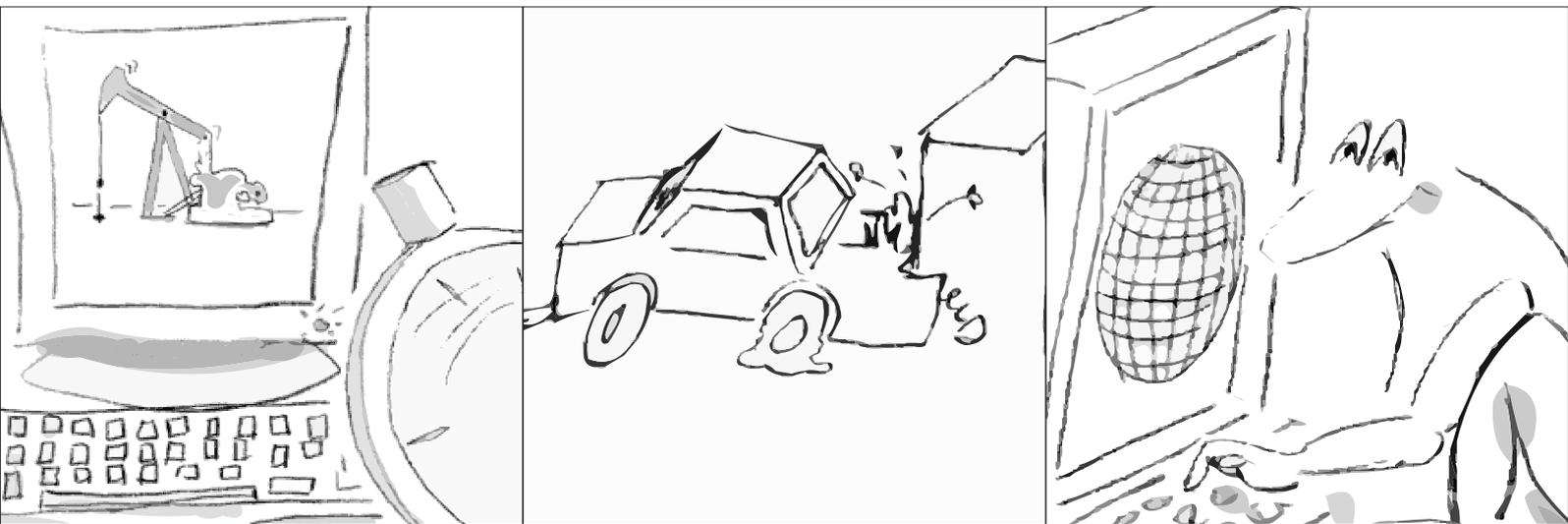


# Jahresbericht

2002 / 2003





# Jahresbericht 2002/2003



Die Aufgabe des Fraunhofer-Instituts für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen (SCAI) ist die Entwicklung und Bereitstellung innovativer Methoden und Produkte für Computersimulation, Optimierung und Bioinformatik. Computersimulation bedeutet, Abläufe und Prozesse vorherzusagen – vom Aufprall-Verhalten eines Pkws bis zur globalen Klimaentwicklung. Mit Computersimulation, Optimierung und Bioinformatik können wir die Zukunft mitgestalten und Innovationen vorantreiben, um gemeinsam mit unseren Partnern aus der Wirtschaft erfolgreich auf den Märkten von morgen zu agieren.

Dazu bereiten wir uns seit dem Jahr 2002 nach den Regeln und Verfahren der strategischen Planung in der Fraunhofer-Gesellschaft auf die Zukunft vor. In einer alle Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter einbindenden und fordernden Diskussion haben wir den Status quo des Instituts analysiert. Für die Marktorientierung wurden die bisherigen Themen und Arbeitsgebiete überprüft, korrigiert und in vielen Bereichen erweitert. Dem Fortschritt der Forschung und Entwicklung entsprechend haben wir aktuelle Themen aufgegriffen und für die Anwendung aufbereitet. Neue Fragen ergaben sich dabei aus einer Fülle systematischer Akquisitionsaktivitäten, aus Gesprächen und Kontakten mit alten, neuen und potenziellen Kunden. Das Ergebnis sind fünf auf die Märkte von heute und morgen ausgerichtete Geschäftsfelder. Sie heißen Simulationsanwendungen, Numerische Software, Optimierung, Bioinformatik und Webbasierte Anwendungen.

Das von meinem ehemaligen Institutsleiterkollegen Prof. Dr. Thomas Lengauer aufgebaute und viele Jahre erfolgreich etablierte Geschäftsfeld Bioinformatik wird unter der neuen Leitung von

Dr. Martin Hofmann strategisch neu ausgerichtet. Professor Lengauer ist über eine Honorarprofessur an der Universität Bonn weiterhin mit dem Institut SCAI verbunden.

Mit der neuen Struktur wollen wir unseren Kunden eine bessere Übersicht über unsere Leistungen bieten. Damit ist die Strategieplanung jedoch noch lange nicht abgeschlossen. Wir werden den eingeschlagenen Weg in den einzelnen Geschäftsfeldern kontinuierlich evaluieren und uns in diesem Jahr der Bewertung externer Auditoren stellen.

Die Wirtschaftserträge des Instituts sind trotz der schwierigen Lage der Gesamtwirtschaft in den vergangenen Jahren kontinuierlich und wie geplant gestiegen. Das sorgt für Motivation. Doch wir werden unsere Anstrengungen zur Akquisition weiter verstärken.

Zu den neuen Themen, die wir in diesem Jahr in Angriff nehmen werden, gehören das Grid Computing, und zwar insbesondere seine industriellen Anwendungen, und das Textmining in den Life Sciences. Wir planen, das Thema „Concurrent Engineering“ zum Gegenstand eines Forschungsprojektes mit der Schiffbauindustrie zu machen. Dabei werden wir die enge Kooperation mit der Einrichtung „Simulations- und Softwaretechnik“ des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt in dieses Forschungsprojekt einbringen.

Zu den besonderen Ereignissen im Jahr 2002 zählte die Verleihung des Fraunhofer-Preises für herausragende wissenschaftliche Leistungen an die Optimierungsgruppe um Dr. Ralf Heckmann. Die Forscher entwickelten Algorithmen, mit denen sich der Materialverschnitt erheblich reduzieren

lässt. Die Software dient auch zu platzsparender und optimaler Anordnung von Bauteilen im dreidimensionalen Raum.

Ein wichtiger Meilenstein im Jahr 2003 war die Unterzeichnung des Kooperationsvertrages zwischen der Universität zu Köln und der Fraunhofer-Gesellschaft, vertreten durch das Institut SCAI. An meinem Lehrstuhl an der mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät (Fachgruppe Mathematik-Informatik) werden künftig vier Wissenschaftler in enger fachlicher Verknüpfung mit den Themen des Instituts forschen und lehren.

SCAI arbeitet darüber hinaus in einer strategischen Partnerschaft mit der Einrichtung „Simulations- und Softwaretechnik“ (SISTEC) des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt auf dem Gebiet des Software-Engineering sehr eng zusammen. Die wissenschaftliche Vernetzung von SCAI unterstreichen auch die Lehrangebote

von Mitarbeitern der Abteilung Bioinformatik im Fachbereich Life Sciences am Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT) in Bonn.

In der Fraunhofer-Gruppe Informations- und Kommunikationstechnik (IuK-Gruppe), dem Zusammenschluss von fünfzehn der IuK-Thematik gewidmeten Instituten, engagiert sich SCAI – und ich als stellvertretender Vorsitzender des Direktoriums – in besonderem Maße für die Zukunftsfragen der Informationstechnik und der Computersimulation.

Dieser Bericht deckt den Zeitraum vom Januar 2002 bis zum Dezember 2003 ab. Ich lade Sie ein, sich auf den folgenden Seiten über unsere Arbeiten, die erzielten Ergebnisse und unsere Planungen zu informieren. Ihre Fragen und Anregungen sind mir und meinen Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern jederzeit willkommen!

Ihr Ulrich Trottenberg





# Inhalt

<b>Vorwort</b>	<b>4</b>
<b>SCAI-lights</b>	<b>8</b>
<b>Das Institut im Profil</b>	<b>10</b>
<b>Das Institut in Zahlen</b>	<b>12</b>
<b>Die Fraunhofer-Gesellschaft</b>	<b>14</b>
<b>Die Fraunhofer-Gruppe Informations- und Kommunikationstechnik</b>	<b>15</b>
<b>Geschäftsfeld Simulationsanwendungen</b>	<b>16</b>
Computational Engineering	20
Anwendungsbeispiele des Computational Engineering	21
MpCCI 2.0 – Industriestandard für gekoppelte Simulationen	25
COSIWIT – Gekoppelte Simulationen in Wissenschaft und Technik	28
IT- und Numerikmethoden für Wettervorhersage und Klimasimulation	30
Softwareintegration und Tools für das Molekulare Docking	32
<b>Geschäftsfeld Numerische Software</b>	<b>34</b>
Skalierbare Lösungsverfahren (SAMG)	38
Beschleunigung von Ölreservoir-Simulationen	40
Beschleunigung von Halbleitersimulationen	42
Interaktives Design von Automobilen (AUTO-OPT)	44
Stabilität von Crash-Simulationen (DIFF-CRASH)	46
Design-Parameter-Optimierung (DesParO)	48
Automatic Data Parallelism Translator (ADAPTOR)	50
Cache-Optimierung (EP-CACHE)	52
Strahlentherapieplanung (Radioplan)	54
<b>Geschäftsfeld Bioinformatik</b>	<b>56</b>
Bioinformatikmethoden für die Expressionsanalyse (BEX)	60
Bioinformatikmethoden für die Proteomanalyse	61
Ontologien – von Menschen und Computern lesbar	62
Computergestützte Analyse von HTS-Daten (Lead ID)	64
Textmining	66
Bonn-Aachen International Center for Information Technology	67
<b>Geschäftsfeld Optimierung</b>	<b>68</b>
Optimierungslösungen für die Industrie	72
Blechverschachtelung	73
Containerbeladung	74
<b>Geschäftsfeld Webbasierte Anwendungen</b>	<b>76</b>
Anwendungen des Grid Computing	79
Simulationsdienstleistungen über Web-Portale nutzen	81
<b>Anhang</b>	<b>82</b>
<b>Impressum</b>	<b>87</b>



Mit der von Dr. Ralf Heckmann, Onno Garms und Mike Schäfer (von links) entwickelten Computersoftware können beispielsweise in der industriellen Textilfertigung optimale Schnittmuster gefunden werden. Damit lässt sich der Verbrauch wertvoller Materialien, etwa Stoffe und Leder, reduzieren. Die Optimierungsverfahren nützen auch bei räumlichen Anordnungsproblemen. So sparen sie Platz im Kofferraum eines Pkw, indem Elektronik-Bauteile auf minimalem Raum so angeordnet werden, dass sie zugleich leicht zu warten sind. Für ihre Arbeit erhielten die Forscher im Jahr 2002 den Fraunhofer-Preis .

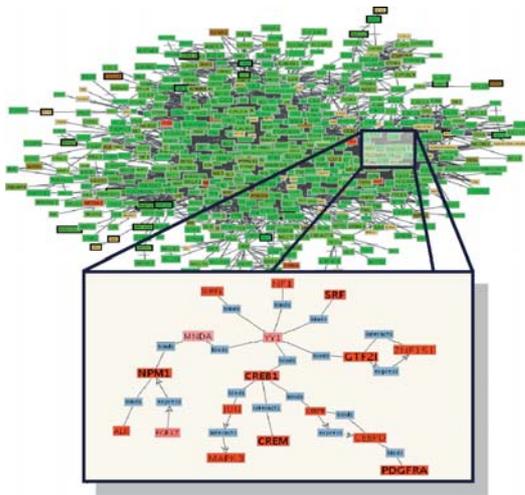


# SCAI g h t s

Numerische Simulation mit schnellen Algorithmen und Grid Computing für die Industrie sind Forschungsthemen, die das Fraunhofer SCAI künftig mit der Universität zu Köln bearbeiten wird. Dazu haben die Partner einen Kooperationsvertrag geschlossen. Die Erfahrungen des SCAI über die wirtschaftswirksame Umsetzung von Forschungsergebnissen wird dabei in die praxisnahe Ausbildung von Studierenden und Graduierten an der Universität einfließen. Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, SCAI-Institutsleiter und Inhaber des Lehrstuhls für Angewandte Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen in der Fachgruppe Mathematik-Informatik der Universität, wurde dazu mit wissenschaftlichem Personal, Räumen und Sachmitteln ausgestattet.



Vorstellung der Kooperationspartner im November 2003: Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, Prof. Dr. Tassilo Küpper (Rektor der Universität zu Köln), Prof. Dr. Rüdiger Seydel (Mathematisches Institut der Universität), Dr. Dietmar Möhler (Ministerium für Wissenschaft und Forschung NRW), Prof. Dr. Axel Freimuth (Dekan der mathematisch-naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität zu Köln)

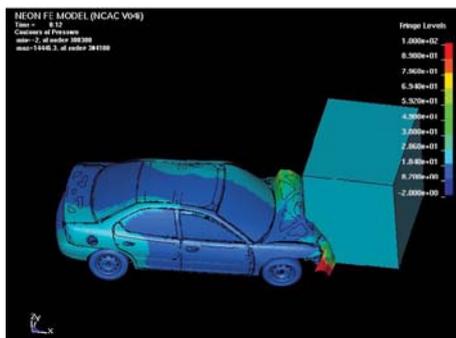
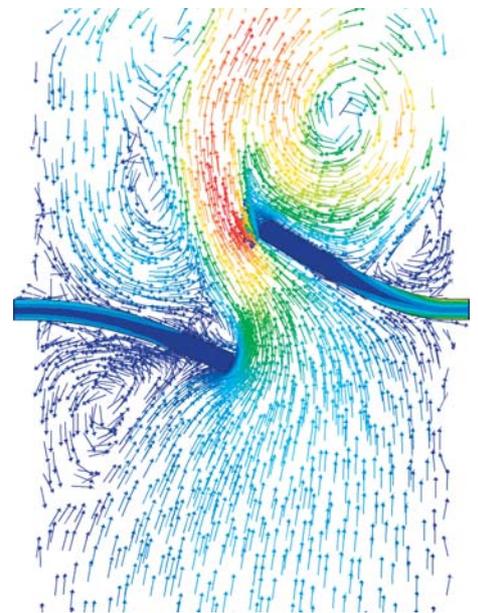


**A**ngesichts der überwältigenden Menge verfügbarer Informationen bereitet es Forschern große Schwierigkeiten, Informationen aus verschiedenen Quellen und Disziplinen der Life Sciences zu extrahieren und zu kombinieren. Ein Großteil der Informationen sind nur in wissenschaftlichen Artikeln zugänglich, und die Menge der Literatur wächst explosionsartig. In der Abteilung Bioinformatik entwickelte Methoden und Verfahren des Text Mining helfen, wertvolle Informationen zu finden und Zusammenhänge durch Netzwerke zu veranschaulichen.

Seite 62

**M**it steigenden Anforderungen an die Qualität der Simulation reicht die Beschreibung eines Prozesses in nur einem physikalischen Fachgebiet oftmals nicht aus – eine multidisziplinäre Betrachtung ist notwendig. Ein Beispiel ist die Fluid-Struktur-Wechselwirkung. Durch die Kraftwirkung der Umströmung eines Bauteils deformiert dieses sich so stark, dass die Strömung ihrerseits dadurch beeinflusst wird. Solche gekoppelten Probleme löst die Software MpCCI. Die weltweit akzeptierte Software für die Kopplung von Simulationscodes verschiedener Disziplinen liegt inzwischen in Version 2.0 vor. Die stark verbesserte Fassung wird vom Fraunhofer SCAI vertrieben. SCAI übernimmt auch die individuelle Anpassungen der Software, die Schulung der Anwender und den Kundendienst.

Seite 23



**W**ird beobachtet, dass kleine Abweichungen in den Einflussgrößen einer Simulation bereits zu großen Änderungen in den Ergebnissen führen, so ist die Simulation instabil und die Ergebnisse sind unzuverlässig. Um dieses kritische Phänomen für die Automobilindustrie zu analysieren, hat Fraunhofer SCAI gemeinsam mit ESI Deutschland und BMW die Software DIFF-CRASH entwickelt. Sie erlaubt es, kritische Strukturbereiche zu finden und gibt Hinweise zu deren Stabilisierung. Aufprallsimulationen werden so zuverlässiger.

Seite 42

## Das Institut im Profil

### Ziele

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

Computersimulation ist ein Gebiet, das Mathematik und Informatik mit den Natur- und Ingenieurwissenschaften verknüpft. Die Expertise von SCAI liegt im Wissenschaftlichen Rechnen: bei den mathematischen und informatischen Methoden und Algorithmen, in der Softwareentwicklung, der Visualisierung und in der Programmierung unterschiedlicher Rechnersysteme. Das Institut bringt sein Wissen und seine Entwicklungen in Kooperationsprojekte mit Anwendern aus Industrie und Wissenschaft ein. In der Forschung entwickelt SCAI die Technologien dafür und erarbeitet innovative Beiträge zur Weiterentwicklung seiner Fachgebiete in Angewandter Mathematik und Informatik. SCAI sieht seine Aufgabe darin, Lösungen für die Probleme bei seinen Partnern und Kunden zu entwickeln.

### Kurzporträt

Das Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen ist im Jahre 1992 aus dem Institut für Methodische Grundlagen der Informationstechnik der damaligen Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung (GMD) hervorgegangen. Seit Juli 2001 gehört das Institut zur Fraunhofer-Gesellschaft. Die Historie des Instituts ist in der Informatik stark geprägt durch Theorie und Praxis der Petrinetze (Carl Adam Petri war bis 1990 einer der Leiter des Instituts) und in der Numerik durch Entwicklung und Anwendung der Mehrgittermethoden.

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

In den fünf Fachabteilungen des Instituts arbeiten rund 80 Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, vorwiegend Mathematiker und Informatiker. Das Jahresbudget von SCAI liegt bei rund acht Millionen Euro. Prof. Dr. Ulrich Trottenberg leitet das Institut.

### Geschäftsfelder

#### Simulationsanwendungen

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

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

Einen Schwerpunkt bilden gekoppelte Simulationen, etwa die gleichzeitige Berechnung von Strömungsvorgängen und daraus resultierenden Belastungen von Strukturen, zum Beispiel von Rohren und Behältern. Gekoppelte Simulationen beschreiben auch die Belastung von Bauteilen bei Aufheizung oder Abkühlung oder die Wechselwirkung elektromagnetischer Felder mit Strukturen. Dazu haben wir die Kopplungssoftware MpCCI entwickelt, die Simulationsprogramme unterschiedlicher Disziplinen effizient miteinander verbindet.

Eine Arbeitsgruppe der Abteilung entwickelt Methoden und Software zur Wettervorhersage und Klimasimulation.

### Numerische Software

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

- Werkzeuge zur Analyse von Simulationsergebnissen,
- Parameteroptimierung,
- Skalierbare Lösertechnologie,
- Leistungsoptimierung (Cache, Parallelrechner) und
- Compiler für datenparallele Programme.

### Bioinformatik

Das Zusammenwachsen von molekularer Biologie und Medizin – einschließlich der Genomforschung – stellt für die Informatik eine enorme Herausforderung dar. Professionelle IT-Infrastrukturen für die forschende Pharmaindustrie und die klinische Forschung unterstützen die strukturierte Erfassung und Verwaltung von Daten und Untersuchungsergebnissen. Sie integrieren diese Informationen und erlauben die Repräsentation von Wissen. Darüber hinaus unterstützen fortgeschrittene Systeme auch die Planung und Organisation komplexer Forschungsprojekte.

### Optimierung

Optimierungsaufgaben stellen sich in der Industriepraxis in vielfältiger Form. Beim Ressourcen sparenden Einsatz von Personal und Material, bei der Auslastung von Produktionsanlagen oder bei der Planung von Transportwegen und Zulieferung – Methoden der mathema-

tischen Optimierung helfen, unternehmerische Entscheidungen zu treffen, Prozesse zu verbessern und Kosten zu sparen.

### Webbasierte Anwendungen

Das Internet eröffnet Branchen und Unternehmen aller Größen neue Möglichkeiten der Geschäftsanbahnung und -abwicklung. SCAI bietet dazu Problemanalyse, Technologieberatung und konkrete unternehmensspezifische Lösungen.

Moderne Sicherheitstechnologien erlauben den Nutzern per Internet auf Datenbanken zuzugreifen und spezifische Software zu nutzen. So werden komplexe Geschäftsprozesse in Web-Portale integriert, um die Zusammenarbeit mit Geschäftspartnern und Kunden zu optimieren.

Aber auch im Intranet großer Firmen sind Web-Technologien von großem Nutzen, um die Zusammenarbeit der Abteilungen zu verbessern.

