sowie das gleichzeitige Management von Anlagen und Verbindlichkeiten, das ein komplexes Optimierungsproblem darstellt.

LEITER DES
GESCHÄFTSFELDES
Prof. Dr. Thomas Gerstner
Telefon +49 2241 14-2473
thomas.gerstner@
scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/cf

Zwei Entwicklungen des Geschäftsfeldes betreffen die Bewertung von Finanzderivaten sowie die Simulation von Asset-Liability-Management-Modellen.

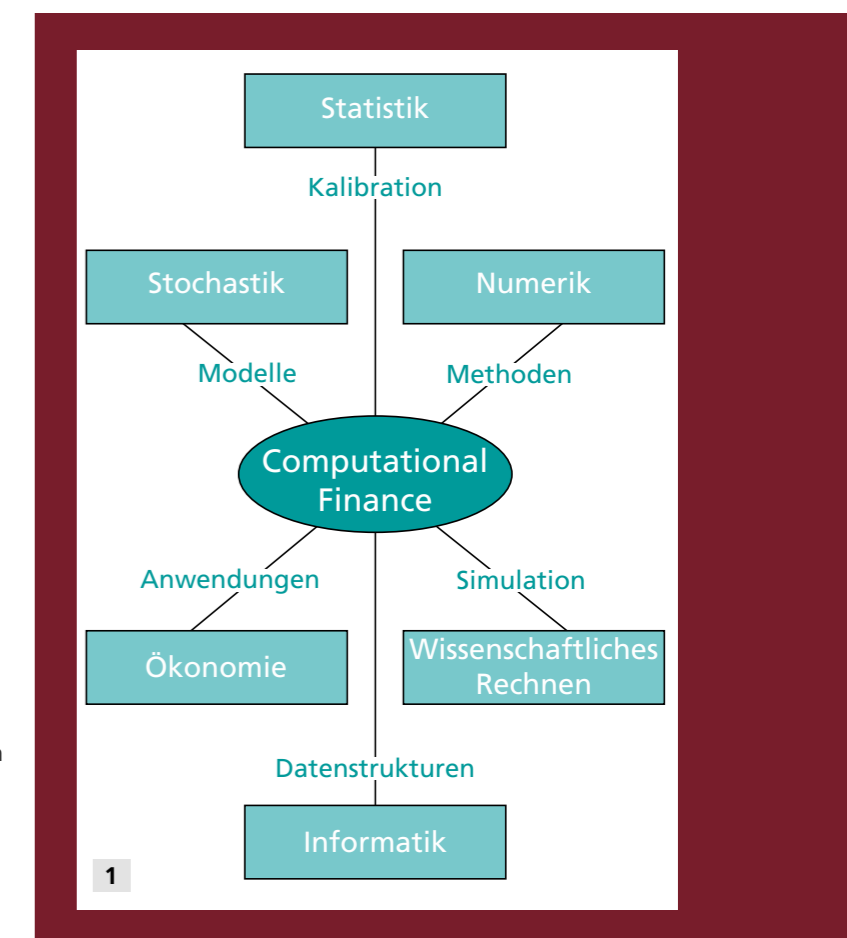
- Bei der effizienten und genauen Bewertung von Finanzderivaten geht es darum, den fairen Preis eines Derivates zu ermitteln. Diese Preisbestimmung stellt eine besondere Herausforderung dar, weil einerseits die Finanzprodukte komplexer und andererseits die Modelle für die Finanzmärkte immer ausgefeilter werden. Beide Entwicklungen tragen dazu bei, dass die realistische Bewertung von Finanzderivaten nur mit sehr großem Rechenaufwand möglich ist.
- Asset-Liability-Management (ALM)-Modelle werden eingesetzt, um die mittel- und langfristige Entwicklung aller Aktiva und Passiva eines Versicherungsprodukts zu simulieren. Auf diese Weise kann die Exposition des Versicherungsunternehmens auf Finanz-, Sterblichkeits- und Kündigungsrisiken analysiert werden. Die hierzu bislang eingesetzten Monte-Carlo-Verfahren benötigen aber riesige Rechenzeiten, um Ergebnisse mit einer akzeptablen Genauigkeit zu erhalten. Dies führt dazu, dass ein häufiges und umfassendes Risikomanagement, ausführliche Sensitivitätsstudien oder die Optimierung von Produktparametern und Managementregeln bisher oft noch nicht möglich sind.