### Organigramm

Institutsleiter	Univ.-Professor Dr. Ulrich Trottenberg		0 22 41 / 14-2759
stv. Institutsleiter	Dr. Johannes Linden		0 22 41 / 14-2910
Abteilungen	Simulationsanwendungen	Dr. Johannes Linden	0 22 41 / 14-2910
	Numerische Software	Clemens-August Thole	0 22 41 / 14-2739
	Bioinformatik	Dr. Martin Hofmann	0 22 41 / 14-2802
	Optimierung	Dr. Ralf Heckmann	0 22 41 / 14-2810
	Webbasierte Anwendungen	Ottmar Krämer-Fuhrmann	0 22 41 / 14-2202
Zentrale Bereiche	Marketing und Kommunikation	Michael Krapp	0 22 41 / 14-2935
	Institutsverwaltung, Planung und Controlling	Carl Vogt	0 22 41 / 14-2692
	IT-Infrastruktur	Horst Schwichtenberg	0 22 41 / 14-2577

## Das Institut in Zahlen

### Mitarbeiter

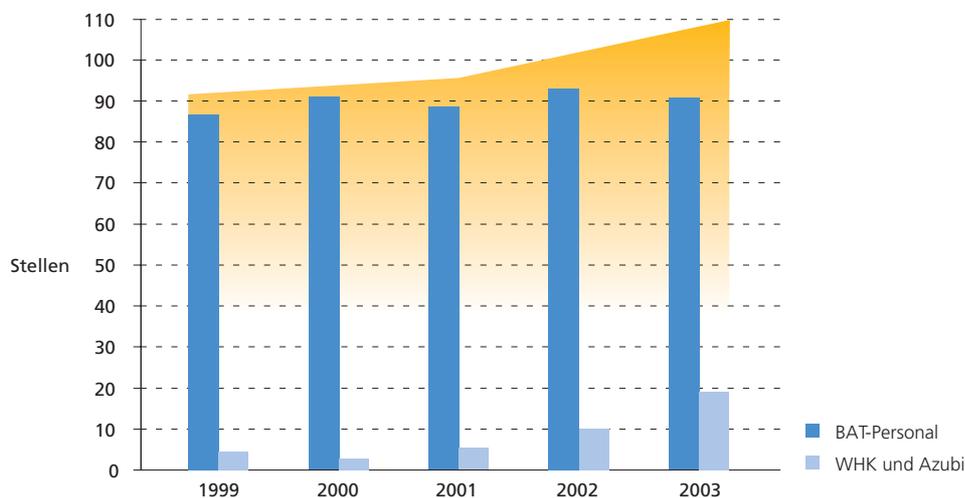
Ende 2003 waren 96 Personen auf 91 Stellen (in Anlehnung an den Bundesangestelltentarif) am Fraunhofer-Institut SCAI beschäftigt. Hinzu kommen 16 Wissenschaftliche Hilfskräfte sowie drei Auszubildende.

Die Personalkapazität ist in Summe auch im Jahr 2003 weiter leicht gestiegen. Allerdings deutet sich eine Strukturverschiebung an. Im Rahmen einer Sozialplanregelung scheidet immer mehr Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter aus. Neubesetzungen und Verträge werden nur verlängert, wenn es die Ertragslage des Instituts erlaubt. Bei den Planstellen wird sich der Abwärtstrend 2004 eher noch verstärken.

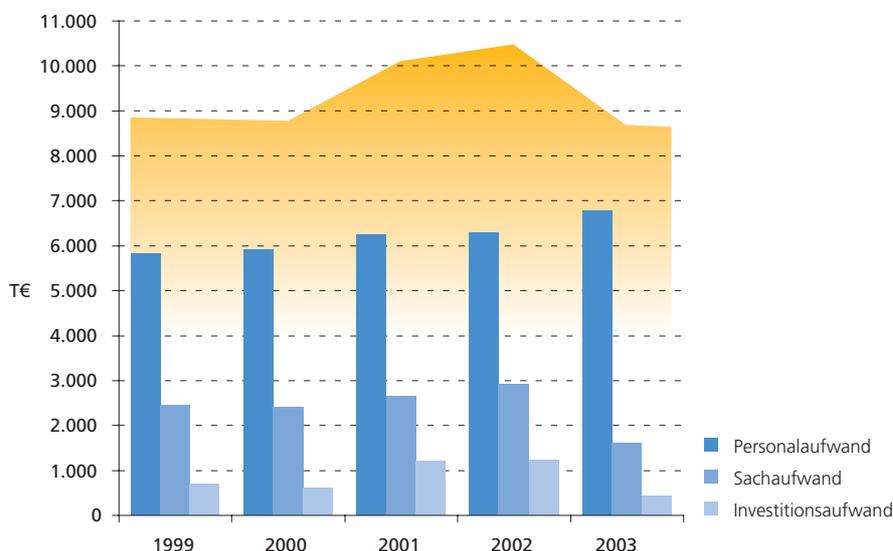
Die Zahl wissenschaftlicher Nachwuchskräfte ist gestiegen. So führte die mittlerweile etablierte Kooperation mit dem Lehrstuhl von Prof. Trottenberg an der Universität zu Köln zu einem Anstieg der Zahl studentischer Hilfskräfte. Im Jahr 2003 wurden 16 Diplomanden und 11 Doktoranden bei der Erstellung ihrer qualifizierenden Arbeiten betreut und durch die direkte Einbindung in die Projektarbeit des Instituts zusätzlich in ihrer Ausbildung gefördert.

Für den Ausbildungszeitraum 2003 bis 2005 hat das Institut drei Auszubildende eingestellt.

Personal



Aufwand

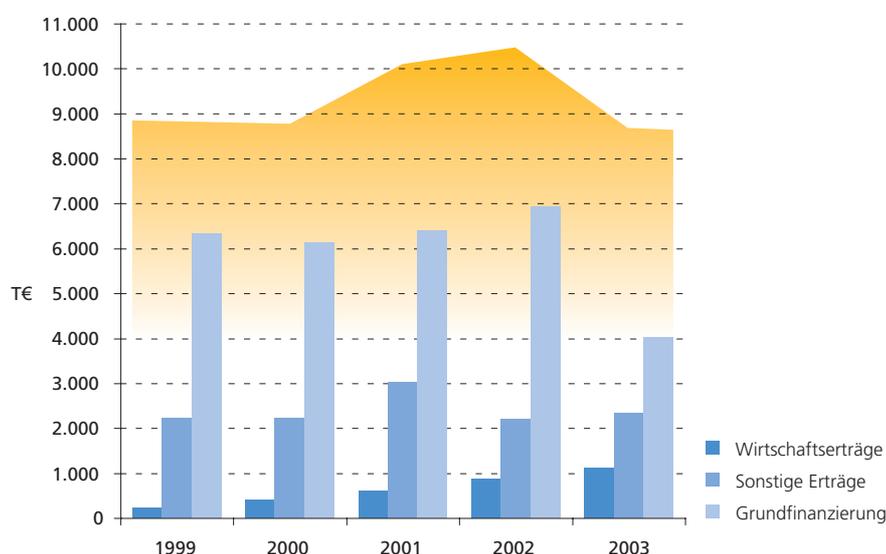


## Aufwand

Der Betriebsaufwand des SCAI betrug 2003 rund 7,9 Millionen Euro und lag damit 24 Prozent unter dem des Vorjahres. Ein wesentlicher Teil der Verringerung resultiert aus den von der Fraunhofer-Zentrale übernommenen Kosten zur Abwicklung des Sozialplans. Nach den investitionsstarken Jahren 2001 und 2002 investierte das Institut im Jahr 2003 in Labors zur Betreuung von Praktikanten des Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT) in Bonn und in kleinere Ersatzbeschaffungen. Die Investitionen betrugen insgesamt rund 413 Tausend Euro.

Angaben in T€	1999	2000	2001	2002	2003
<b>Betriebsaufwand</b>	8.281,0	8.328,9	8.905,0	9.226,5	7.524,7
Personalaufwand	5.821,0	5.925,1	6.251,6	6.299,7	6.293,7
Sachaufwand + ILV	2.460,0	2.403,8	2.653,4	2.926,8	1.231,0
Investitionsaufwand	698,0	604,6	1.210,6	1.241,1	413,2
<b>Gesamt</b>	<b>8.979,0</b>	<b>8.933,5</b>	<b>10.115,6</b>	<b>10.467,6</b>	<b>7.937,9</b>
<b>Projekte Bund/Land</b>	1.144,4	1.455,9	2.003,3	2.133,9	1.979,4
Wirtschaftserträge	282,2	570,2	726,2	945,0	1.167,4
Sonstige Erträge	1.170,5	813,3	1.024,6	311,0	715,4
Grundfinanzierung	6.381,9	6.094,1	6.361,5	7.077,7	4.075,7
<b>Gesamt</b>	<b>8.979,0</b>	<b>8.933,5</b>	<b>10.115,6</b>	<b>10.467,6</b>	<b>7.937,9</b>

## Finanzierung



## Finanzierung

Die Erträge des Instituts stiegen wie geplant. Die Wirtschaftserträge lagen im Jahr 2003 mit rund 1,2 Millionen Euro um fast ein Viertel über denen des Vorjahres. Die sonstigen Projekterträge stiegen um 10 Prozent. Die gesamten Projekterträge lagen damit bei rund 3,9 Millionen Euro.

Der Bedarf an Grundfinanzierung sank von rund 7,1 Millionen Euro (2002) auf 4,1 Millionen Euro (2003). Ursachen hierfür sind die höhere Eigenfinanzierung und die Bereinigung des Betriebshaushalts um die Kosten des Sozialplans.

Bezogen auf den Betriebshaushalt hat sich die Gesamtertragsquote von 35,2 Prozent (2002) auf 49,2 Prozent (2003) gesteigert. Auch die Wirtschaftsertragsquote ist im stetigen Aufwärtstrend. Gegenüber 2002 (10,2 Prozent) stieg sie im Jahr 2003 deutlich und beträgt nun 15,5 Prozent.

# Die Fraunhofer-Gesellschaft

Die Fraunhofer-Gesellschaft betreibt anwendungsorientierte Forschung zum unmittelbaren Nutzen für Unternehmen und zum Vorteil der Gesellschaft. Vertragspartner und Auftraggeber sind Industrie- und Dienstleistungsunternehmen sowie die öffentliche Hand. Im Auftrag und mit Förderung durch Ministerien und Behörden des Bundes und der Länder werden zukunftsrelevante Forschungsprojekte durchgeführt, die zu Innovationen im öffentlichen Dienst und in der Wirtschaft beitragen.

Mit technologie- und systemorientierten Innovationen für ihre Kunden tragen die Fraunhofer-Institute zur Wettbewerbsfähigkeit der Region, Deutschlands und Europas bei. Dabei zielen sie auf eine wirtschaftlich erfolgreiche, sozial gerechte und umweltverträgliche Entwicklung der Gesellschaft.

Ihren Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern bietet die Fraunhofer-Gesellschaft die Möglichkeit zur fachlichen und persönlichen Entwicklung für anspruchsvolle Positionen in ihren Instituten, in anderen Bereichen der Wissenschaft, in Wirtschaft und Gesellschaft.

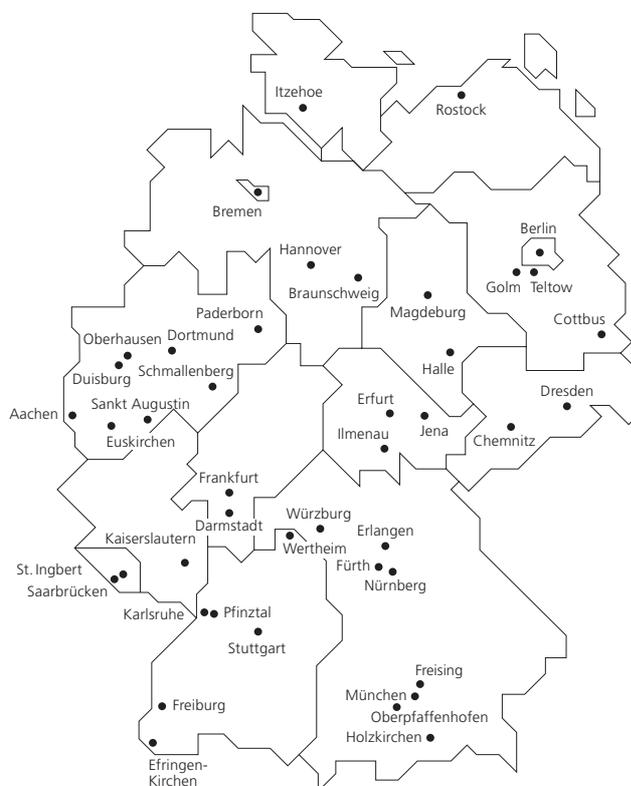
Die Fraunhofer-Gesellschaft betreibt derzeit rund 80 Forschungseinrichtungen, davon 58 Institute, an über 40 Standorten in ganz Deutschland. Rund 12 700 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, überwiegend mit natur oder ingenieurwissenschaftlicher Ausbildung, bearbeiten das jährliche Forschungsvolumen von über 1 Milliarde Euro. Davon fallen mehr als 900 Millionen Euro auf Vertragsforschung. Für rund zwei Drittel davon erwirtschaftet die Fraunhofer-Gesellschaft Erträge aus Aufträgen der Industrie und öffentlich finanzierten Forschungsprojekten. Ein Drittel wird von Bund und Ländern beigesteuert, um damit den Instituten die Möglichkeit zu geben, Problemlösungen vorzubereiten, die in fünf oder

zehn Jahren für Wirtschaft und Gesellschaft aktuell werden.

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

Mitglieder der 1949 gegründeten und als gemeinnützig anerkannten Fraunhofer-Gesellschaft e. V. sind namhafte Unternehmen und private Förderer. Von ihnen wird die bedarfsorientierte Entwicklung der Fraunhofer-Gesellschaft mitgestaltet.

Benannt ist die Gesellschaft nach dem als Forscher, Erfinder und Unternehmer gleichermaßen erfolgreichen Münchener Gelehrten Joseph von Fraunhofer (1787-1826).



# Die Fraunhofer-Gruppe Informations- und Kommunikationstechnik, IuK-Gruppe

Die Fraunhofer-Gruppe Informations- und Kommunikationstechnik (IuK-Gruppe) besteht aus 15 Instituten und zwei Gastinstituten mit mehr als 3000 Mitarbeitern und hat ein Jahresbudget von rund 180 Millionen Euro. Damit ist sie der größte Forschungsverbund für Informations- und Kommunikationstechnik in Europa und einer der größten in der Welt. Durch sich ergänzende Themen der Mitgliedsinstitute wird die Wertschöpfung der IuK-Branche in großer Breite abgedeckt.

Die Fraunhofer-IuK-Gruppe entwickelt gemeinsame Strategien und Visionen für die anwendungsorientierte informations- und kommunikationstechnische Forschung. Sie bündelt die Kompetenzen der Institute in übergreifenden Forschungsprogrammen und unterstützt die Mitgliedsinstitute bei Technologietransfer und Forschungsmarketing.

Unter dem Titel „Leben und Arbeiten in einer vernetzten Welt“ entwickelte die Gruppe im Auftrag des Bundesministeriums für Bildung und For-

schung (BMBF) ein gemeinsames Programm für die anwendungsorientierte Grundlagen- und Vorlaufforschung. In sieben Forschungsprogrammen wird an den Kernthemen einer künftigen Informations- und Kommunikationstechnik gearbeitet:

- New Generation Internet,
- Multimodale Dialoge und neue Medien,
- Knowledge and Content Engineering,
- IT-Sicherheit,
- Computing und Biologie,
- Simulation und Virtuelles Engineering,
- Innovative Anwendungen und IuK-basierte Dienstleistungen.

Die Fraunhofer IuK-Gruppe bietet ihre Kompetenzen Partnern aus Wirtschaft und öffentlicher Hand an. Das Leistungsspektrum umfasst maßgeschneiderte IT-Lösungen, kompetente Technologieberatung sowie Vorlaufforschung für neue Produkte und Dienstleistungen. Durch internationale Forschungsprogramme sind die Mitgliedsinstitute weltweit mit Wirtschafts- und For-

schungsunternehmen der IuK-Branche vernetzt.

Zehn Geschäftsfelder bündeln die Kompetenzen der IuK-Gruppe:

- Digitale Medien,
- E-Business,
- E-Government,
- Kommunikationssysteme und interdisziplinäre Anwendungen,
- Kultur und Unterhaltung,
- Medizin und Life Sciences,
- Produktion,
- Security,
- Software sowie
- Verkehr und Mobilität.

## Die Institute der Fraunhofer-IuK-Gruppe

- Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI, Sankt Augustin
- Angewandte Informationstechnik FIT, Sankt Augustin
- Arbeitswirtschaft und Organisation IAO, Stuttgart
- Autonome Intelligente Systeme AIS, Sankt Augustin
- Digitale Medientechnologie IDMT, Illmenau
- Experimentelles Software Engineering IESE, Kaiserslautern
- Graphische Datenverarbeitung IGD, Darmstadt
- Informations- und Datenverarbeitung IITB, Karlsruhe
- Integrierte Publikations- und Informationssysteme IPSI, Darmstadt
- Medienkommunikation IMK, Sankt Augustin
- Offene Kommunikationssysteme FOKUS, Berlin
- Rechnerarchitektur und Softwaretechnik FIRSAT, Berlin
- Sichere Telekooperation SIT, Darmstadt
- Software- und Systemtechnik ISST, Dortmund
- Techno- und Wirtschaftsmathematik ITWM, Kaiserslautern

## Gastinstitute der IuK-Gruppe

- Nachrichtentechnik, Heinrich-Hertz-Institut HHI, Berlin
- Integrierte Schaltungen IIS, Erlangen

*Vorsitzender*

Prof. Dr. José L. Encarnação, IGD

*Stellvertretender Vorsitzender*

Prof. Dr. Ulrich Trottenberg, SCAI

*Geschäftsführer*

Dipl.-Inform. Boris Groth

Fraunhofer IuK-Gruppe  
Friedrichstr. 60, 10117 Berlin  
Tel.: 0 30/72 61-56 60  
Fax: 0 30/72 61-56 61 9  
boris.groth@iuk.fraunhofer.de

# Simulations- anwendungen



## Situation

Computersimulation ist heute eine wichtige Technik, wenn es darum geht, schnell und kostengünstig industrielle Produkte und Prozesse zu entwickeln oder zu optimieren. Die Simulation im Computer ersetzt teure und zeitintensive experimentelle Untersuchungen mit realen Prototypen und erlaubt variantenreichere Untersuchungen in kurzer Zeit und mit geringem personellen und materiellen Aufwand. Experimentelle Untersuchungen lassen sich so steuern und reduzieren.

Die Computersimulation bietet ein großes Anwendungsspektrum als zentrale Methode des Produkt- und Prozessentwurfes, zum Beispiel:

- in großer Breite im Maschinen-, Anlagen und Fahrzeugbau,
- bei der Auslegung elektrotechnischer Geräte,
- für die Prozessgestaltung in den Branchen Chemie oder Kunststoff,
- bei Mischungs-, Filterungs- und Sedimentationsprozessen und
- beim Entwurf neuer Materialien oder pharmazeutischer Wirkstoffe.

Dabei ist Computersimulation nicht nur ein Werkzeug für große Unternehmen. Gerade auch innovative kleinere und mittlere Unternehmen können in erheblichem Maße davon profitieren.

Die Computersimulation ist darüber hinaus für viele Fragen eine unentbehrliche Methode in den Naturwissenschaften. Wetter- und Klimavorhersagen hängen von ihr ab. Die Materialwissenschaften nutzen die Möglichkeiten, mit Simulationen auf molekularen oder atomistischen Skalen Materialeigenschaften zu verstehen und die Ergebnisse für den gezielten Entwurf intelligenter neuer Materialien einzusetzen.

Mathematik, Informatik, Ingenieur- und Naturwissenschaften liefern das Handwerkzeug für die Computersimulation – von der mathematisch-physikalischen Modellierung über die Konstruktion effizienter und genauer Rechenverfahren, die Entwicklung geeigneter Software bis hin zu Berechnungen auf verschiedenen Rechnertypen und der Bewertung und Validierung von Rechenergebnissen.

## Lösungen

SCAI bietet Expertise und Lösungen in der gesamten Arbeitskette der Computersimulation. Zu unseren Kernkompetenzen im Geschäftsfeld gehören: Strömungs- und Struktursimulationen, Stoff- und Energietransport und elektrotechnische Anwendungen. Im mathematisch-numerischen Bereich sind Algorithmenentwicklungen für Systeme von Differentialgleichungen ein Arbeitsschwerpunkt. Speziell zu nennen sind Multi-Level-Verfahren sowie parallele Algorithmen, einschließlich der effizienten Portierung von Simulationssoftware auf unterschiedliche Zielsysteme.

Einen Schwerpunkt bilden gekoppelte Simulationen. Mit dem Kopplungsinterface MpCCI bietet SCAI eine weltweit führende Softwarelösung für die Kopplung von Simulationscodes.

Die Arbeiten der Abteilung gliedern sich in die folgenden thematischen Bereiche:

- Computational Engineering
- Gekoppelte Simulationen
- Numerische Verfahren
- High Performance Computing

## Perspektiven und Potenziale

Der Markt für numerische Simulation in der Produkt- und Verfahrensentwicklung wächst weiter. Darüber hinaus bleibt die numerische Simulation ein bedeutendes Mittel zum Erkenntnisgewinn in allen Natur- und Ingenieurwissenschaften.

Nicht zuletzt im Blick auf die industrielle Nutzung unterscheiden sich Felder anhand von Reifegraden. In dem klassischen, in seiner industriellen Anwendungsbreite kaum einzuschätzenden Feld der Strömungs- oder Struktursimulation existiert nach Jahrzehnten intensiver Forschung ein umfangreicher Apparat an Methoden, Software und Erfahrung. In der praktischen Umsetzung ergeben sich jedoch immer wieder neue Herausforderungen, die Erweiterungen von Modellen, Anpassung und Neuentwicklungen von Methoden erfordern. Die Kopplung von Strömungs- und Struktursimulation, von Strömung und Wärmeleitung,

von Struktur, Strömung und Elektromagnetismus bleibt eine wichtige Aufgabe für die angewandte numerische Forschung und Softwareentwicklung – vom numerisch-algorithmischen Standpunkt und im Hinblick auf vielfältige industrielle Anwendungen.

Gekoppelte Simulationen für Produkt- und Prozessentwicklung wird als Schwerpunkt der Abteilung weiter ausgebaut werden, von der Modellierung bis zur fertigen Softwarelösung. Für das Kopplungsinterface MpCCI werden Adaptern zu den führenden Simulationscodes bereitgestellt, die eine einfache, effiziente Handhabung und Realisierung gekoppelter Simulationen – unterstützt durch grafische Benutzerschnittstellen – erlauben.

Die Nutzung von Grid-Techniken gewinnt dabei eine immer größere Bedeutung. Derzeit zeichnet sich dies in Förderprojekten ab. In kurz- bis mittelfristiger Perspektive setzen wir auf eine wachsende Nachfrage im Markt.