Für beide Anwendungsszenarien entwickelt Fraunhofer SCAI neue robuste numerische Verfahren und realisiert diese auf parallelen Hochleistungs-Rechnersystemen. Diese Vorgehensweise soll in den folgenden beiden aktuellen Forschungs- und Entwicklungsprojekten illustriert werden.

Im Rahmen der Fraunhofer-internen wirtschaftsorientierten strategischen Allianz (WISA) »Stochastische Modellierung und Numerische Simulation für das Risikomanagement von Versicherungsunternehmen« entwickelt SCAI in Kooperation mit dem Fraunhofer-Institut für Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM in Kaiserslautern neue Ansätze zur Modellierung und Simulation von Versicherungsprodukten und -unternehmen. Ziel ist dabei die Entwicklung eines Software-Paketes zum umfassenden Asset-Liability-Management, in das Entwicklungen der letzten Jahre in der stochastischen Modellierung und der numerischen Simulation integriert werden. Gleichzeitig soll die Software alle aktuellen regulatorischen Anforderungen erfüllen. Auf der informationstechnischen Seite sollen dabei modernes algorithmisches Design, modulare Strukturierung, webbasierte Schnittstellen und Cloud-Techniken für verteiltes Rechnen zum Einsatz kommen.

In einem weiteren Forschungsprojekt kooperiert SCAI mit der »Arabesque Asset Management Ltd«. Dieser Investmentfonds beachtet bei seinen Aktivitäten die Werte des *United Nations Global Compact* und die *United Nations Principles for Responsible Investment (UN PRI)*.

In dieser Kooperation untersucht SCAI die Rekonstruktion und die Vorhersage von Finanzdaten. Hierzu werden strukturelle Bewertungen von Finanzunternehmen in einer großen Datenmatrix gesammelt, die dann mit numerischen Methoden analysiert wird. Zur Analyse wird eine Singulärwertzerlegung der Datenmatrix für unvollständige Daten durchgeführt, was unter anderem eine stabile Rekonstruktion fehlender Bewertungen ermöglicht. Dies erlaubt letztendlich eine robuste Analyse von Unternehmensrisiken für nachhaltige Investments.



1 *Computational Finance* nutzt Modelle und Methoden aus verschiedenen Teildisziplinen der Mathematik, Informatik und Wirtschaft.

WEITERFÜHRENDE INFORMATIONEN

ONLINE-RUBRIKEN DES JAHRESBERICHTS:

Publikationen

www.scai.fraunhofer.de/publikationen.html



Graduierungsarbeiten

www.scai.fraunhofer.de/publikationen/graduierungsarbeiten.html



Lehrtätigkeiten

www.scai.fraunhofer.de/lehre.html



Mediathek

www.scai.fraunhofer.de/mediathek.html



Anfahrt

www.scai.fraunhofer.de/anfahrt.html



IMPRESSUM

HERAUSGEBER

Fraunhofer-Institut für Algorithmen
und Wissenschaftliches Rechnen SCAI

© 2017

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

Institutsleiter

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

Alle Rechte vorbehalten.

Vervielfältigung und Verbreitung nur mit Genehmigung der
Redaktion.

Anschrift

Schloss Birlinghoven
53757 Sankt Augustin

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

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

Bildquellen

- S. 8: Fraunhofer-Gesellschaft München (1+2)
- S. 9: Universität Bonn, Foto: Dr. Thomas Mauersberg
- S. 11: Springer-Verlag
- S. 18: Fotolia.com, Foto: Nataliya Hora
- S. 22: shutterstock.com, Foto: Mikhail Mishchenko
- S. 23: Fotolia.com, Foto: Edelweiss (1),
Fotolia.com, Foto: donvictori0 (2)
- S. 24: MAGMA GmbH, Aachen
- S. 25: CMG Ltd., Calgary, Canada (1)
- S. 26: Fotolia.com, Foto: adimas
- S. 28: Shutterstock.com, Foto: Nataliya Hora
- S. 32: MEV Verlag GmbH, Foto: Hans-Peter Merten
- S. 38: Fotolia.com, Foto: REDPIXEL
- S. 40: MEV Verlag GmbH, Foto: Christian Albert (1)

Redaktion

Diplom-Journalist Michael Krapp, Dr. Anton Schüller

Alle anderen Abbildungen: © Fraunhofer SCAI

Gestaltung und Produktion

Swetlana Schilinski, Jennifer Bender

Fachtexte

Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter von Fraunhofer SCAI