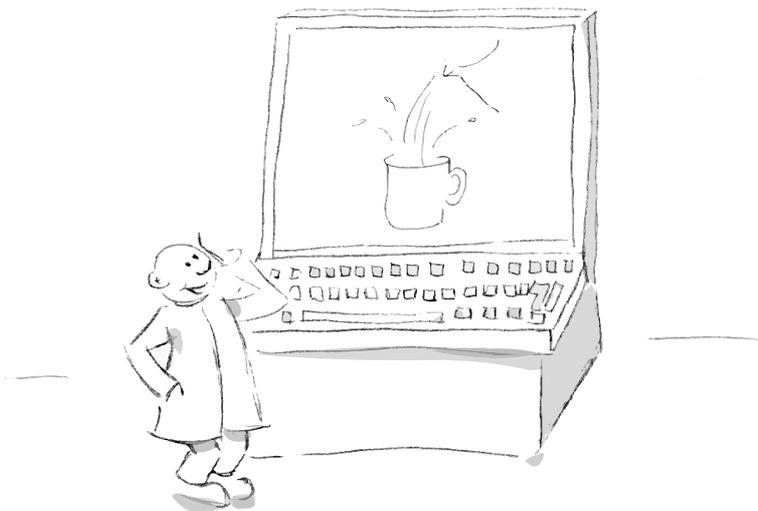
Zunehmend von praktischem Interesse sind auch Simulationen für Anwendungen in der Materialforschung oder in der pharmazeutischen Wirkstoffforschung. Dies sind besonders Multiskalen-Simulationen, die die Brücke schlagen von atomistischen, quantenmechanischen über mesoskalige Modelle bis hin zu kontinuumsmechanischen Berechnungen. Hier ist noch methodische Entwicklung zu leisten, vieles gehört der Grundlagenforschung an. Die Abteilung baut ihre Kompetenzen in Forschungsprojekten und teilfinanzierten Industrieprojekten weiter aus.



#### Kontakt

Dr. Johannes Linden (Abteilungsleiter)  
Tel.: 0 22 41 / 14-29 10  
Fax.: 0 22 41 / 14-21 67  
[johannes.linden@scai.fraunhofer.de](mailto:johannes.linden@scai.fraunhofer.de)

## Computational Engineering



### Situation

Die industrielle Nutzung und Vermarktung von Simulationstechnologie erfordert ein vertieftes Verständnis ingenieurwissenschaftlicher Fragen aus den unterschiedlichen Anwendungsbereichen und deren realitätstreue Umsetzung in mathematisch-physikalische Modelle. Mit der Gründung der Arbeitsgruppe Computational Engineering verstärkt SCAI seine Kompetenzen an dieser wichtigen Nahtstelle zwischen mathematisch-numerischer informatischer Forschung und deren ingenieurwissenschaftlicher Umsetzung.

Die Gruppe besteht aus Anwendungsingenieuren mit langjähriger Erfahrung in der industriellen Produkt- und Prozessentwicklung mit Methoden der numerischen Simulation. Sie ist eingebettet in die traditionellen Kernbereiche des Instituts und nutzt für ihre kundenorientierten Arbeiten das langjährig aufgebaute Wissen in numerischer Algorithmenentwicklung, Parallelrechnen und High Performance Computing.

Mit ihren Arbeiten trifft die Gruppe ein breites Spektrum industrieller Anwendungen, speziell im Maschinen- und Anlagenbau und in der elektrotechnischen Industrie. Schwerpunkte dabei sind:

- Strömungsmechanik,
- Ein- und Mehrphasenströmung,
- Wärme- und Stofftransport,
- Aerodynamik,
- Finite-Elemente-Methode und Strukturmechanik,
- Wärmeleitung,
- Elektrostatik und
- Elektromagnetismus.

Modellierung und Berechnung stützen sich auf die in der Industrie vorrangig benutzte Software. Dies gewährleistet einen unmittelbaren Zugang zu industriellen Entwicklungsumgebungen.

Derzeit ist für Strömungssimulationen standardmäßig FLUENT im Einsatz, für FEM-Simulationen ANSYS. Als CAD-System wird UniGraphics verwendet.

In der Ingenieurwissenschaft und der Entwicklungsunterstützung verstärken wir zukünftig vier Bereiche:

1. Unterstützung der Entwicklungsarbeit kleiner und mittlerer Unternehmen mit Hilfe der Simulation. Im Wesentlichen sind dies Unternehmen, die keinen Mitarbeiter mit dem erforderlichen Simulationswissen einstellen können oder aber deren Bedarf an Simulationsdienstleistung nur sporadisch anfällt.

2. Erweiterungen der Funktionalität der kommerziellen Simulationscodes FLUENT und ANSYS über das Code-API. Hier zielt die Gruppe auf die Integration neuer physikalischer Modelle, beispielsweise Plasmamodelle.

3. Aufbau eines neuen Kompetenzfeldes der multidisziplinären Simulation mit MpCCI. Wir bieten unseren Kunden die gekoppelte Simulation als Dienstleistung – von der Modellierung über kundenspezifische Softwarelösungen bis zur Berechnung und Ausführung.

4. Anbindung der SCAI-Kopplungssoftware an kommerzielle oder kundenspezifische Simulationscodes durch spezielle Code-Adapter.

### Kontakt

Dr.-Ing. Carsten Dehning  
 Tel.: 0 22 41/14-27 67  
 Fax.: 0 22 41/14-21 81  
[carsten.dehning@scai.fraunhofer.de](mailto:carsten.dehning@scai.fraunhofer.de)

## Beispiel: Thermo-elektromagnetische Simulation Strom führender Leiter

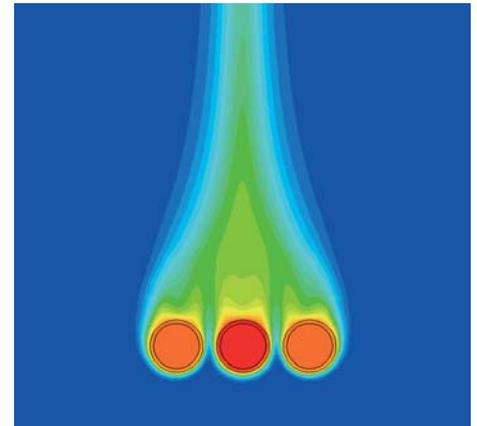
### Aufgabe

In Anlagen zur Verteilung elektrischer Energie setzt man Kabel und Sammelschienen aus Kupfer ein. Mit zunehmender Miniaturisierung und steigendem Strombedarf vieler Abnehmer steigt die Energiedichte an und damit auch die elektrische Verlustleistung. Die entstehende Wärme muss über die Luft im Gehäuse und über die Gehäusewand abgeführt werden. Im Dauerbetrieb ist die Einhaltung von Temperaturgrenzwerten sicherzustellen. Durch eine Simulation des Temperaturverhaltens vor Beginn der eigentlichen Konstruktion werden die Entwicklungsrisiken gesenkt und somit die Gesamtkosten verringert.

### Lösung

Die konvektive Strömung um die elektrischen Leitungen wird mit CFD-Methoden (Computational Fluid Dynamics) berechnet. Eine Magnetfeldberechnung mittels Finite-Elemente-Methode liefert die anisotrope Verlustleistungsdichte infolge des Stromflusses, welche mittels Kopplungsinterface MpCCI an die CFD-Simulation übertragen wird. Da die elektrische Leitfähigkeit temperaturabhängig ist, liefert die Strömungsberechnung die Temperaturverteilung als Randbedingung für die Magnetfeldberechnung.

*Dipl.-Ing. Christian Rümpler*



Temperaturverteilung um Elektrokabel infolge konvektiver Strömung

## Beispiel: Niederspannungs-Schaltlichtbogen

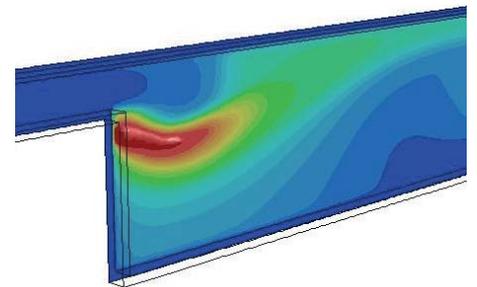
### Aufgabe

Beim Trennen elektrischer Kontakte in Luft entsteht eine elektrische Entladung mit hoher Energiedichte, der sogenannte Lichtbogen. Das Schaltgerät wird dadurch großen thermischen und dynamischen Belastungen ausgesetzt. Zur Senkung des hohen experimentellen Aufwandes während der Entwicklung ist es unerlässlich, die Belastung vorzuberechnen.

### Lösung

Zur Modellierung des Schaltlichtbogens müssen herkömmliche Navier-Stokes-Gleichungen zur Strömungsberechnung (CFD-Simulation) gelöst werden. Weiterhin sind die Maxwell-Gleichungen zur Berechnung des magnetischen und elektrischen Feldes notwendig, um die magnetische Kraftwirkung und elektrische Verlustleistung zu bestimmen. Mittels Kopplungsinterface MpCCI wird dieser Magnetohydrodynamik-Ansatz realisiert. Jedes Teilgebiet wird durch eine spezialisierte Simulationssoftware berechnet, den Datenaustausch übernimmt MpCCI.

*Dipl.-Ing. Christian Rümpler*



Temperaturverteilung bei einer Ausschaltung kurz vor dem Erlöschen des Lichtbogens

## Beispiel: Heizungsbau

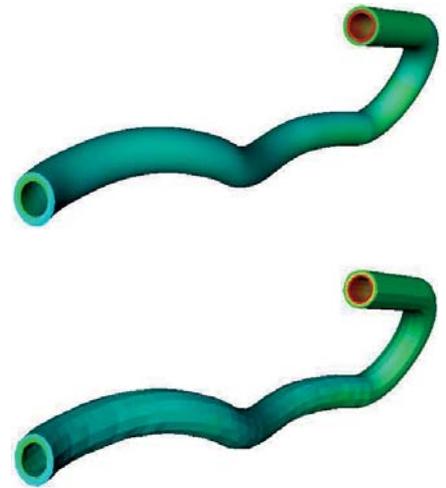
### Aufgabe

Im Heizungsbau treten in den einzelnen Bauteilen teilweise starke Temperaturunterschiede auf, beispielsweise zwischen der Brennkammer und der äußeren Umgebung. Durch die Temperaturgradienten in den Materialien entstehen Spannungen, also mechanische Belastungen für die Bauteile. Für eine numerische Simulation der Bauteilbelastung sind Wärmeleitung und die Verformung durch thermische Spannungen miteinander zu koppeln. Für beide Effekte liegen je einzeln bewährte Simulationsprogramme vor. Ein führender Hersteller von Heizungsanlagen erteilte SCAI den Auftrag, eine Softwarelösung für die Übertragung von Berechnungsergebnissen zwischen den einzelnen Codes zu erstellen.

### Lösung

Die besondere Problematik besteht in der sehr unterschiedlichen Struktur der verwendeten Diskretisierungsgitter. Für eine Abbildung (Mapping) der Temperaturdaten eines Gitters auf ein anderes müssen geometrische Nachbarschaften zwischen den Gitterelementen (Knoten, Flächen- und Volumenelemente) automatisch gefunden werden. Für die Übertragung sind dann geeignete Interpolationsschemata bereitzustellen. Mit der in MpCCI enthaltenen umfangreichen Bibliothek von Interpolationsroutinen wurde eine Lösung erstellt, die ein Mapping beliebiger Daten zwischen Gittern unterschiedlicher Struktur erlaubt.

*Dipl.-Phys. Cornelia Richter*



Die Temperaturen auf dem Sender-Gitter (Bild oben) und dem Empfangsgitter zeigen sehr gute Übereinstimmungen.

## Beispiel: Mapping bei Umformsimulationen

### Aufgabe

Bei der Entwicklung moderner Fahrzeugmodelle ist ein möglichst geringes Gewicht der Konstruktion ein wichtiges Entwicklungsziel, vor allem um Kraftstoff zu sparen. Gleichzeitig sollen die leichteren Werkstoffe und Bauteilkonstruktionen, beispielsweise hochfeste Mehrphasenstähle bei der Konstruktion von Leichtbaukomponenten, den gestiegenen Anforderungen an die passive Sicherheit gerecht werden. Die Entwicklungsingenieure testen deshalb mit Aufprallsimulationen die Sicherheit der Fahrgäste. Die Ergebnisse der numerischen Simulation geben Aufschluss darüber, wie sich die Materialien und

die Gestaltung der Karosserieteile auf die Fähigkeit auswirken, Deformationsenergie zu absorbieren. Die Aussagekraft dieser Ergebnisse hängt maßgeblich von den anfänglich eingegebenen Materialparametern ab, also von der Berücksichtigung der Materialhistorie. Für die Aufprallsimulation von Karosseriekomponenten aus Mehrphasenstählen bedeutet dies, dass die durch den Umformprozess entstandenen Kaltverfestigungen und Blechdickenänderungen einkalkuliert werden müssen. Erste Studien belegen die Bedeutung dieser Effekte für die Karosseriekomponenten unter Aufprallbelastung. Die Ergebnisse der Umformsimulation für die Aufprallsimulation zu verwenden liegt nahe, da es heute üblich ist, den gesamten Ferti-

gungsprozess der Fahrzeuge numerisch zu simulieren.

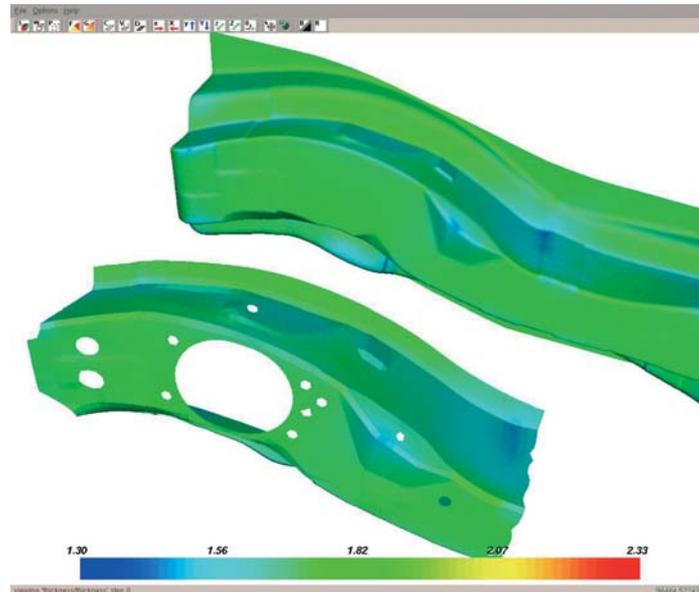
Aufgrund von Inkompatibilitäten zwischen Crash-Codes und Umform-Codes, unterschiedlicher Vernetzung der zu simulierenden Teile oder Geometrieabweichungen, bedingt durch Beschnitt und elastische Rückfederung des umgeformten Bleches, ist dieser Schritt jedoch bislang kaum unternommen worden. Lösungsansätze von Software-Unternehmen messen den Bewertungskriterien oft zu wenig oder keine Bedeutung zu.

## Lösung

In Zusammenarbeit mit der Forschungsvereinigung Automobiltechnik (FAT) entwickeln das Fraunhofer-Institut SCAI und die Universität Stuttgart (ISD) ein Mappingtool zur Übertragung von Ergebnissen der Umformsimulation, wie Blechdicken und Materialverfestigung in die Aufprallsimulation. Die SCAI-Kopplungssoftware MpCCI übernimmt dabei die Aufgabe, die geometrische Nachbarschaft zwischen den inkompatiblen Gitterdiskretisierungen zu bestimmen, die physikalischen Größen aufeinander abzubilden und die Daten auszutauschen.

Dazu schreibt das Umformsimulationstool für jedes umgeformte Bauteil separat Netze und Ergebnisse in Dateien. Das Netz des Codes zur Aufprallsimulation liegt ebenfalls als Datei vor.

Das Mappingtool liest für jedes Bauteil getrennt die Umformnetze, die Umformergebnisse und das Crashnetz ein. Die Netzdiskretisierungen des Umformmodells werden anhand von Informationen aus einer Konvertierungsdatei in das gemeinsame Koordinatensystem transformiert. Anschließend werden die physikalischen Größen auf das Crashnetz interpoliert. Es können skalare Größen wie Dickenverteilung und plastische Vergleichsdehnung, auch bei unterschiedlichen Out-of-plane-Integrationsverfahren der Shell-Elemente in Umformung und Crash, in einem Durchgang übertragen werden. Für jedes Bauteil entsteht durch dieses Mappingverfahren ein Datensatz, in dem die Ergebnisse der Umformrechnung als Initialwerte auf der Crashediskretisierung vorliegen. Das Crashmodell mit gemappten Initialwerten wird in das code-spezifische Crashformat konvertiert und exportiert. Zur Zeit unterstützt MpCCI die ASCII-Dateiformate der Umformsimulations-



Visualisierung der Blechdickenverteilung mit ccvis. Im Hintergrund das Resultat der Tiefziehsimulation des Bauteils, im Vordergrund das gleiche, jetzt zugeschnittene Bauteil im Crashmodell mit gemappten Blechdicken.

codes LS-Dyna, AutoForm und PAM-Stamp, sowie der Crashsimulationcodes RADIOSS, LS-Dyna und PAM-Crash. Zur vergleichenden Visualisierung der Mappingausgabe wird das Eingabeformat des MpCCI-Visualisierers ccvis unterstützt. Die transformierten Umformdaten können ferner mit Hilfe des von ISD entwickelten Bewertungstools untersucht werden, um Hinweise auf mögliche Probleme in der Abbildungsgenauigkeit und Hilfestellungen zur Behebung zu bekommen.

*Dr. Jörg Peetz*

## Beispiel: Filteranlagen

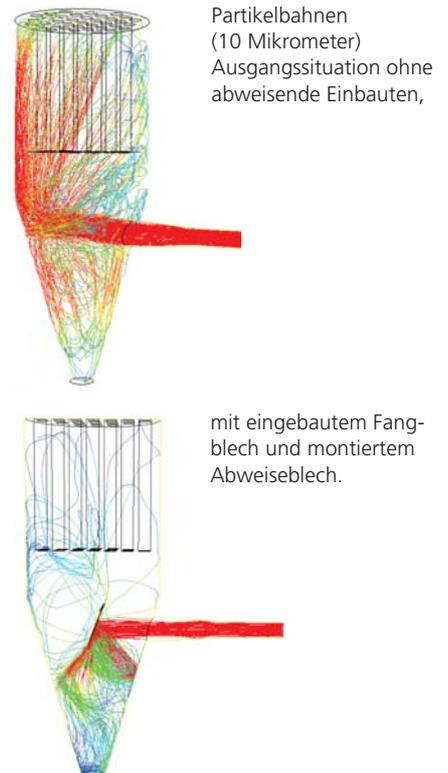
### Aufgabe

In einer Filteranlage werden Staub oder Produkte wie Waschpulver, Kunststoffpulver oder Titandioxid abgeschieden. Dabei ist im Fall stark abrasiver Stäube wichtig, dass die Partikeln nicht mit hoher Geschwindigkeit auf das Gewebe der Filterschläuche treffen und diese vorzeitig zerstören. Die Auswirkungen beim Einbau von Schutzblechen auf die Strömung und die Flugbahnen der Partikeln und deren Geschwindigkeiten beim Auftreffen lassen sich im Rechner vor Beginn der eigentlichen Konstruktion virtuell untersuchen.

### Lösung

Eine Lösung mit vertretbarem Aufwand wäre der Einbau eines Prallbleches in den Bunker der Filteranlage. Dieses Prallblech dient der Reflexion des eingebrachten Staubes weg von den Filterschläuchen. Mehrere Simulationen unterschiedlicher Formvarianten und Abmessungen des Bleches und verschiedener Winkelanordnungen zeigen Lösungsmöglichkeiten. Im Ergebnis wird die Aufprallgeschwindigkeit der Partikeln verringert. Somit erhöht sich die Lebensdauer der Filterschläuche, und die Kosten für den Betreiber verringern sich.

*Dr.-Ing. Carsten Dehning*



## Beispiel: Mahlanlagen

### Aufgabe

In einer Mühle werden sehr teure Stoffe wie Tonerpulver oder Pulverlack zerkleinert. Ziel ist es, das zunächst grobe Mahlgut so zu zerkleinern, dass die Partikelgrößenverteilung des gemahlene Gutes vorgegebenen Anforderungen entspricht und weder zu fein noch zu grob die Mühle verlässt. Zu feines Gut wird nach Beendigung des Mahlvorganges mit Hilfe von Sichern aussortiert und ist teurer Abfall. Diese Menge gilt es zu reduzieren. Die Strömungsführung ist daher so zu gestalten, dass einmal gemahlene Partikeln die Mühle unmittelbar verlassen, wenn deren Größe im spezifizierten Bereich liegt. Noch grobe Partikeln sollen im Mahlkreislauf zirkulieren, bis ihre Größe die Maximalwerte unterschreitet. Um zu genaueren Aussagen über das Verhalten des Mahlkreislaufes in

der Mühle zu gelangen, helfen Strömungssimulationen. Nur eine Simulation erlaubt überhaupt den Blick in das System Mühle und die innere Strömung, da reale Messungen kaum möglich sind.

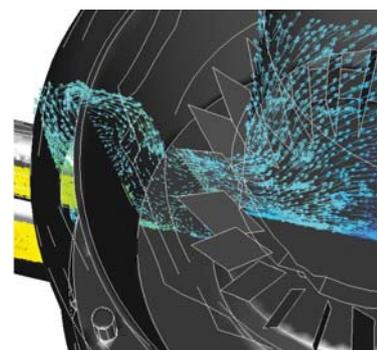
### Lösung

Es wurde ein aufwändiges Rechenmodell der Mühle erstellt und unter Berücksichtigung der rotierenden Teile das Strömungsfeld der Zwei-Phasen-Strömung berechnet. Die Ergebnisse der Rechnung liefern einen detaillierten Einblick in das reale Bewegungsverhalten der einzelnen Partikeln unterschiedlicher Größen. Eine genaue Analyse und Bewertung der Verhältnisse zeigt Ansatzpunkte für Verbesserungen auf.

*Dr.-Ing. Carsten Dehning*



Stromlinien in einer Mühle



Geschwindigkeitsfeld in einer Schnittebene (am Produkteintritt).

# MpCCI 2.0 – Industriestandard für gekoppelte Simulationen



## Aufgabe

Das Computational Engineering bietet leistungsfähige Verfahren und Programme, um beispielsweise Strömungsmechanik, Strukturanalyse und Elektromagnetismus zu simulieren. Gestiegene Anforderungen an die Realitätstreue von Simulationen und komplexere technische Fragen erfordern es, Simulationen miteinander zu koppeln. Nur so gelingt es, die Wechselwirkungen technischer und physikalischer Effekte realitätsgenau in mathematisch-numerischen Modellen abzubilden.

## Lösung

Mit der Software MpCCI bietet SCAI die weltweit führende Lösung für das Problem der Simulationskopplung. Über eine offene Schnittstelle können Codes verschiedener Hersteller und unterschiedlicher Anwendungsdisziplinen direkt miteinander gekoppelt werden. MpCCI übernimmt dabei die Aufgabe, die geometrische Nachbarschaft zwischen den inkompatiblen Gitterdiskretisierungen zu bestimmen, die physikalischen Größen aufeinander abzubilden und den Datenaustausch durchzuführen. Die Unterstützung paralleler Codes auf verteilten Rechnerumgebungen oder Höchstleistungscomputern ist dabei selbstverständlich.

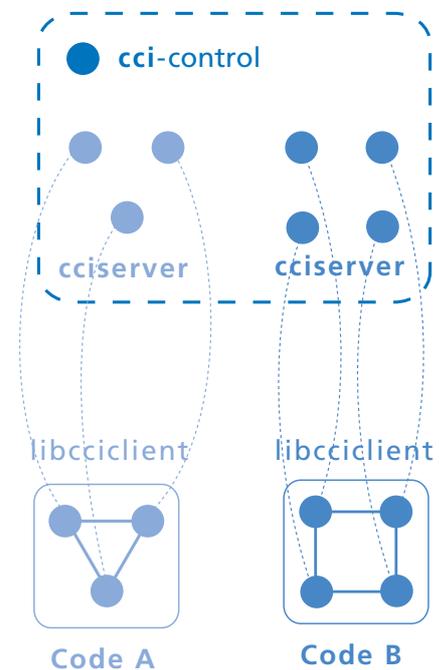
## Ergebnisse

MpCCI ist als Softwareprodukt seit Anfang 2000 auf dem Markt. Die im Frühjahr 2003 fertig gestellte Version MpCCI 2.0 besitzt gegenüber ihren Vorgängern deutlich verbesserte Transformations- und Abbildungsverfahren. Die Softwareumgebung zeichnet sich durch ein Visualisierungstool und eine flexiblere Kommunikationsschicht aus.

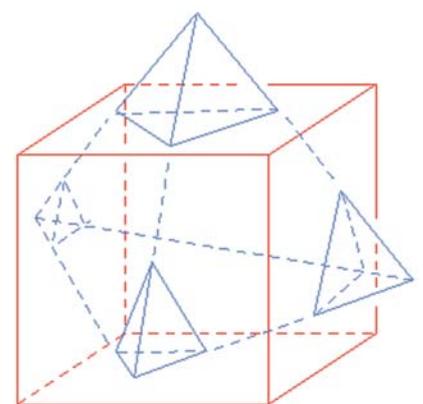
### Interpolationsverfahren für 3D

MpCCI 2.0 erweitert die Dimension der Kopplungsgebiete. Die Schnittstelle unterstützt jetzt direkt 1D-Linienkopplungen und 3D-Volumenkopplungen. Als Sonderfall werden auch sphärische Elemente erlaubt, zum Beispiel bei gekoppelten Klimamodellen.

Die Umrechnung zwischen Koordinatensystemen sowie die korrekte Transformation zwischen unterschiedlichen SI-Einheiten sind integraler Bestandteil der Schnittstelle.



Das Serverkonzept von MpCCI



Dreidimensionale Kopplung

### Kommunikationsebene

Die MpCCI-Schnittstelle ist dafür ausgelegt, parallele Simulationsprogramme effizient zu koppeln. Dabei stützt sich MpCCI auf die standardisierte Kommunikationsplattform MPI für die Kommunikation zwischen den Prozessen und Programmen. Ein Problem bei den bisherigen MpCCI 1.x-Versionen bestand darin, die Kompatibilität zwischen den MPI-Ebenen in den gekoppelten Codes und MpCCI sicherzustellen.

Durch einen neuen Mechanismus – den Kopplungsserver – ist es jetzt möglich, Simulationsprogramme mit beliebigen MPI-Varianten miteinander zu koppeln. Die Simulationsprogramme kommunizieren mit MpCCI jetzt nicht mehr in einer MPI-Domain, sondern über externe Verbindungen (etwa Sockets). Damit ist es jetzt möglich, gekoppelte Simulationen auf sehr heterogenen Architekturen (z.B. Workstationcluster und Superrechner) ablaufen zu lassen.

### Kopplungsalgorithmen

Wesentlicher Bestandteil der Simulationskopplung ist der Kopplungsalgorithmus, welcher die Abfolge des Datenaustauschs zwischen den Codes beschreibt. Im Projekt „Gekoppelte Simulationen in Wissenschaft und Technik COSIWIT“ (gefördert vom Bundesministerium für Bildung und Forschung) werden einfache und zugleich extrem leistungsfähige Algorithmen entwickelt. Ein Beispiel ist der Farhat-Lesoine-Algorithmus, dessen Implementierung auf dem MpCCI-Konzept der Synchronisationspunkte beruht.

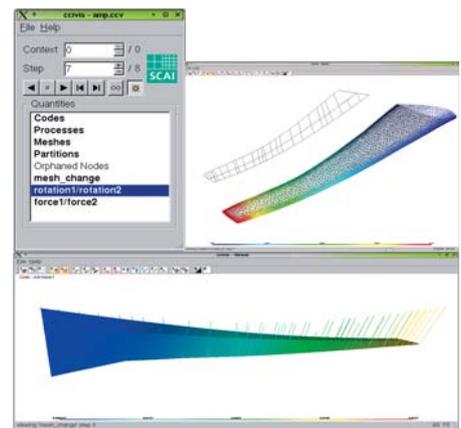
### Visualisierung

MpCCI 2.0 bietet als Zusatzmodul ein Visualisierungsmodul zur gezielten Betrachtung aller Daten, die dem Kopplungsinterface bekannt sind. Der Visualisierer ermöglicht,

- die Kopplungsregionen und Nachbarschaftsinformationen im Detail zu beobachten,
- die verschickten Größen auf ihren jeweiligen Diskretisierungen zu vergleichen sowie
- die Darstellungsmodi an die jeweiligen Anwendungen anzupassen.

### Verwertung

MpCCI hat sich inzwischen als weltweiter Standard für die Simulationskopplung etablieren können und wird weltweit als Lizenzprodukt angeboten. In Fernost übernimmt CD adapco Japan die Rolle des MpCCI-Vertriebspartners für Japan, China und Korea. Führende Softwarehäuser wie ANSYS, CD adapco, CFX, Fluent, HKS, INTES und MSC unterstützen den MpCCI-Standard – mit den meisten von ihnen hat SCAI Verträge für die Weiterentwicklung und Verwertung abgeschlossen. Um die MpCCI-Schnittstelle weit zu verbreiten, wurden die ersten Versionen der Software kostenfrei angeboten. Die aktuelle Version wird als Lizenzprodukt vermarktet.



Ansicht des MpCCI-Visualizers

## Anwendungsbeispiele

Mit MpCCI haben wir inzwischen gemeinsam mit Partnern aus Industrie und Forschung viele Aufgaben aus der industriellen Praxis gelöst:

Automobilindustrie:

- Berstberechnungen von Airbag-Gasgeneratoren
- Schwappen in Benzintanks
- Übertragung von Umformergebnissen auf Aufprallsimulationen

Luftfahrt:

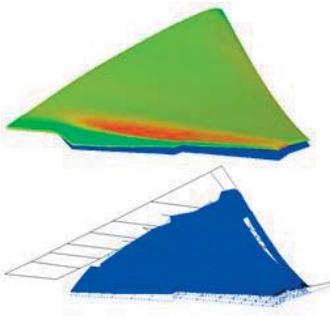
- Aeroakustik
- Aeroelastik
- Temperatureinträge in Raumfahrzeugen
- Erwärmung von Turbinenschaufeln

Engineering:

- Belastungsrechnungen für Polymixer
- Lichtbogenberechnung
- Berstsimulation (COSIWIT)
- Laserschweißen (COSIWIT)



Simulation des Schwappens von Benzin im Tank © Daimler Chrysler AG



Aeroelastikberechnung der Tragfläche eines Flugzeugs © EADS



Darstellung der Belastung eines Polymixers © Sulzer Innotec AG

## Perspektiven

Die seit Anfang 2003 in Aufbau befindliche Engineering-Gruppe ermöglicht es SCAI, im eigenen Hause Simulationsrechnungen durchzuführen und dabei die Schnittstelle MpCCI als zentrales Hilfsmittel für multidisziplinäre Aufgaben einzusetzen. Ein besonderes Augenmerk legt SCAI dabei auf Fluid-Struktur-Interaktionen und Strömungs-Magneto hydrodynamik-Kopplungen.

Neben diesen reinen Simulationskopplungen erreichen SCAI immer mehr Anfragen nach ‚Mappinglösungen‘, bei denen die Simulationsergebnisse einer Disziplin als Anfangsbedingung für nachfolgende Berechnungen in anderen Disziplinen sind. So kooperiert SCAI zur Zeit mit dem VDA/FAT-Arbeitskreis Nummer 27, um Ergebnisse von Umformsimulationen mittels MpCCI-Technologie auf Aufprall-Modelle abbilden zu können. Weitere Anfragen beziehen sich auf die Übertragung von Temperaturfeldern aus der Strömungsberechnung als Einträge in die Struktursimulation.

## Ausgewählte Partner

CD adapco, Yokohama (Japan);  
 CD adapco, London;  
 ABAQUS, Plymouth (Michigan, USA);  
 Ansys, Canonsburg (Pennsylvania, USA);  
 CFX, Otterfing;  
 Fluent, Darmstadt;  
 Intes, Stuttgart;  
 MSC.Marc, München, Gouda;  
 Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR), Köln;  
 European Aeronautic Defense and Space Company (EADS), München;  
 DaimlerChrysler, Stuttgart;  
 JAERI, Tokio;  
 Moeller, Bonn;  
 SULZER Innotec, Winterthur.

## Kontakt

Dipl.-Informatiker Klaus Wolf  
 Tel: 0 22 41/14-25 57  
 Fax: 0 22 41/14-21 81  
 klaus.wolf@scai.fraunhofer.de

## COSIWIT – Gekoppelte Simulationen in Wissenschaft und Technik

### Aufgabe

Ziel des COSIWIT-Projektes war es, Software zur numerischen Simulation und zur Visualisierung gekoppelter Aufgaben zu entwickeln. Diese Software sollte an einer breiten Palette praxisrelevanter Probleme erprobt werden und das Potenzial von Kopplung aufgezeigt werden. Die betrachteten Anwendungen kamen aus den Bereichen Strömungs-Struktur-Wechselwirkung, Materialbearbeitung mit Laser, zerstörungsfreie Materialprüfung mit Ultraschall oder Thermographie, Strukturverformung durch elektromagnetische Kräfte.

Die Klammer für das Projekt bildete die SCAI-Kopplungssoftware MpCCI (siehe dazu ausführlich Seite 25ff), die im Projekt COSIWIT weiterentwickelt und zur Simulation der Anwendungen erfolgreich eingesetzt wurde.

### Lösung

Mit dem im Projekt COSIWIT auf- und ausgebauten Know-how in der Kopplung von Simulationsprogrammen konnten praktische Anwendungsprobleme der Projektpartner gelöst werden. Die Analyse der Anwendungen führte zur Verbesserung der Funktionen von MpCCI, die den Anwendern dann wieder zugute kamen. Ein Schwerpunkt waren die Kopplungsalgorithmen. Sie beschreiben, wann und wie zwei zu koppelnde Simulationsprogramme über MpCCI ihre Daten austauschen. SCAI entwickelte Kopplungsalgorithmen, bei deren Implementation nur geringfügige Änderungen an den zu koppelnden Programmen notwendig sind.

### Ergebnisse

Es stellte sich heraus, dass sehr einfache Kopplungsalgorithmen bei den betrachteten Anwendungen zu einer konvergenten Lösung des gekoppelten Problems führten. Oft genügte eine Iteration zwischen den zu koppelnden Codes mit Datentransfer über MpCCI. Dieses Vorgehen muss teilweise durch Unterrelaxation und angemessene Behandlung der verschiedenen Zeitschritten in den Codes ergänzt werden.

Die Literatur zur numerischen Lösung gekoppelter Probleme bestätigt den Erfolg einfacher Kopplungsalgorithmen. Sie nennt aber auch komplexere Alternativen.

Ein Beispiel hierfür ist der Kopplungsalgorithmus von Farhat-Lesoine, der durch einen geschickten Versatz der Zeitpunkte in den zu koppelnden Codes eine höhere Genauigkeit in der Zeit erreicht. Er wird in die nächste Version von MpCCI als Beispiel-Implementation integriert.

Domain-Decomposition-Verfahren sind zur Parallelisierung der numerischen Lösung partieller Differentialgleichungen weit verbreitet. Eine Diplomarbeit am Fraunhofer-Institut SCAI hat kürzlich gezeigt, dass sich diese Verfahren auf die Lösung ge-



Bild 2: Versuchsapparat zur Ultraschallprüfung am Fraunhofer-Institut IZFP

koppelter Probleme übertragen lassen. Inhalt der Arbeit ist die Simulation der Thermographie bei Erwärmung mit einer Blitzlampe.

Beispielhaft für viele Anwendungen werden hier zwei Lösungen mit gekoppelten Simulationen am Fraunhofer-Institut für Kurzzeitdynamik (EMI) in Freiburg und am Fraunhofer-Institut für Zerstörungsfreie Prüfverfahren (IZFP) in Saarbrücken beschrieben.

Die Aufgaben des Fraunhofer-Instituts EMI fallen in den Bereich der Strömungs-Struktur-Kopplung und beschäftigen sich vorrangig mit dem Strukturverhalten unter Druckstoßbelastungen. Auf diesem Gebiet arbeitet das EMI auch experimentell. Typische Forschungsfragen untersuchen

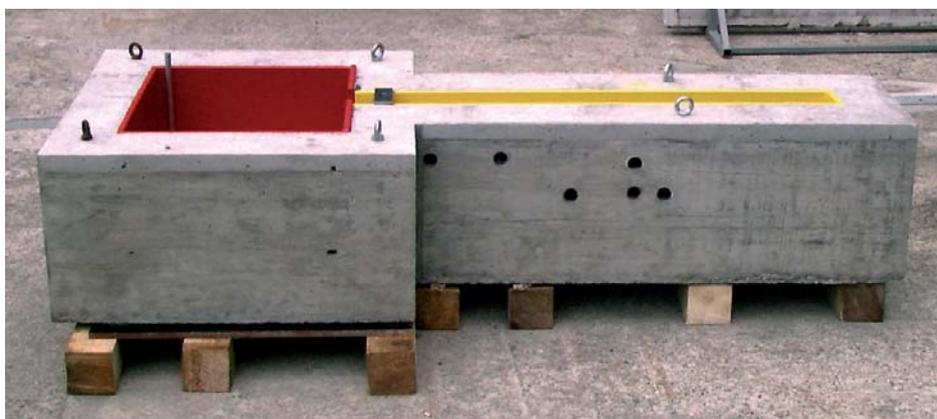


Bild 1: Versuchskanal am Fraunhofer-Institut EMI

zum Beispiel die Strukturbelastung infolge von Explosionen bei Unfällen oder Terroranschlägen. Die Simulation solcher Szenarien ist grundlegend für eine zuverlässige Bewertung beispielsweise der Sicherheit von Anlagen und Gebäuden sowie für die Entwicklung innovativer Schutzmechanismen.

Zur numerischen Simulation koppelte man die EMI-Programme APOLLO (Strömungsberechnung basierend auf Finiten Volumen) und SOPHIA (Finite-Elemente-Verfahren für Strukturberechnungen) über MpCCI: Für eine Unterwasserdetonation in einem offenen Stahlkanal mit Betonummantelung (siehe Bild 1) liegen experimentelle und numerische Ergebnisse vor. Die gekoppelte numerische Simulation stimmt sehr gut mit dem Experiment überein. Eine reine Strömungssimulation unter der Annahme starrer Wände überschätzt dagegen deutlich die auftretenden Druckspitzen. Die Simulationen zeigen, dass die Reaktion der annähernd starren Struktur auf die Ergebnisse nicht vernachlässigt werden darf.

In vielen Bereichen der Industrie wächst der Wunsch nach zerstörungsfreien Ultraschallprüfmethoden, die ohne flüssige Kopplungsmittel auskommen. Beispiele sind die Fertigungs- und wiederkehrende Prüfung großflächiger Strukturen in der Luft- und Raumfahrtindustrie. Koppelmittel behindern den Prüfablauf, erlauben nur schwer die Aufrechterhaltung konstanter Ankoppelbedingungen und sind mit oft großem Reinigungsaufwand nach der Prüfung verbunden. Die Schallübertragung über Luft bietet deshalb wesentliche Vorteile und wird daher am Fraunhofer-Institut IZFP experimentell und numerisch untersucht.

Zur numerischen Modellierung setzt das IZFP den am Institut entwickelten semianalytischen Simulationscode GPSS ein. Dieser wurde separat für Luft und Bauteil – entsprechend ihrer kontinuumsmechanischen Eigenschaften – angepasst und dann über MpCCI gekoppelt. Die gekoppelte numerische Simulation führte zur Entwicklung eines

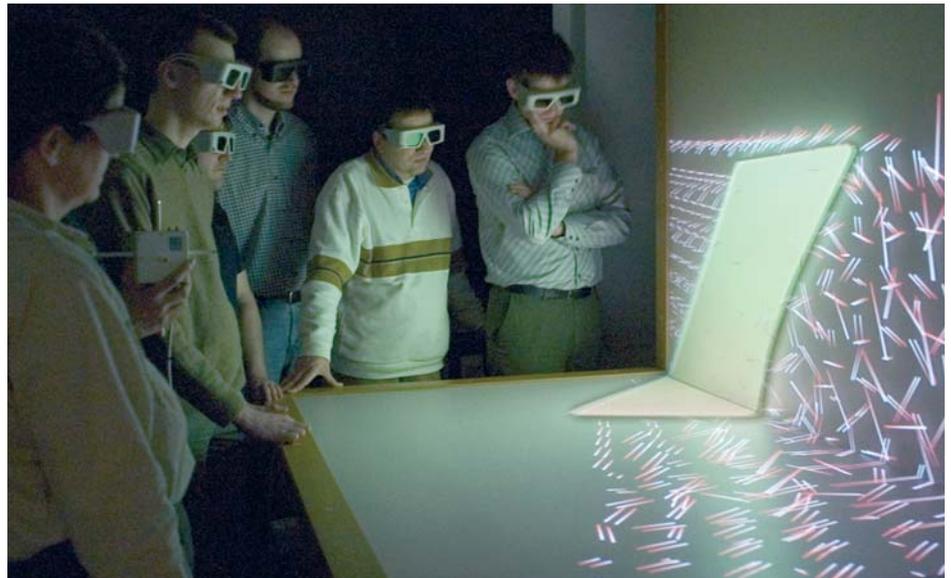


Bild 3: Visualisierung einer Strömungs-Struktur-Wechselwirkung auf der Workbench

Foto: J. Sauerland

neuen, besseren Prüfverfahrens mit Luft als Koppelmittel. Bild 2 zeigt einen Versuchsapparat, dessen zunächst unbefriedigende Messergebnisse in einer Simulation reproduziert wurden. Dadurch ließen sich die zugrunde liegenden physikalischen Prozesse verstehen.

Die Fraunhofer-Institute IGD und IMK implementierten Tools zur Visualisierung gekoppelter Rechnung. Bild 3 zeigt eine vom IMK visualisierte Strömungs-Struktur-Wechselwirkung, die am EMI berechnet wurde.

### Perspektiven

Die Anwender setzen die in COSIWIT entwickelten Simulationstools zur Problemlösung für industrielle und öffentliche Auftraggeber ein. Der erfolgreiche Einsatz von Kopplungen bei den oben beschriebenen Beispielen dient SCAI als Referenz. So wurden diese Anwendungen auf dem MpCCI-User-Forum Ende März 2004 vorgestellt.

Im beantragten Projekt VIOLA soll ein neues Anwendungsfeld, die gekoppelte Simulation von Kristallwachstum im Silizium, erschlossen werden. Beispielfähig soll für diese Anwendung die Kopplung zweier Codes gridfähig gemacht werden und die Performance auf

dem VIOLA-Grid vermessen werden. Die Zusammenarbeit mit dem Fraunhofer-Institut ILT im Bereich „Simulation in der Lasertechnik“ wird fortgesetzt. Es ist geplant, den Kopplungsgedanken auf die Kombination verschiedener Modelle zu verallgemeinern, beispielsweise auf die Kopplung von Molekulardynamik und kontinuierlichen Modellen.

### Projektdateien

COSIWIT lief vom 1.4.2001 bis zum 31.12.2003. Partner waren die Fraunhofer-Institute EMI, IGD, ILT, IMK, IZFP und SCAI (Verbundkoordinator) und die Hochschulen RWTH Aachen, TU Braunschweig und Universität Rostock. Das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) förderte COSIWIT im Programm „Leben und Arbeiten in einer vernetzten Welt“ im Schwerpunkt „Simulation und Virtuelles Engineering“ unter dem Förderkennzeichen 01AK950.

### Kontakt

Dr. Barbara Steckel  
Tel: 0 22 41/14-27 68  
Fax: 0 22 41/14-21 81  
barbara.steckel@scai.fraunhofer.de

## IT- und Numerikmethoden für Wettervorhersage und Klimasimulation



### Aufgabe

Ziel im Projekt SACADA ist es, räumlich und zeitlich hochaufgelöste globale Karten bereitzustellen, die Spurengase in der Atmosphäre zeigen. Die notwendigen Daten liefern Bodenmessstationen oder Satelliten wie ENVISAT. Satellitendaten lassen sich in der Regel nicht direkt mit bodengebundenen Messwerten vergleichen, da es nur selten ein räumliches und zeitliches Zusammentreffen der Messungen gibt. Es sind daher Assimilationsverfahren zu entwickeln, die aus Satellitendaten Verteilungen zu beliebigen Zeiten ableiten können.

Räumliche und zeitliche Datenassimilationsalgorithmen sind schon bei niedrig-dimensionalen Anwendungen hochgradig komplex. In realen Fällen liegen die erforderlichen Rechenleistungen im Spitzenbereich des heute wissenschaftlich-technisch Machbaren. Zusammen mit Chemie-Transport-Modellen für mehr als vierzig Spurenstoffe ist es erforderlich, leistungsfähige Hardware effizient zu nutzen. Das stellt höchste Anforderungen an die verwendeten Datenstrukturen, Algorithmen und Programmierkonzepte. Bei der Diskretisierung globaler Atmosphärenmodelle kommen in der Regel zwei Ansätze zum Zuge: Gitterpunktmodelle und Spektralmodelle. Spektralmodelle verwenden Kugelflächenfunktionen. In den 1970er Jahren verdrängten Spektralmodelle

aus mehreren Gründen Gittermodelle. Da das dem Assimilationsalgorithmus zugrunde liegende Chemie-Transportmodell fast ausschließlich nichtlineare Prozesse berechnet, ist ein spektraler Ansatz wenig hilfreich. Traditionelle globale Modelle leiden darunter, dass sich die Gitterpunkte in Polnähe drängen, und sie leiden unter den Polsingularitäten. Neben der unnötig feinen Auflösung in zentraler Richtung und der damit induzierten Inhomogenität des Gitters bewirken die durch das Courant-Friedrich-Levi-Kriterium bedingten Zeitschrittbeschränkungen erhebliche Effizienzeinbußen. Zudem wird in Kauf genommen, dass physikalische und chemische Parameter an polnahen Gitterpunkten unnötig dicht berechnet werden.

### Lösung

Im neuen Global-Modell GME des Deutschen Wetterdienstes (DWD) wird ein Icosaeder-Gitter (Bild 1) verwandt, bei dem der Feuchtetransport mit einem Semi-Lagrange-Ansatz berechnet wird. Dieser Ansatz verwendet ein Gitter, das auf der Triangulierung eines sphärischen Icosaeders beruht. Die Vorteile des Icosaeders gegenüber einem traditionellen Gittermodell liegen in der nahezu gleichförmigen Verteilung der Gitterpunkte. Somit entfallen die sonst

erzwungenen Rechnungen mit unnötig hoher Auflösung. Gegenüber spektralen Modellen hat das Icosaedermodell die Vorteile, keine auf Parallelrechnern kommunikationsaufwendigen Fourier- und Lagrangetransformationen zu benötigen. Die Diskretisierung des Icosaedergitters erzeugt die Lokalität der mathematischen Operatoren. Die Lokalität liefert eine hinreichende Vielfalt möglicher Parallelisierungsstrategien. Die Verwendung des Standards Message Passing Interface (MPI) sichert die Portabilität und damit eine langfristige Nutzung der Software auch auf künftigen Rechnerarchitekturen. In der Regel verwendet man zweidimensionale Gebietszerlegungsverfahren zur Verteilung der Daten auf die Prozessoren. In der Vertikalrichtung wird aufgrund der starken meteorologischen Abhängigkeiten nicht partitioniert.

SCAI bietet die Transportmodellversion auf der Basis des Globalmodells GME an. Hierzu erledigen wir umfangreiche Programmier- und Umstellungsarbeiten an dem globalen Wettervorhersagemodell des DWD. Wir untersuchen das Laufzeitverhalten der Software für den Routineinsatz. Dabei berücksichtigen wir Algorithmen sowie Rechnerarchitektur und optimieren die Software.

## Ergebnisse

Zeitschrittweiten und künstliche Diffusion bei unterschiedlichen Auflösungen haben wir am GME bei unterschiedlichen Auflösungen bereits ausgewertet. Da die Produktionsläufe auf einem Parallelrechner erfolgen sollen, bestand der erste natürliche Test darin, die Skalierungseigenschaften des GME bei niedriger Auflösung und vier Prozessoren zu analysieren. Bei den untersuchten Gittergrößen erwies sich die parallele Effizienz als gut. Diese Aussage gilt auch, wenn in bestimmten Abständen Zwischenstände in Dateien geschrieben werden. Diese Beobachtung ist Grundlage der Designentscheidung für das geplante Softwaresystem.

Danach wird das GME als Vorhersageprogramm benutzt, um die relevanten meteorologischen Daten (insbesondere die Semi-Lagrange-Trajektorien) auf mehr als vierzig horizontalen Schichten (bis zu einer Höhe von etwa 65 Kilometern) zu sammeln. Diese werden in Dateien geschrieben, um sie im adjungierten Verfahren und im Chemie-Transportteil zu benutzen. Die Daten werden in den genannten Teilschritten wieder eingelesen, was wesentlich effizienter ist, als sie erneut zu berechnen. Dazu haben wir eine eigene SACADA-IO-Bibliothek in C++ entwickelt.

Bild 2 belegt das gute Skalierungsverhalten des GME auf bis zu neun Prozessoren eines PC-Clusters für eine Unterteilung der zehn Ikosaederdiamanten in jeweils 32 mal 32 und 48 mal 48 Teilintervalle anhand einer Tagesvorhersage. Bei beiden Auflösungen lässt sich die Rechenzeit durch den Einsatz weiterer Prozessoren reduzieren. Mehr als 16 Knoten eines PC-Cluster bringen jedoch keinen Gewinn mehr. Für eine Eintagesberechnung mit der hohen Auflösung von 128 mal 128 je Diamant benötigte ein PC-Cluster mit 32 Prozessoren knapp 30 Minuten Rechenzeit.

Die genannte Designentscheidung ist auch durch den Vergleich von Vorhersagerechnungen mit unterschiedlichen physikalischen Modellen (Strahlung, Konvektion und Vertikalturbulenz) begründet. Einzelne Modellkomponenten auszuschalten reduziert die Rechenzeit, liefert aber bereits bei Eintagesvorhersagen deutliche Qualitätsunterschiede. Bild 3 zeigt oben die relative Luftfeuchtigkeit, berechnet mit allen physikalischen Prozessen. Die untere Grafik zeigt die gleiche Größe, berechnet ohne physikalische Prozesse. Der Qualitätsunterschied ist offensichtlich. Für das Chemie-Transportmodell wird das volle meteorologische Modell des GME benutzt. Durch den systematischen Vergleich von Ergebnissen mit unterschiedlichen Parametern und Auflösungen ergibt sich, dass eine Auflösung von 32 x 32 Teilintervallen je Ikosaederdiamant hinreichend ist, zumal mehr als 40 chemische Spezies auf diesem Gitter mit mehr als 40 Höhenschichten zu berechnen sind.

## Perspektiven

Derzeit bereiten wir das Gesamtsystem mit mehr als 40 Höhenschichten und mit mehr als 40 atmosphärischen Spurenstoffen darauf vor, eine ENVISAT Messkampagne zu analysieren. Die Arbeiten am adjungierten Verfahren haben begonnen und wir passen die Datenstrukturen für das Chemietransportmodell an. Geplant ist der Einbau eines vertikalen Advektionsschemas. Die mathematischen Vorarbeiten sind im Gange. Die nächste große Aufgabe besteht darin, effiziente numerische Lösungsverfahren für die Optimierungsaufgabe im Optimierungsschritt des Assimilationsverfahrens zu entwickeln. Hier werden wir verschiedene Präkonditionierungsverfahren (auch auf Mehrgitterbasis) untersuchen.

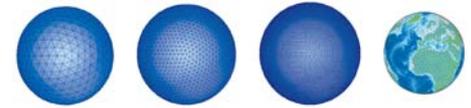


Bild 1: Ikosaedergitter, Datenzerlegung für Parallelrechner

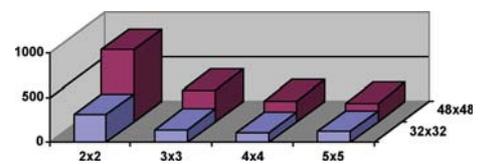


Bild 2: Rechenzeiten für das GME auf einem PC-Cluster

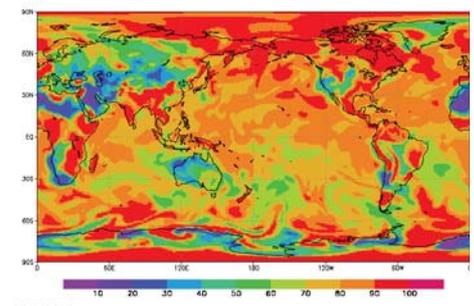
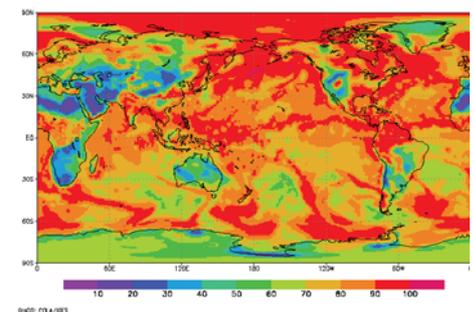


Bild 3: Relative Luftfeuchtigkeit mit kompletter Physik (oben) sowie ohne physikalische Prozesse (unten).

## Kontakt

Dr. Wolfgang Joppich  
 Tel.: 0 22 41/14-27 48  
 Fax.: 0 22 41/14-21 81  
 joppich@scai.fraunhofer.de

## Softwareintegration und Tools für das Molekulare Docking

### Aufgabe

Das Modellieren von Molekularstrukturen dient der Vorhersage von Wechselwirkungen zwischen biologischen Makromolekülen. Kleine Moleküle, sogenannte Liganden, die als pharmazeutische Wirkstoffe potenziell in Frage kommen, sollen identifiziert werden. Dazu lassen sich Ausgangsstrukturen für Simulationen der Molekular-Dynamik (MD) durch Docking aus den Strukturen der freien Proteine und einzelnen Liganden erzeugen. Die Professoren Thomas Lengauer und Matthias Rarey haben während ihrer Zeit am SCAI viele Jahre lang schnelle Dockingtechnologien entwickelt. Ein Ergebnis dieser Arbeiten ist das Softwaretool FlexX, das heute in der Pharmaforschung häufig eingesetzt wird. Die BiosolveIT GmbH in Sankt Augustin entwickelt FlexX weiter und vertreibt das Programm.

Schnelle Dockingverfahren wie FlexX dienen dazu, große Liganddatenbanken bei gegebenem Zielprotein schnell zu durchsuchen und zu bewerten. Das Ergebnis ist eine erste Auswahl möglicher Wirkstoffe, die dann weiteren Untersuchungen in aufwändigeren Simulationen oder im Laborexperiment unterzogen werden.

Schnelle Dockingverfahren nutzen typischerweise approximative und schnell berechenbare Bewertungsfunktionen für das Potenzial des Protein-Ligand-Komplexes. Sie reduzieren damit die Zahl möglicher Kandidaten. Daran schließen sich oft weitere Simulationsschritte für weitergehende und genauere Bewertungen mit Ausschluss weiterer Kandidaten an.

### Lösung

Im Kundenauftrag entwickelt und erprobt SCAI eine durchgehende Kette am Markt erhältlicher Softwarewerkzeuge, wobei die datentechnische Aufbereitung des Inputs für Dockingtools und die Verknüpfung schneller Dockingwerkzeuge mit Molekularmechanik-Simulationen im Mittelpunkt steht. Im Unterschied zum schnellen Docking werden in der Molekularmechanik sehr aufwändig zu berechnende Kraftfelder verwendet, die Paarwechselbeziehungen über lange Zeiträume berücksichtigen – mit entsprechend höherer Genauigkeit. Bezieht man das Solvens mit ein, führt dies zu weiter erhöhten Partikelzahlen mit noch höherem Rechenaufwand. Die Kette der eingesetzten Simulationenwerkzeuge muss daher eine sehr wirksame Reduktion der möglichen Wirkstoffkandidaten ermöglichen, um den Rechenaufwand insgesamt zu begrenzen.

Zu den im laufenden Projekt eingesetzten Werkzeugen gehören die Programme FlexX, Amber und ein proprietärer MD-Code des Projektpartners. Für die Kombination dieser Werkzeuge entwickelt SCAI verschiedene zusätzliche Tools und Filter zur automatischen Aufbereitung des Inputs für die Docking- und Molekülmechaniksimulation.

Die Menge an Informationen über ein zu betrachtendes Molekül hängt stark vom jeweiligen Datei-Format ab. Einen einheitlichen Standard für Moleküle in Datenbanken gibt es nicht und die eingesetzten Werkzeuge fordern unterschiedliche Formate an. Nur selten ist eine einfache 1:1-Konvertierung der Formate möglich. Häufig muss man aus minimalen Informationen über ein

Molekül mit Hilfe der Analyse der elektronischen Struktur ein detaillierteres Modell erzeugen, bevor man mit den eigentlichen Berechnungen beginnen kann.

Durch die Entwicklung eines eigenen Konvertierungswerkzeugs ist es möglich, die Kette für Ligand-Datenbanken unterschiedlicher Formate zu nutzen. Gleichzeitig können im Zuge der Konvertierung zusätzliche Informationen über die Moleküle (Deskriptoren wie Molekulargewicht, Zahl und Größe von Ringsystemen, Zahl der frei drehbaren Bindungen, Aromatizität, Ladungen und Gegenwart funktioneller Gruppen) gewonnen und gesammelt werden.

Wendet man die Docking-MD-Kette auf ausgewählte Fallbeispiele an, lassen sich die Parameter-Einstellungen der einzelnen Werkzeuge ermitteln. Die Ergebnisse erlauben eine bestmögliche Reproduktion experimenteller Messergebnisse. Damit profitieren experimentelle Arbeiten schon in der Planungsphase von Bindungsstudien durch Simulationen.

## Perspektiven

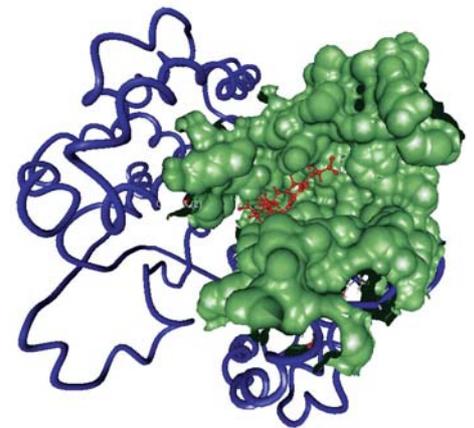
Die Integration bioinformatischer und numerischer Simulationswerkzeuge, besonders die Integration der sehr rechenintensiven Molekulardynamik-Simulationen, bleibt ein Thema der Arbeitsgruppe.

Das Konvertierungswerkzeug kann in der Weiterentwicklung zusätzliche Molekül-Deskriptoren liefern, die eine Klassifizierung und Auswahl von Molekülen nach bestimmten Eigenschaften erlauben. Solche Eigenschaften sind zum Beispiel eine Abschätzung des molekularen Volumens, eine Abschätzung der molekularen Oberfläche, eine Abschätzung des Löslichkeitsquotienten (logP) oder eine Abschätzung der Reaktivität funktioneller Gruppen (elektrophil, nucleophil und nucleofug).

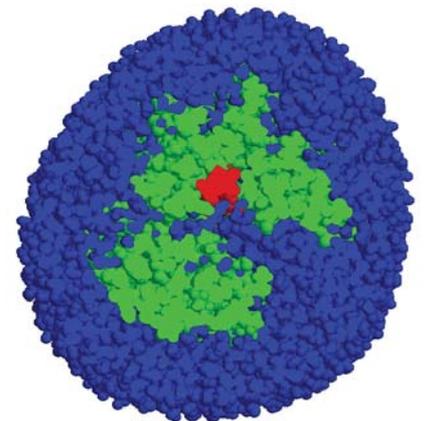
Mit Hilfe der oben skizzierten Kette soll beurteilt werden, ob sich eine Verbindung möglicherweise als Wirkstoff an einem bestimmten Protein eignet oder nicht. Entscheidend für die Wirksamkeit des Moleküls gegenüber dem Protein ist vor allem die 3D-Struktur des Proteins. Die Kette, die bislang die Protein-Komponente als gegeben betrachtet, soll in Fällen, in denen die 3D-Struktur

eines therapeutisch interessanten Proteins fehlt, um die Modellierung von 3D-Protein-Strukturen erweitert werden. Wieder würde man aus minimalen Informationen über das Protein (Sequenz) ein detaillierteres Modell erzeugen, nun jedoch unter Einbeziehung zusätzlicher (Struktur-)Informationen. Für die einzelnen Stufen einer solchen Homologie-Modellierung gibt es bereits Tools und Softwarepakete, die jedoch – wie oben beschrieben – miteinander verknüpft werden müssen. In diesem Kontext sind gemeinsame Arbeiten mit Experimentatoren in Förderprojekten geplant.

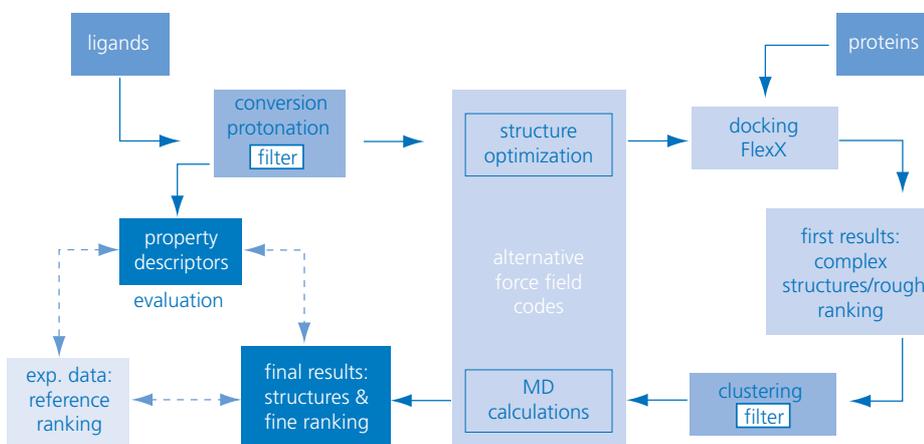
Im numerisch-algorithmischen Bereich sollen verstärkt Kompetenzen in molekulardynamischen Simulationen und insbesondere auch für Anwendungen in den Materialwissenschaften in Verbundprojekten erarbeitet werden. Hierzu gehören auch die Multiskalen-Simulation sowie Forschungsarbeiten über Systematisches Upscaling auf Basis von Multi-Level-Algorithmen, zum Beispiel für die Berechnung von Eigenbasen.



Einsicht in die Bindetasche (grün) des Rezeptors (blau) mit angedocktem Liganden (rot), platziert und visualisiert mit FlexX und FlexV.



Querschnitt durch einen Tropfen Wasser (blau) mit dem Komplex aus Protein (grün) und Ligand (rot) im Zentrum. Für dieses System wird die Molekulardynamik simuliert, um die Bindestärke und damit die Wirksamkeit des Liganden am Protein abzuschätzen.



Integration von Docking- und MD-Tools. Einzelne Stufen lassen sich durch Alternativen ersetzen.

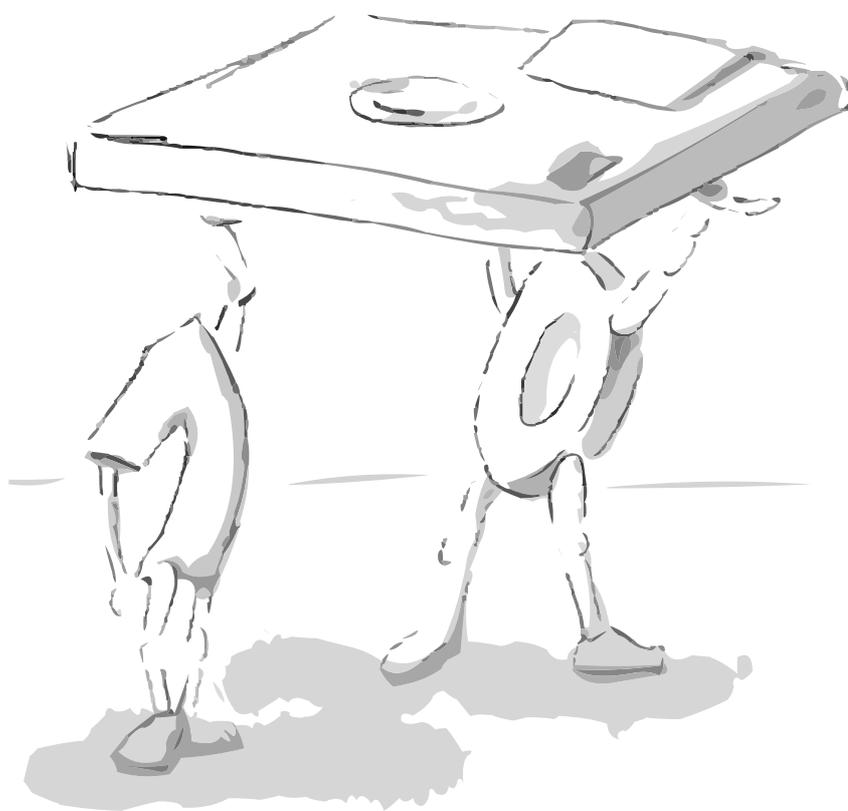
## Kontakt

Horst Schwichtenberg  
 Tel: 0 22 41/14-25 77  
 Fax: 0 22 41/14-21 81  
 hschwichtenberg@scai.fraunhofer.de

Dr. Astrid Maaß  
 Tel: 0 22 41/14-24 81  
 Fax: 0 22 41/14-21 81  
 astrid.maass@scai.fraunhofer.de

Numerische

Software



## Situation

Der Einsatz und die Bedeutung numerischer Simulation zur virtuellen Produktentwicklung und zum besseren Verständnis von Produkteigenschaften wachsen ständig. Die Verkürzung von Produktzyklen – zum Beispiel in der Automobilindustrie – ist ohne verstärkten Gebrauch numerischer Simulation nicht möglich. Bei der Nutzung der Ölreserven dieser Welt kann nur numerische Simulation Einsicht in die Abläufe im Innern eines Ölfeldes liefern und die Analyse verschiedener Explorationsmethoden die bestmögliche Förderung garantieren.

In der Regel werden für industrielle Simulationen kommerziell verfügbare Pakete eingesetzt, die in vielen Standardfällen gute Ergebnisse erzielen.

Vor dem Hintergrund

- eines verstärkten Einsatzes solcher Pakete in numerischen Optimierungsprozessen,
  - einer wachsenden Komplexität und Detailgenauigkeit der zugrunde liegenden Modelle und
  - des Wunschs, Simulationen interaktiv durchführen zu können,
- müssen zwingend die typischerweise sehr hohen Rechenzeiten einzelner Simulationsläufe substanziell reduziert werden.

Um Designentscheidungen vor dem Bau des ersten realen Prototypen zu treffen, ist es wichtig, die Vorhersagegenauigkeit von Simulationsergebnissen zu validieren. Diese Problematik verschärft sich mit wachsender Nichtlinearität der zu simulierenden Prozesse, wie etwa bei Crash-Simulationen.

Integrierte Simulationsumgebungen erlauben es heute, Simulationsergebnisse verschiedener Produktentwicklungen konsistent abzulegen. DataMining und Morphing Algorithmen könnten zusätzlich helfen, Designprozesse deutlich zu beschleunigen.

## Lösungen

In der Abteilung „Numerische Software“ entwickeln wir Software und Methoden für industrielle Simulationsanwendungen. Unser Fokus liegt auf Verfahrens- und Programmentwicklungen, die helfen, existierende Simulationssoftware effizienter nutzbar zu machen und neue Anwendungen zu erschließen. Die Arbeiten gliedern sich thematisch in fünf Bereiche:

### • *Schnelle Lösertechnologie*

Bei komplexen industriellen Simulationen geht es letztlich um die Lösung großer Gleichungssysteme mit oft vielen Millionen Unbekannten. Dabei entscheidet die Geschwindigkeit dieses Lösungsprozesses ganz wesentlich mit über die Praktikabilität der Gesamtsimulation. Arbeitsschwerpunkte sind die Erforschung und Entwicklung numerischer Algorithmen, die derartige Gleichungssysteme mit optimaler Geschwindigkeit lösen (sog. skalierbare Löser). Die hocheffizienten Lösermodule unserer Programmbibliothek SAMG sind bereits in viele kommerzielle Softwareprodukte eingebunden. Bisherige Anwendungsbereiche sind unter anderem Strömungsmechanik, Ölreservoir- und Grundwassersimulation, Prozess- und Device-simulation in der Halbleiterphysik, Strukturmechanik und Schaltkreissimulation.

### • *Analyse von Simulationsergebnissen*

Verzweigungen und daraus resultierendes instabiles Verhalten von Kenngrößen ist eine typische Eigenschaft von Aufprall-Simulationen. Werkzeuge wie unser Tool DIFF-CRASH erlauben es, kritische Instabilitäten aufzudecken, sie zu interpretieren und mit Hilfe von back-scattering-Methoden gezielt die Ursachen in dem konkreten Modellentwurf aufzufinden.

### • *Parameteroptimierung*

Prototypen neuer Produkte werden verstärkt am Computer konzipiert, weiterentwickelt und getestet, bevor ein erster realer Prototyp gebaut wird. Dabei müssen typischerweise Geometrien, Material- und Prozessparameter so lange variiert werden, bis eine optimale oder zumindest zufriedenstellende Konfiguration gefunden ist. Unsere Toolbox DesParO hilft dem Anwender

bei der rechnergestützten Optimierung derartiger Prozesse. DesParO enthält insbesondere solche Optimierungsverfahren, die auch noch im Zusammenhang mit hochkomplexen, sehr rechenzeitintensiven Simulationsprogrammen (z.B. aus den Bereichen Umformtechnik und Crash) einsetzbar sind, wie Kriging-Ersatzfunktionen.

• *Cache-Optimierung*

Die Schere zwischen der Steigerung der Prozessorleistung (zur Zeit Faktor 1,5 jährlich) und der Speichergeschwindigkeit (Faktor 1,07 jährlich) öffnet sich immer weiter. Platziert man einen Cache oder mehrere Caches zwischen Hauptspeicher und Prozessor, schafft das zwar prinzipiell Abhilfe, hat aber auch Nachteile: Anwendungsprogramme müssen eine immer stärkere Lokalität in Zeit (Daten werden mehrfach benutzt) und Raum (Daten werden sequentiell bearbeitet) haben, um die Speicherhierarchie effizient ausnutzen zu können. Konventionelle Implementierungen erreichen allerdings oft nur einen Bruchteil der theoretisch möglichen Leistung eines Rechners. Wir entwickeln Algorithmen und Werkzeuge, die den Programmierer bei der Strukturierung seiner Programme zur effizienten Ausnutzung von Cache-Architekturen unterstützen.

• *Compiler für datenparallele Programme*

Mit ADAPTOR ist ein Übersetzungssystem entstanden, das die Instrumentierung von Fortran90-Programmen mit Direktiven sowie deren Transformation und Laufzeitanbindung unterstützt. Das System ist besonders dafür ausgelegt, Fortran-Anwendungen mit High Performance Fortran (HPF) und OpenMP-Direktiven zu parallelisieren und entsprechenden parallelen Code zu erzeugen.

**Perspektiven und Potenziale**

Zukunftsweisend ist das vom BMBF geförderte Projekt AUTO-OPT, das wir gemeinsam mit fünf Automobilfirmen, Softwarehäusern und der Universität Stuttgart durchführen. Der Schwerpunkt unserer Entwicklungsarbeiten liegt in der Bewertung von Simulationsergebnissen und der Nutzung der Daten für DataMining-Algorithmen, wie sie bislang nur in der kommerziellen Datenverarbeitung eingesetzt wurden. Typische Fragen beziehen sich dabei auf

- die Sensitivitätsanalyse von Simulationsergebnissen für topologisch inkompatible Modelle;
- den Einfluss bestimmter Varianten auf CAE-Kenngrößen (etwa Stirnwandintrusion), die das Verhalten des Entwurfs charakterisieren;
- das automatische Ableiten von Konstruktionen aus existierenden Modellen für neue Entwürfe oder Fragen.

Um große Datenmengen effizient bearbeiten und speichern zu können, entwickeln wir derzeit Kompressionsalgorithmen, die speziell auf Simulationsergebnisse abgestimmt sind. Sie lassen ähnliche Kompressionsfaktoren erwarten, wie sie aus der Bildverarbeitung bekannt sind.

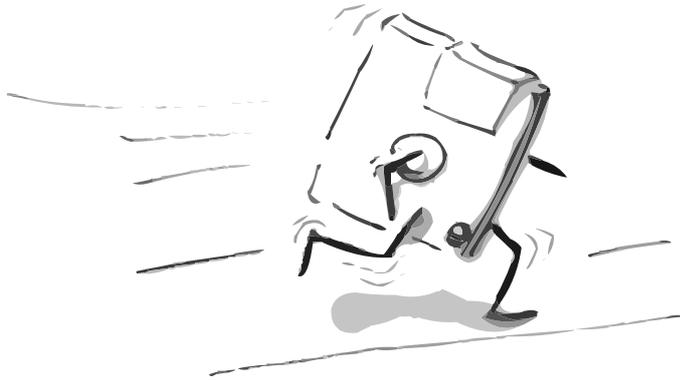


**Kontakte**

Clemens-August Thole (Abteilungsleiter)  
 Tel.: 0 22 41/14-27 39  
 Fax.: 0 22 41/14-21 02  
 clemens-august.thole@scai.fraunhofer.de

Dr. Klaus Stüben (stellvertr.)  
 Tel.: 0 22 41/14-27 49  
 Fax.: 0 22 41/14-21 02  
 klaus.stueben@scai.fraunhofer.de

## Skalierbare Lösungsverfahren (SAMG)



### Aufgabe

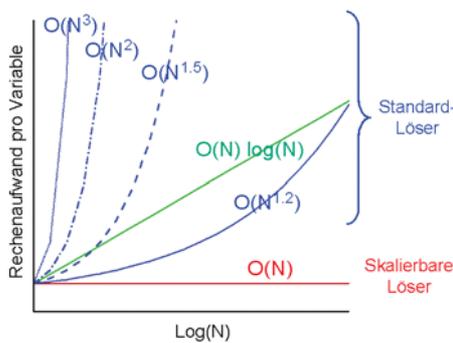
In vielen Anwendungen der numerischen Simulation, etwa der Strömungs- und Strukturmechanik, werden die Strukturen und Geometrien durch komplexe Gitter diskretisiert. Je feiner die Auflösung eines solchen Gitters, umso höher ist im allgemeinen die Simulationsgenauigkeit. Umso größer sind aber auch die aus dem Diskretisierungsprozess resultierenden numerisch zu lösenden Gleichungssysteme. Bei den heutzutage verlangten Simulationengenauigkeiten ist die Geschwindigkeit, mit der diese Gleichungssysteme gelöst werden können, eine kritische Größe. Systeme mit vielen Millionen Unbekannten sind keine Seltenheit und die Tendenz ist steigend. Klassische numerische Lösungsverfahren sind nicht mehr in der Lage, Gleichungssysteme dieser Größe mit ökonomisch vertretbarem Zeitaufwand zu lösen.

### Lösung

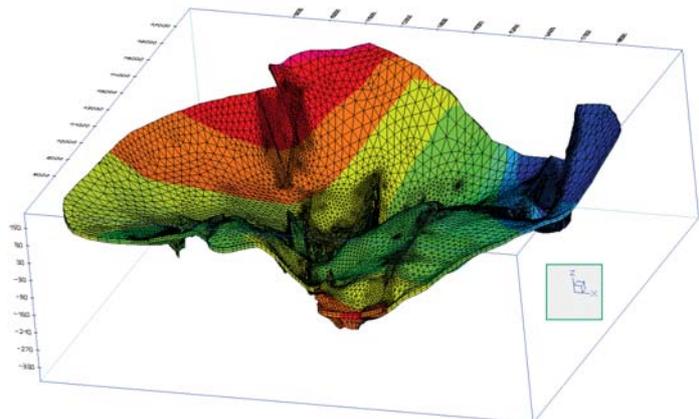
Die effiziente Lösung derart großer Gleichungssysteme setzt skalierbare Löser voraus, deren Entwicklung heute zu den wichtigsten Bereichen der numerischen Forschung zählt: Je größer das gegebene Gleichungssystem, umso größer wird der relative Rechenzeitgewinn gegenüber klassischen Standardlösern. Für viele Anwendungsbereiche sind zwar noch keine praktisch brauchbaren Ansätze bekannt, klar ist aber, dass numerische Skalierbarkeit – wenn überhaupt – nur über hierarchische Verfahrensansätze erreicht werden kann.

Als besonders erfolgversprechend hat sich hier für viele Anwendungsklassen die am FhG-SCAI mitentwickelte algebraische Mehrgittermethodik (AMG) erwiesen: Anstatt nur mit dem gegebenen Gleichungssystem zu arbeiten, kombinieren algebraische Mehrgit-

terverfahren die numerische Information einer Hierarchie immer größerer Gleichungssysteme, um das gegebene Problem in optimaler Geschwindigkeit zu lösen. Der zugrunde liegende Vergrößerungsprozess ist automatisch und Teil des Algorithmus. AMG-basierte Verfahren sind aus der Idee heraus entstanden, klassische „geometrische“ Mehrgitterverfahren so zu verallgemeinern, dass sie auf lineare Gleichungssysteme angewendet werden können, ohne geometrische Eigenschaften direkt zu benutzen. Algebraische Mehrgitterverfahren sind daher besonders zur Lösung elliptischer partieller Differentialgleichungen auf unstrukturierten zwei- oder dreidimensionalen Gittern geeignet, oder aber zur Lösung von Gleichungssystemen mit strukturell ähnlichen Eigenschaften.



Rechenaufwand als Funktion der Problemgröße (N ist die Zahl der Variablen)



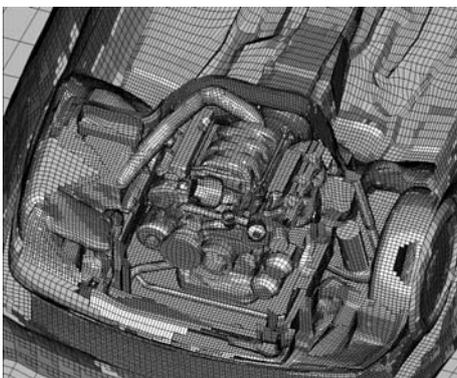
Gittermodell eines Reservoirs

© Wasy GmbH, Berlin

## Ergebnis

Seit einigen Jahren entwickeln wir am Institut das AMG-basierte Programmpaket SAMG kontinuierlich weiter. SAMG ist eine Bibliothek von Unter-routinen zum hocheffizienten Lösen großer linearer Gleichungssysteme mit dünnbesetzten Matrizen, wie sie im numerischen Kern der meisten Simulationssoftwarepakete auftreten. In der Regel macht die numerische Lösung dieser linearen Gleichungssysteme den bei weitem rechenintensivsten Teil einer kompletten Simulation aus. Gegenüber klassischen Verfahren (etwa durch ILU vorkonditionierten Verfahren der konjugierten Gradienten) hat SAMG den großen Vorteil einer weitestgehenden numerischen Skalierbarkeit. Je nach Anwendungsbereich und Problemgröße kann der dadurch bedingte Rechenzeitgewinn durchaus im Bereich von einer bis zwei Zehnerpotenzen liegen. Dabei kann SAMG genauso einfach in ein existierendes Simulationspaket integriert werden wie ein klassisches Verfahren.

SAMG ist auch als MPI-parallele Version verfügbar und im Prinzip auf jede Partitionierung des Rechengitters anwendbar. So lange die Anzahl der Gitterzellen pro Prozess groß genug ist, bietet auch das parallele SAMG eine außergewöhnliche Performance.

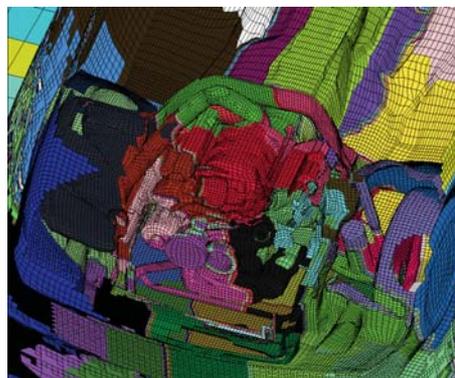


Verteilung eines komplexen Gitters (Motorraum) auf verschiedene Prozessoren eines Parallelrechners (Partitionierung auf der Basis von METIS). Die Farben (rechts) symbolisieren die Aufteilung

## Perspektiven

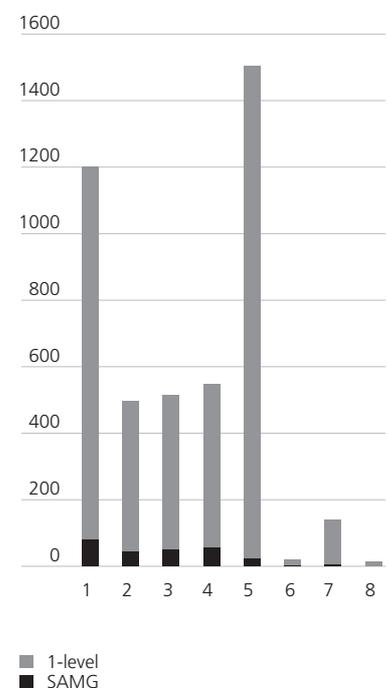
Beim gegenwärtigen Entwicklungsstand ist der effiziente Einsatz der AMG-Technologie im industriellen Kontext noch auf gewisse Problemklassen beschränkt. AMG-Ansätze existieren zum Beispiel zur Lösung großer Probleme, die durch die Diskretisierung skalarer, elliptischer Probleme zweiter Ordnung entstehen. Alle diese Ansätze sind bereits in SAMG realisiert. Für andere Problemklassen, beispielsweise verschiedene Systeme von Differentialgleichungen, befindet sich SAMG noch in der Erprobungsphase. In Zusammenarbeit mit mehreren Softwareentwicklern versucht SCAI hier, weitere Durchbrüche zu schaffen. Es kristallisiert sich heraus, dass SAMG kurz- bis mittelfristig in folgenden Anwendungsbereichen eine entscheidende Rolle als hoch-effizienter Kernlöser in industrieller Simulationssoftware spielen dürfte:

- Strömungsmechanik,
- Strukturmechanik,
- Ölreservoir-Simulation,
- Grundwassersimulation,
- Hydrothermale Erzanlagerungssimulation,
- Prozess-Simulation in der Halbleiterphysik,
- Device-Simulation in der Halbleiterphysik,
- Schaltkreissimulation.



## Zielgruppe

Mit unseren Arbeiten sprechen wir Partner und Kunden aus der Softwareentwicklung und der Anwendung an. Neben unserer Lösertechnologie bieten wir Analyse und Beratung zu Anwendungsproblemen sowie die Anpassung unserer Software auf vom Kunden betriebene Rechnersysteme, speziell Parallelrechner, an.



Vergleich der Rechenzeiten von SAMG und einem klassischen Ein-Level-Verfahren an acht typischen linearen Gleichungssystemen aus den Anwendungsbereichen CFD, Grundwasser- und Ölreservoir-Simulation

## Kontakt

Dr. Klaus Stüben  
 Tel.: 0 22 41 / 14-27 49  
 Fax.: 0 22 41 / 14-21 02  
[klaus.stueben@scai.fraunhofer.de](mailto:klaus.stueben@scai.fraunhofer.de)

## Beschleunigung von Ölreservoir-Simulationen



### Aufgabe

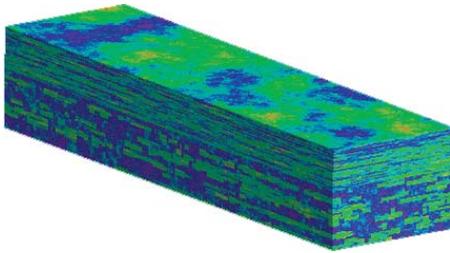
In der Ölreservoir-Simulation werden komplexe Mehrphasenströmungen in porösen Medien numerisch berechnet. Für jede einzelne Phase werden die Massenerhaltung durch eine Kontinuitätsgleichung und die Abhängigkeit zwischen Geschwindigkeits- und Druckverteilung durch das Gesetz von Darcy beschrieben. Insgesamt erhält man ein zeitabhängiges System nichtlinearer Differentialgleichungen für die Druck- und Sättigungsverteilungen der einzelnen Phasen. Die vollimplizite Lösung dieses Systems für realistische Anwendungen ist so teuer, dass die Größe heute behandelbarer Probleme noch stark beschränkt ist. Hocheffiziente skalierbare Lösungsverfahren, insbesondere vom Typ der algebraischen Mehrgitterverfahren (AMG), sind hierfür gegenwärtig noch in der Entwicklungsphase.

Halbimplizite IMPES-Verfahren (implicit in pressure, explicit in saturation), bei denen die zeitliche Entwicklung der Sättigung explizit diskretisiert wird, bieten grundsätzlich eine einfachere Alternative. In jedem Zeitschritt werden hier die relevanten Druckverteilungen (z.B. der Öldruck) durch die Lösung einzelner skalarer Diffusionsgleichungen berech-

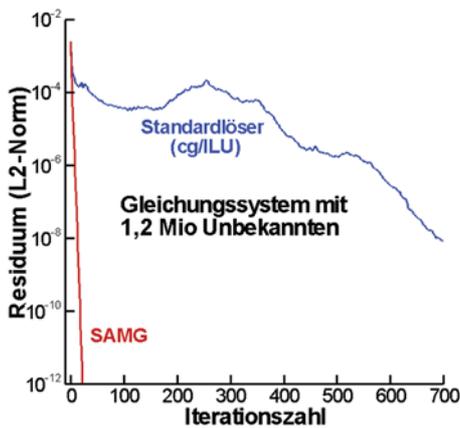
net. Für derartige Gleichungssysteme sind die Routinen der im Institut SCAI entwickelten Löserbibliothek SAMG hervorragend geeignet. Wie bei jeder expliziten Zeitschrittmethode besteht aber leider ein wesentlicher Nachteil der IMPES-Methode in einer starken Beschränkung der maximal zulässigen Zeitschrittweite (CFL-Bedingung). Da sich diese Beschränkung mit abnehmender räumlicher Diskretisierungsschrittweite oder zunehmender Variation in der Permeabilität verschärft, ist die klassische IMPES-Methode – selbst bei Vorliegen eines hocheffizienten AMG-Verfahrens – zur numerischen Lösung der obigen Druckgleichung aus praktischer Sicht zu ineffizient, besonders wenn das gegebene Problem zu groß wird.

### Lösung

Seit einiger Zeit ist ein IMPES-ähnlicher Zugang populär geworden, bei dem die Beschränkung der Zeitschrittweite durch die CFL-Bedingung entfällt. Anstatt die zeitlich explizite Berechnung der Sättigungen auf dem statischen Raumgitter durchzuführen, wird eine Stromlinienmethode benutzt. Durch den Transport der Fluide entlang sich periodisch ändernder Stromlinien ist die Stromlinienmethode praktisch äquivalent zu einem dynamisch adaptierten Gitterverfahren. Dabei ist das zugrundeliegende Gitter vom statischen Gitter, das zur Beschreibung des Reservoirs (und zur Berechnung des Druckes) benutzt wird, entkoppelt. Die eindimensionale Natur einer Stromlinie erlaubt die Entkopplung des dreidimensionalen Problems in eine Serie eindimensionaler Probleme. Der Hauptvorteil dieses Ansatzes ist, dass die CFL-Bedingung eliminiert ist, was die Berechnung globaler Zeitschritte ermöglicht, deren Größe unabhängig von der Feinheit der räumlichen Schrittweite ist. Wie bei der klassischen IMPES-Methode, ist AMG auch hier hervorragend geeignet, die in jedem Zeitschritt auftretenden Druckgleichungen zu lösen.



Unstetige Variation der Permeabilität eines Reservoirs um mehrere Zehnerpotenzen



Standardlöser versus SAMG: Beschleunigung um den Faktor 20  
(Daten: StreamSim Technologies Inc.)

### Ergebnis

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

Eine Reduktion der Rechenzeit zur Lösung der Druckgleichungen impliziert direkt Möglichkeiten zu genaueren Reservoir-Simulationen und ist daher von hohem kommerziellen Interesse. Die am Institut SCAI entwickelte AMG-basierte Löserbibliothek SAMG nutzen mittlerweile mehrere kommerzielle Softwarehäuser. Dadurch konnten zum ersten Mal Reservoirs mit mehreren Millionen Zellen simuliert werden. Der Rechenzeitgewinn bei derart großen Systemen kann mehrere Zehnerpotenzen betragen. Die Ergebnisse in der

Abbildung beziehen sich auf das Lösen eines einzelnen Gleichungssystems mit 1,2 Millionen Unbekannten, so wie es in einem typischen Zeitschritt der Stromlinienmethode zu lösen ist. Gegenüber einem klassischen Ein-Level-Verfahren ist SAMG etwa 20 mal schneller. Der relative Gewinn steigt mit wachsender Problemgröße weiter an.

### Perspektive

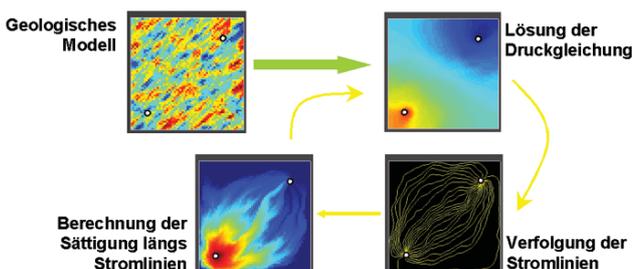
Die Programmbibliothek SAMG ist mittlerweile so weit entwickelt worden, dass sie auch für die – eingangs erwähnten – erheblich komplexeren vollimpliziten Diskretisierungsansätze formal einsetzbar ist. Die entsprechende Bibliotheksversion ist derzeit bei mehreren Softwarehäusern im Test. Sollten sich die Erwartungen an die Effizienz von SAMG erfüllen, wäre das ein wichtiger Durchbruch für weitere industrielle Ölreservoir-Simulationscodes, die auf diesen komplexeren Reservoir-Modellierungsansätzen beruhen.

### Partner

StreamSim Technologies Inc.;  
San Francisco (Kalifornien, USA);  
GeoQuest Limited, Abingdon (UK);  
Chevron, San Ramon (Kalifornien, USA);  
V.I.P.S. Limited, Windsor (UK);  
Imperial College, London (UK);  
University of Stanford (Kalifornien, USA).

### Kontakt

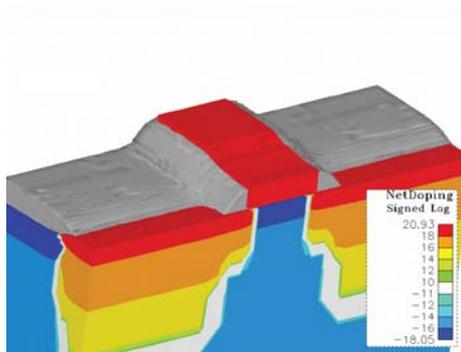
Dr. Klaus Stüben  
Tel.: 0 22 41/14-27 49  
Fax.: 0 22 41/14-21 02  
klaus.stueben@scai.fraunhofer.de



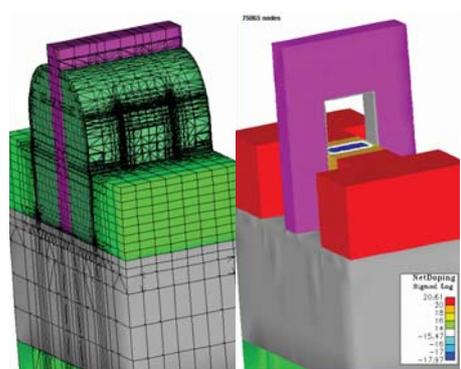
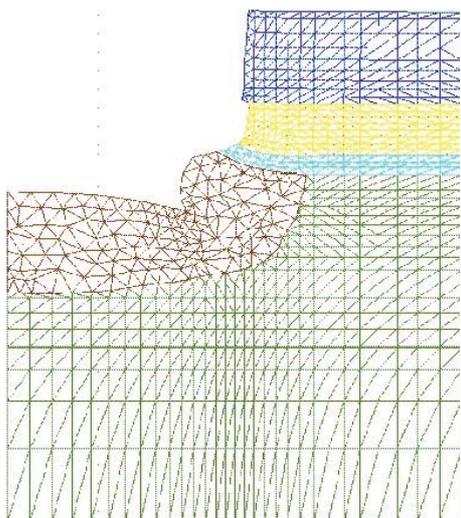
Stromlinienmethode in der Ölreservoir-Simulation

© StreamSim Technologies Inc

## Beschleunigung von Halbleitersimulationen



Prozess-Simulation: Gitter für die Stress-Analyse eines Systems aus fünf Materialschichten (Bild unten). Ergebnis einer Prozess-Simulation, Form und Doping-Profil eines Transistors (oben).



Device-Simulation: Gitter und Dopingprofil eines FinFET-Transistors

### Aufgabe

Halbleiterbauteile, etwa Transistoren, lassen sich aus dem heutigen Leben kaum mehr wegdenken. Aus bis zu vielen Millionen von ihnen werden Mikrochips und andere elektronische Schaltkreise hergestellt. Dass Halbleiterbauteile mittlerweile Abmessungen im Nanometerbereich erreicht haben, verkompliziert den Design-, Herstellungs- und Testprozess immer mehr und lässt die Kosten, besonders für die Entwicklung von Prototypen, in die Höhe schnellen. Daher versucht die Industrie, durch computergestützte Simulation bereits eine Vorauswahl geeigneter neuer Designs zu treffen. Ziel ist es, den Aufwand für den Bau und den Test von Prototypen zu reduzieren, um so den Designprozess zu verbilligen und zu beschleunigen.

### Lösung

Den Prozess der Herstellung sowie die physikalischen Eigenschaften von Halbleiterbauteilen zu simulieren ist Aufgabe der so genannten Prozess- oder Device-Simulation. Aufgrund der komplizierten Modelle und Gitter zählen beide Gebiete heute zu den Herausforderungen für die computergestützte Simulation. Eine besondere Schwierigkeit besteht hier in der robusten und schnellen Lösung komplexer Systeme partieller Differentialgleichungen wie Stress-, Reaktions-Diffusions- und Drift-Diffusions-Systeme. Bei deren approximativer Lösung müssen Serien großer dünnbesetzter linearer Gleichungssysteme – mit einigen Zehntausend bis zu Millionen von Variablen – numerisch gelöst werden.

Selbst auf modernen Rechnern sind solche Probleme mit direkten linearen Lösern nicht mehr handhabbar, vielmehr müssen iterative Löser verwendet werden. Allerdings sind hier die heutzutage üblicherweise eingesetzten klassischen (Ein-Level-)Verfahren im allgemeinen weder robust noch effizient genug: sie konvergieren oft zu langsam oder divergieren sogar. Abhilfe versprechen moderne hierarchische Lösungsansätze wie der algebraische Mehrgitteransatz (AMG), der bekanntermaßen für große Klassen diskretisierter skalarer partieller Differentialgleichungen auf optimal skalierende, sehr effiziente und robuste Löser führt. Allerdings bedarf eine Anwendung des AMG-Prinzips auf Systeme partieller Differentialgleichungen erheblicher methodischer Verallgemeinerungen. Insbesondere ist „skalares“ AMG für die der Halbleitersimulation zugrunde liegenden Systeme partieller Differentialgleichungen nicht geeignet.

### Ergebnisse

Probleme der Stress-Analyse lassen sich bereits mit einer relativ einfachen Erweiterung von AMG, dem sogenannten Unbekannten-Ansatz, erheblich beschleunigen. Die Idee besteht hier darin, die Vergrößerungshierarchie der einzelnen physikalischen Größen (räumliche Verschiebungen) getrennt voneinander zu konstruieren. Reaktions-Diffusions- und Drift-Diffusions-Probleme sind dagegen erheblich komplizierter. Eine effiziente Behandlung durch AMG verlangt hier neuartige – sogenannte punktbasierte – Verallgemeinerungen, die auf einer gemeinsamen Hierarchie aller physikalischen Größen basieren. Die konkrete Konstruktion einer entsprechenden AMG-Hierarchie ist dabei stark abhängig von den physikalischen

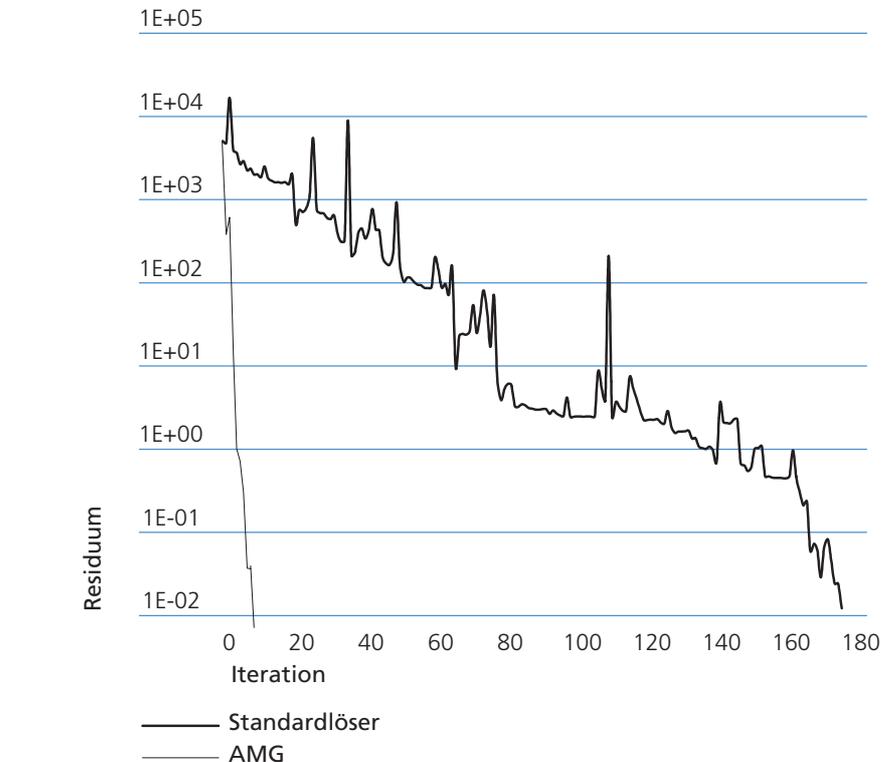
Eigenschaften der jeweils zugrunde liegenden Problemklasse. Es ist gelungen, für Reaktions-Diffusions- und Drift-Diffusions-Anwendungen effiziente Konstruktionsmechanismen zu entwickeln. Die resultierenden algorithmischen Erweiterungen wurden in einer ersten Version in die SAMG-Bibliothek übernommen. Um aussagekräftige Benchmarks in jedem der obigen Anwendungsbereiche durchzuführen, wurde die Bibliothek ihrerseits in drei industriell relevante Simulationscodes eingebunden und getestet:

- für Stress-Analyse in den Prozess-Simulator FLOOPS der Universität Florida,
- für Reaktions-Diffusions-Prozesse in den kommerziellen Prozess-Simulator DIOS der Firma ISE AG in Zürich,
- für Drift-Diffusions-Prozesse in den kommerziellen Device-Simulator TAU-RUS der Firma Synopsys Inc (früher Avant!) in Mountainview, Kalifornien.

Die neuartigen AMG-Verfahren zeigten ein robusteres Verhalten als die üblicherweise verwendeten Standardverfahren. Damit sich der Einsatz von AMG auch hinsichtlich der Rechenzeit lohnt, müssen – wie zu erwarten – die zugrundeliegenden Probleme eine gewisse Mindestgröße haben. Die bisherigen Untersuchungen haben gezeigt, dass ab etwa 100 000 Variablen gilt: Je größer die Probleme, desto höher der relative Rechenzeitgewinn.

### Perspektiven

Die bisherigen Ergebnisse demonstrieren, dass SAMG bereits heute gewinnbringend in industrielle Tools für die Halbleiter-Prozess- und Device-Simulation eingesetzt werden kann. Die



Typisches Konvergenzverhalten von AMG im Vergleich zu einem in industriellen Simulationspaketen genutzten Standardlöser

praktische Bedeutung hierarchischer Löser wie SAMG erhöht sich mit den absehbar steigenden Anforderungen zukünftiger Simulatoren an die numerischen Verfahren weiter. Auf der einen Seite werden die oben skizzierten Anwendungsprobleme verstärkt gekoppelt betrachtet, jedenfalls in lokal relevanten Bereichen. Auf der anderen Seite wird die Device-Simulation um quantenmechanische Aspekte erweitert werden müssen. Eine kürzlich gestartete Kooperation mit dem Institut für Mikroelektronik der Technischen Universität Wien verfolgt als ein Ziel, die Anwendung von AMG auf erweiterte und neue Modelle zu untersuchen, die in zukünftige Halbleiter-Simulationscodes Eingang finden werden.

### Kooperationspartner

ETH Zürich / ISE AG, Schweiz,  
Synopsys Inc., Mountain View (USA),  
TU Delft, DIMES, Niederlande,  
TU Wien, Institut für Mikroelektronik,  
Österreich.

### Kontakt

Dipl.-Math. Tanja Clees  
Tel.: 0 22 41 / 14-29 83  
Fax.: 0 22 41 / 14-21 02  
tanja.clees@scai.fraunhofer.de

## Interaktives Design von Automobilen (AUTO-OPT)

### Aufgabe

Automobile werden in immer kürzeren Zyklen entworfen und in den Produktionsprozess eingeführt. „Virtuelle Prototypen“ oder „Digitales Auto“ bezeichnen den Trend, die Entwicklung in verstärktem Maße rechnergestützt durchzuführen und die Erstellung physikalischer Prototypen und den realen Versuch aus Zeitersparnisgründen zu vermeiden.

Im Rahmen des Projekts AUTO-OPT (Interaktives Design von Automobilen und deren numerische Optimierung unter Verwendung von Datamining Techniken) wird die weitere Integration numerischer Simulations-, Optimierungs- und Datamining-Techniken in allen Phasen des Entwicklungsprozesses angestrebt. Es sollen Werkzeuge entstehen, die ein durchgängiges, interaktives Entwerfen, Entwickeln und Verbessern von Automobilen am Computer ermöglichen.

### Lösung

Die Einsatzgebiete für numerische Simulation in der Automobiltechnik sind vielfältig. In jeder Phase des Entwicklungsprozesses kommt Software zum Einsatz. Einige Beispiele sind:

- Stabilitätsanalyse und Eigenschwingungen von Karosserie und Bauteilen,
- Strömung in Motoren, Lüftung, Innenraum und Außenströmung,
- Crash-Simulation,
- Umformprozesse und Schmiedevorgänge,
- Simulation der Fahrdynamik.

Die in den unterschiedlichen Anwendungsgebieten verwendeten Softwaretools werden im Projekt jeweils integriert betrachtet und in Hinsicht auf die AUTO-OPT-Ziele modifiziert bzw. neu entwickelt. Dabei wird der Einsatz neuer Technologien vor allem in den Bereichen Multidisziplinäre Optimierung, Datamining für numerische Simulationen sowie Simulation in der Konzeptphase angestrebt.

Diese Entwicklungen sollen ermöglichen, dass

- multidisziplinäre Optimierung sowie großräumige Optimierung der Geometrie durch Kopplung von Simulation und Konzepttools einsetzbar wird,
- die große Menge der archivierten Simulationsergebnisse im Sinne eines Datamining erneut genutzt werden kann (z.B. für Stabilitätsuntersuchungen und Optimierungen),
- Crash- und Strukturmechanik bereits während der Konzeptphase interaktiv numerisch simuliert werden können.

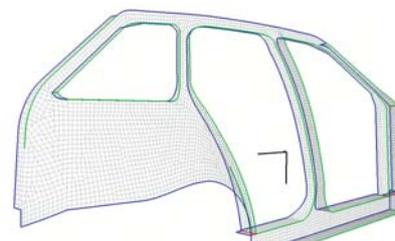
Als Basis für die Entwicklung dieser integrierten Lösungen werden Simulationsumgebungen verwendet, die im Vorgängerprojekt AUTOBENCH entwickelt wurden und sich z.T. schon in produktivem Einsatz in der Industrie bewährt haben.



Crashtest-Modell und seitlich versetzte Barriere. Die Bauteile sind unterschiedlich eingefärbt.



Zerlegung des Modells in Bauteile. Der Seitenrahmen (rot) besteht aus einem Finite-Elemente-Netz aus ca. 10 000 Maschen.



Reduktion des FE-Netzes auf wichtige Attribute: Ränder (blau), Kanten (grün), Schwerpunkt und Hauptträgheitsmomente (schwarz)

### Ergebnis

Im Projekt AUTO-OPT werden numerische Simulations-, Optimierungs- und Dataming-Techniken in allen Phasen des Entwicklungsprozesses integriert betrachtet und zu interaktiven Werkzeugen zusammengefasst. So können eine Vielzahl neuer Fahrzeugmodelle in immer kürzeren Entwicklungszeiten entworfen und zur Produktionsreife gebracht werden. Damit lassen sich Zeit und Kosten sparen, um den heutigen Anforderungen des Automobilmarktes gerecht zu werden.

### Perspektiven

In Zukunft möchte man das Konzept eines neuen Fahrzeugs bereits in frühen Entwicklungsphasen und mit Hilfe vorheriger Arbeiten rechnergestützt bis zur Erfüllung spezifischer Anforderungen optimieren. Diese Vorgehensweise intensiviert die Unterstützung des Entwicklers durch die Software, wodurch die Konzepte unabhängiger von seiner individuellen Erfahrung werden. Dadurch wird die Prozesssicherheit und Qualität bei der Entwicklung

neuer Produkte erhöht. Die Arbeiten im Projekt AUTO-OPT stellen eine Basis für diese Ziele dar.

Die angestrebten Entwicklungen können auch in Branchen, wie Maschinenbau oder Luft- und Raumfahrttechnik, eingesetzt werden.

### Auftraggeber

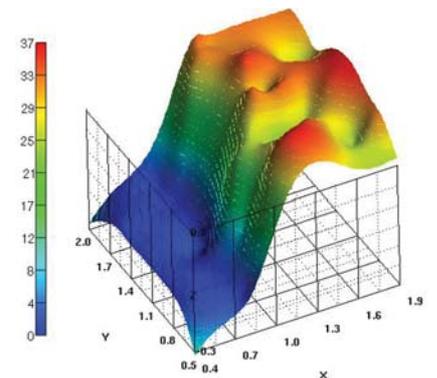
AUTO-OPT wird vom BMBF gefördert. Die Projektlaufzeit ist Mai 2002 bis März 2005.

### Kooperationspartner

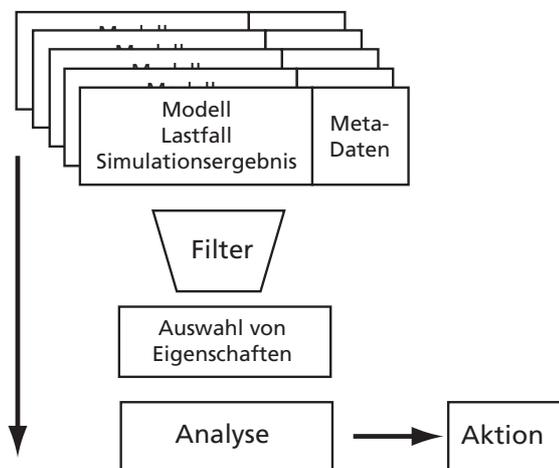
Fraunhofer SCAI, Sankt Augustin;  
 AUDI AG, Ingolstadt;  
 BMW Group, München;  
 DaimlerChrysler AG, Sindelfingen;  
 DLR-SISTEC, Köln-Porz;  
 Karmann GmbH, Osnabrück;  
 INPRO GmbH, Berlin;  
 Institut für Informatik und Institut für Visualisierung und Interaktive Systeme der Universität Stuttgart;  
 INTES GmbH, Stuttgart;  
 Porsche AG, Weissach;  
 SFE GmbH, Berlin.



Die Bilder zeigen den Kotflügel eines Automobils vor (Bild oben) und nach (Bild unten) der Stabilitätsoptimierung. Ergebnis: Die Stabilität (grüne Fläche) konnte erhöht werden.



Darstellung einer Zielfunktion mit Hilfe radialer Basisfunktionen



Der grundsätzliche Aufbau eines DataMining-Systems für Simulationsanwendungen

### Kontakt

Dr. Annette Kuhlmann  
 Tel.: 0 22 41/14-27 72  
 Fax: 0 22 41/14-21 02  
 annette.kuhlmann@scai.fraunhofer.de

## Stabilität von Crash-Simulationen (DIFF-CRASH)



### Aufgabe

In der numerischen Crash-Simulation können für ein und dasselbe Fahrzeugmodell große Unterschiede in den Ergebnissen verschiedener Simulationsläufe beobachtet werden, selbst bei kleinen Änderungen der Eingabedaten. Sogar bei unveränderten Eingabedaten können große Unterschiede in den Simulationsergebnissen auftreten, etwa wenn Hardware-abhängiger Rundungsfehlereinfluß (z.B. auf Parallelrechnern) zu Schwankungen in den für das Simulationsergebnis wesentlichen Einflussgrößen führt. In diesem Kontext spielen kritische Kontaktsituationen – wie der 90-Grad-Kontakt – eine besondere Rolle.

Wird beobachtet, dass selbst kleine Abweichungen in den Einflussgrößen einer Simulation bereits zu großen Änderungen in den Ergebnissen führen, so ist die Simulation instabil und die Ergebnisse sind unzuverlässig.

Eine häufige Ursache für Instabilitäten ist in Bild 2 dargestellt: Zwei Bleche treffen beim Aufprall im rechten Winkel aufeinander, wodurch nicht zuverlässig vorhergesagt werden kann, in welche Richtung die Bleche sich gegeneinander verschieben werden. Selbst kleinste Änderungen – wie sie zum Beispiel durch Rundungen entstehen – geben hier den

Ausschlag. Für eine sinnvolle Auswertung von Simulationsergebnissen ist es wichtig, kritische Instabilitäten zu erkennen, sie richtig zu interpretieren und, soweit möglich, zu reduzieren.

### Lösung

Die Software DIFF-CRASH wurde mit dem Ziel entwickelt, dem Ingenieur eine Möglichkeit zu geben, die durch instabiles Verhalten verursachte Streuung in Simulationsergebnissen zu beurteilen und ihre Ursache zu erkennen.

An Hand der Ergebnisse verschiedener Simulationsläufe führt DIFF-CRASH eine statistische Analyse auf Grundlage der Knotenpositionen in den Zeitschritten der Simulation durch. DIFF-CRASH bietet dabei verschiedene Funktionale an, um Maße für die Streuung der Ergebnisse zu berechnen und die Streuungen auf ihren Ursprung zurückzuführen.

Die mit DIFF-CRASH berechneten Ergebnisse können mit Hilfe kommerzieller Software visualisiert werden.

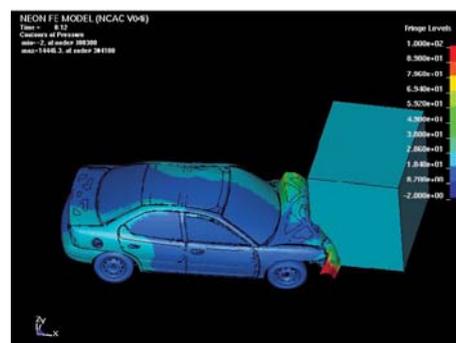


Bild 1: Crash-Simulation

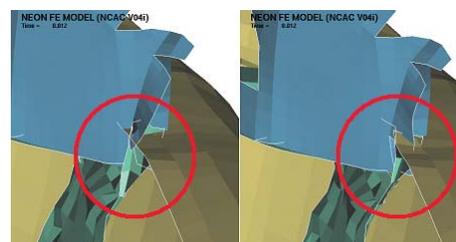


Bild 2: Eine häufige Ursache für Instabilitäten ist der 90-Grad-Kontakt.

## Anwendung

Die Eindringtiefe der Stirnwand in den Fußraum des Fahrers ist ein entscheidendes Designkriterium für die Crash-Auslegung eines Fahrzeugs. Zwei der Funktionale von DIFF-CRASH werden hier anhand der so genannten Fußraum-intrusion der in Bild 1 dargestellten Crash-Simulation erläutert.

Bild 3 zeigt die von DIFF-CRASH berechnete maximale Streuung der Knotenpositionen in einem ausgewählten Zeitschritt. Die rote Färbung zeigt in dieser Abbildung, dass die in den verschiedenen Simulationsläufen berechneten Knotenpositionen im Fußraum des Fahrers in diesem Zeitschritt bis zu drei Zentimeter voneinander abweichen!

Bild 4 zeigt die Ergebnisse eines in DIFF-CRASH implementierten Ähnlichkeitsfunktionals: Knoten mit ähnlicher Streuung bezüglich dieses Ähnlichkeitsfunktionals, berechnet über die verschiedenen Simulationsläufe, versteht DIFF-CRASH mit dem gleichen Wert. Sie sind in Bild 4 in der gleichen Farbe dargestellt. Beobachtet man die Entwicklung der Einfärbungen in den verschiedenen Zeitschritten, so kann dies dazu beitragen, die Ursache für die Streuung der Knoten eines Bereiches zu finden. Damit bekommt der Ingenieur wichtige Informationen, um durch Änderungen des Designs kritische Streueffekte gezielt zu reduzieren.

## Perspektive

Insbesondere bei Simulationen in sicherheitskritischen Bereichen sind numerische und Modell-Instabilitäten nur ein Aspekt. DIFF-CRASH kann auch die Auswirkungen produktionsbedingter Schwankungen analysieren, wenn es auf Simulationsläufe angewendet wird, denen ein innerhalb der Produktionstoleranzen stochastisch variiertes Modell zugrunde liegt. Obwohl vorwiegend im Kontext von Crash-Simulationen entwickelt, sind die Analysemöglichkeiten von DIFF-CRASH weit über diesen Anwendungsbereich hinaus relevant, etwa bei mechanischen Umformsimulationen, oder in der numerischen Strömungssimulation.

## Kooperationspartner

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

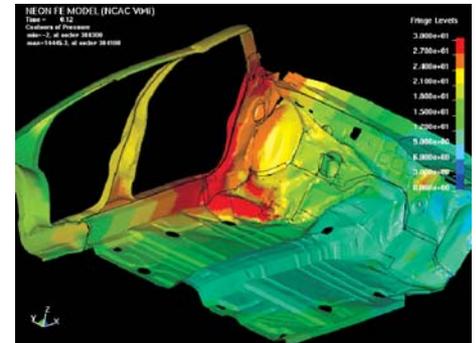


Bild 3: Die maximale Streuung der Knotenpositionen ist farblich gekennzeichnet.

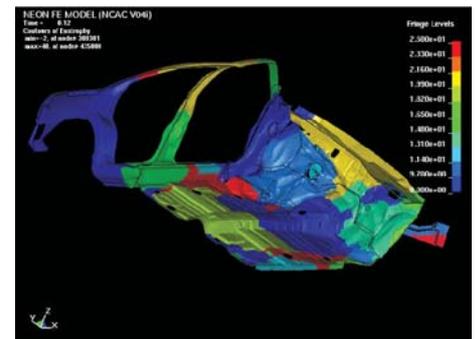


Bild 4: Knoten mit ähnlicher Streuung bzgl. Ähnlichkeitsfunktion sind farblich gekennzeichnet.

## Kontakt

Dr. Ute Karabek  
Tel.: 0 22 41/14-25 22  
Fax.: 0 22 41/14-21 02  
ute.karabek@scai.fraunhofer.de

## Design-Parameter-Optimierung (DesParO)



### Aufgabe

Die Computersimulation erlaubt es, bereits im Vorfeld einer konkreten, meist sehr teuren Prototypentwicklung, wichtige Parameter oder auch Geometrien eines zu entwickelnden Werkstücks oder Produktes zu optimieren. Im Regelfall müssen für jede Parameter- oder Geometrieänderung neue Simulationsläufe durchgeführt werden. Insbesondere bei rechenzeitintensiven Simulationsprogrammen, bei denen bereits die Dauer eines einzelnen Simulationslaufes im Bereich von Stunden oder gar Tagen liegt, kann der eigentliche Optimierungsprozess sehr lange dauern. Hier sind intelligente, sparsame Methoden gefragt, die den Prozess der Parameterwahl beschleunigen und die weitestgehend automatisch ablaufen.

### Lösung

Wir haben eine Optimierungs-Toolbox speziell für industrielle Simulationssoftware entwickelt. Bei der Zusammenstellung der Komponenten haben wir besonders berücksichtigt, dass die Berechnung eines einzelnen Zielfunktionswerts in der Regel einen kompletten, sehr rechenintensiven Simulationslauf erfordert. Auch gehen wir davon aus, dass Gradienteninformationen in der Regel nicht vorhanden sind. Verschiedene Optimierungsverfahren und zugehörige Suchstrategien sind in dieser Optimierungs-Toolbox zusammengestellt, insbesondere:

- Gradientenverfahren (Quasi-Newton, konjugierte Gradienten),
- direkte Suchverfahren (Downhill-Simplex, Powell),
- Verfahren mit Ersatzmodell (Design-of-Experiment, Response-Surface-Methode, Kriging).

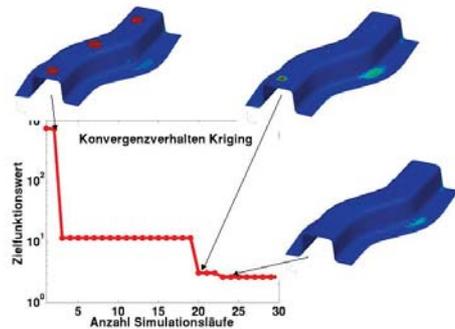
Die Optimierungs-Toolbox steuert und optimiert automatisch die relevanten

Parameter unter Berücksichtigung einer vom Anwender wählbaren Zielfunktion. Durch eine Konfigurationsdatei können verschiedenen Strategien gewählt und eine generische Zielfunktion definiert werden.

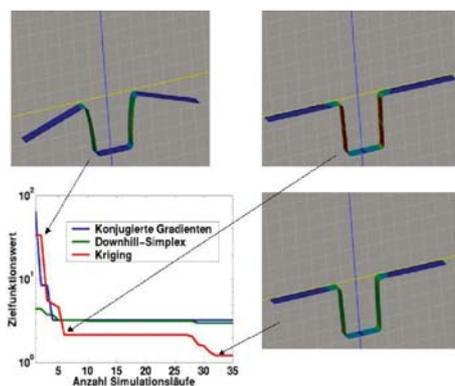
Die Optimierungs-Toolbox wird unter dem Namen DesParO (Design-Parameter-Optimierung) vermarktet. Sie bietet dem Anwender

- Standardalgorithmen und besonders effiziente Optimierungsalgorithmen,
- einfache Anpassbarkeit an beliebige Simulationsprogramme und
- parallele Berechnungsmöglichkeit.

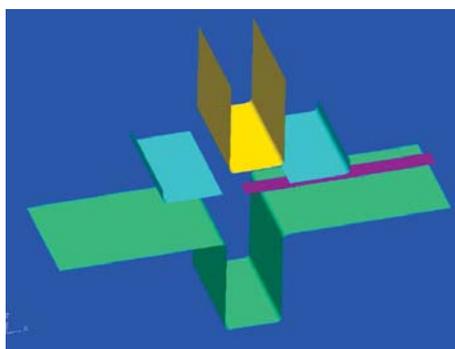
Wir bieten dem Anwender problem-spezifische Beratungsleistungen an, die besonders die Definition von Zielfunktionen oder die Auswahl von Optimierungsstrategien betreffen. Wir bieten ferner Unterstützung bei der Integration von DesParO (und eventuell erforderlicher Erweiterungen) in die Simulationsumgebung des Kunden an.



Konvergenzverhalten des Krigings am Testfall „Srail“



Konvergenzverhalten verschiedener Optimierungsstrategien beim „Hutprofil“



Werkzeugsatz für den 2D-Tiefzieh-Benchmark „Hutprofil“: Matrize (grün), Stempel (gelb), Niederhalter (türkis) und die Platine für das ziehende Hutprofil (violett, zu einem Viertel eingezeichnet)

## Ergebnis

Bei der Simulation des Tiefziehens (auch Umformen) von Blechen durch Pressen definieren Stempel und Matrize – die während der Simulation in kleinen Zeitschritten zusammengefahren werden – die Endform des Bleches. Für jeden Zeitschritt der Tiefzieh-Simulation muss ein stark nichtlineares Finite-Elemente-System gelöst werden. Daher dauert die Simulation des Tiefziehens eines größeren Modells mehrere Stunden. Unter diesen Bedingungen ist es wichtig, mit wenigen Simulationsläufen eine Parametereinstellung zu finden, für die das fertige Bauteil die gewünschte Form hat. Es darf keine starken Ausdünnungen, Risse oder Falten aufweisen. Bei der rechnergestützten Optimierung des „Hutprofils“ erzielten verschiedene Verfahren schon nach einigen Simulationsläufen eine deutliche Verringerung der Rückfederung. Aber nur das Kriging fand (nach 32 Simulationsläufen) eine Parameterkonfiguration, bei der keine zu starke Ausdünnung der Hutränder zu beobachten war. Einen wesentlich praxisnäheren Tiefzieh-Testfall stellt das „Srail“ der Numisheet-Konferenz von 1996 dar, das trotz seiner scheinbar einfachen Form schon alle in der Praxis wesentlichen Probleme aufzeigt. Hier fand das Kriging-Verfahren bereits nach 24 Simulationsrechnungen eine fast ideale Parametereinstellung.

## Perspektiven

Ein wichtiger nächster Schritt besteht darin, die Toolbox mit Algorithmen für multidisziplinäre Optimierung und Zielfunktionen zu erweitern, die unterschiedliche Designkriterien aus verschiedenen Gebieten miteinander kombinieren. Damit können zum Beispiel Modellparameter und gegebenenfalls auch Modellgeometrie unter Berücksichtigung von Zielvorgaben aus Crash-Simulation und Strukturmechanik gleichzeitig optimiert werden. Die Algorithmen werden an konkreten Beispielen aus der Automobilindustrie entwickelt.

## Auftraggeber

Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF), Bonn

## Partner

AUDI AG, Ingolstadt;  
DaimlerChrysler AG, Sindelfingen;  
INPRO GmbH, Berlin;  
ACCESS GmbH, Aachen.

## Kontakt

Dipl.-Math. Christof Bäuerle  
Tel.: 0 22 41/14-27 94  
Fax.: 0 22 41/14-21 02  
christof.baeuerle@scai.fraunhofer.de

## Automatic Data Parallelism Translator (ADAPTOR)

### Ausgangssituation

Für wissenschaftlich-technische Anwendungen und Simulationen wird nach wie vor die Programmiersprache Fortran eingesetzt. Denn mit ihrer Hilfe lassen sich Portabilität und sehr gute Leistungen auf Hochleistungsrechnern erzielen.

Für die Instrumentierung, Optimierung und Parallelisierung werden bevorzugt Compiler-Direktiven eingesetzt, da diese das ursprüngliche Programm nicht zerstören und somit fehleranfällige Änderungen vermeiden. Auf einem entsprechend höheren Level gestatten die Direktiven Optimierungen, die von Hand nur sehr mühsam zu vollziehen und die für die Wartbarkeit der Programme nicht gerade hilfreich sind. Neben maschinen- und herstellerspezifischen Direktiven haben die standardisierten OpenMP und HPF Direktiven für die Parallelisierung besondere Bedeutung erlangt:

- Mit Hilfe von OpenMP-Direktiven kann der Benutzer seine Anwendung für Parallelrechner mit gemeinsamem Speicher parallelisieren, ohne sich explizit mit der Programmierung von Threads und deren Synchronisierung auseinander setzen zu müssen. OpenMP ist ein als De-facto-Standard etabliertes Modell zur Shared-Memory-Programmierung mit Compilerdirektiven und Funktionsaufrufen in den Programmiersprachen Fortran, C und C++, das nahezu alle Shared-Memory-Systeme sehr gut unterstützen.

- High Performance Fortran (HPF) bietet dem Benutzer die Möglichkeit, seine Anwendung mit Hilfe von Direktiven für Parallelrechner mit verteiltem Speicher zu parallelisieren. Die über die Direktiven spezifizierte Abbildung der Daten auf die Prozessoren vermeidet die mühsame Berechnung lokaler Datenbereiche und erspart die oft fehleranfällige Programmierung der Kommunikation.

### Aufgabe

Ein mit Direktiven angereichertes Programm muss entsprechend transformiert und übersetzt werden, so dass den durch die Direktiven beabsichtigten Optimierungen bzw. gewünschten Transformationen Rechnung getragen wird. Dieser Prozess erfordert je nach Qualität der Direktiven ausgereifte Compiler-Technologie und entsprechende Laufzeitunterstützung für die gewünschte Funktionalität.

### Lösung

Am Institut SCAI wurde zeitgleich mit der Definition von HPF als Standard das HPF Übersetzungssystem ADAPTOR entwickelt, das bereits frühzeitig die Möglichkeit bot, maschinenunabhängig die Nutzung von HPF für industrielle Anwendungen zu evaluieren (Strömungssimulation, CG-Verfahren u. a.). Als Public-Domain-Software konnte ADAPTOR durch die Beteiligung vieler Nutzer in seiner Leistung und Funktionalität Schritt für Schritt verbessert werden.

Mit ADAPTOR verfügt SCAI mittlerweile über ein vollständiges Fortran 90 Source-to-Source-Transformationssystem – modular realisiert mit modernen Compilerwerkzeugen. Es bietet Scanner und Parser sowie zahlreiche Funktionen für Abhängigkeitsanalysen, Transformationen und Optimierungen.

ADAPTOR unterstützt maschinenunabhängig die Parallelisierung von Fortran-Anwendungen mit HPF oder OpenMP-Direktiven. Für die entsprechend transformierten Programme steht jeweils eine umfangreiche Laufzeitbibliothek zur Verfügung, die auf weit verbreiteten Standards basiert (MPI, PThreads).

In Kooperation mit Partnern aus der Industrie, insbesondere NEC Deutschland, wurden zudem die für HPF relevanten Optimierungstechniken, wie z.B. die Wiederverwendung von Kommunikationsmustern in irregulären Anwendungen (unstrukturierte Gitter, dünnbesetzte Matrizen) und die gleichzeitige Nutzung von gemeinsamem und verteiltem Speicher integriert und weiterentwickelt.

## Perspektiven

Die im Projekt ADAPTOR entwickelten Compiler-Technologien sind mittlerweile so ausgereift, dass ADAPTOR ganz generell für alle möglichen Programmtransformationen und Code-Instrumentierungen eingesetzt wird. Insbesondere wird die ADAPTOR-Compilertechnik in dem vom BMBF geförderten Projekt EP-CACHE genutzt, um Werkzeuge für die Instrumentierung, Analyse und Optimierung von Programmen für Cache-Architekturen zu entwickeln.

## Auftraggeber

Die Arbeiten sind drittmittelfinanziert in Esprit-Projekten und in einer Kooperation mit NEC Deutschland, Sank Augustin.

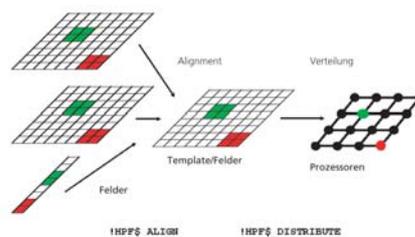
```

real, dimension (N,N) :: A, B, C
real, dimension (N)   :: R
!hpf$ align with A :: B, C
!hpf$ align R(I) with A(I,*)
!hpf$ distribute (block, block) :: A

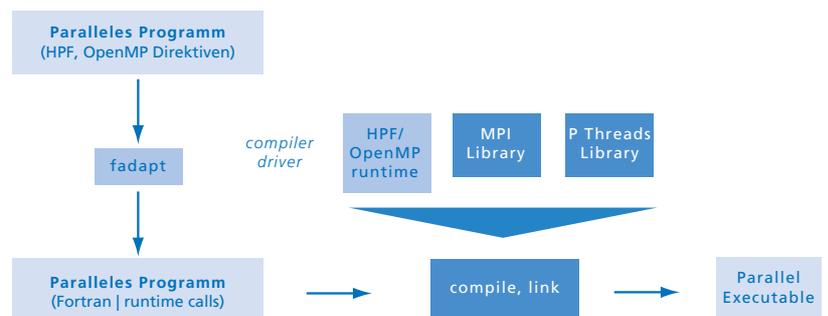
!$OMP parallel do private (V), shared(W)
!$OMP+reduction (+:GSUM)
do I = 1, N
  V = (I - 0.5d0) * W
  V = 4.0d0 / (1.0d0 + V * V)
  GSUM = GSUM + V
end do

```

Fortran Programm mit Parallelisierungs-Direktiven



HPF Direktiven für die Verteilung der Daten auf die Prozessoren



Source-to-Source-Parallelisierung mit ADAPTOR

## Kontakt

Dr. Thomas Brandes  
 Tel.: 0 22 41/14-34 72  
 Fax.: 0 22 41/14-21 02  
 thomas.brandes@scai.fraunhofer.de

# Cache-Optimierung (EP-CACHE)

## Ausgangssituation

Die Schere zwischen der CPU-Leistung (zur Zeit Faktor 1,6 pro Jahr) und der Speicherzugriffsleistung (Faktor 1,07 pro Jahr) wird immer größer. Der Einsatz eines oder mehrerer Caches, platziert zwischen Hauptspeicher und Prozessor, erlaubt einen wesentlich schnelleren Zugriff auf Kopien von Daten aus dem Hauptspeicher. Das erfordert aber, dass Anwendungsprogramme eine immer stärkere Lokalität in Zeit (Daten werden mehrfach benutzt) und Raum (Daten werden sequentiell bearbeitet) aufweisen müssen. Bei einer effektiven Nutzung der Caches kann die Laufzeit eines Programms oft um einen Faktor sechs bis zehn reduziert werden.

Konventionelle Implementierungen, welche die durch die Caches gegebene Speicherhierarchie nicht berücksichtigen, erreichen oft nur einen Bruchteil der theoretisch möglichen Leistung eines Rechners. Eine drastische Erhöhung der Leistung erfordert relativ hohe Kosten in der gesamten Software-Entwicklung, zumal die Erreichung von Lokalität oft im krassen Gegensatz zu einem modularen und leicht erweiterbaren Entwurf von Software steht.

## Aufgabe

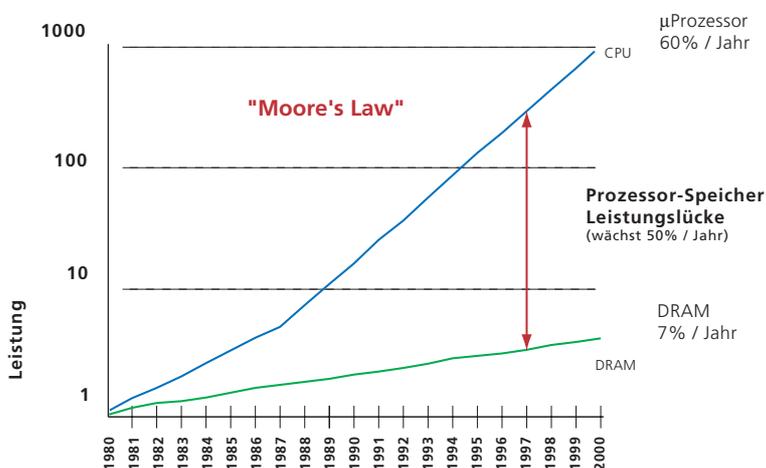
Die Identifizierung und die Beurteilung von Leistungsengpässen im Programm, die sich auf Cache-Probleme zurückführen lassen, sind die kritischen Punkte. Ganz allgemeine Informationen über die Anzahl der Cache-Misses sind hier allerdings nicht besonders nützlich, da sie dem Anwender zwar die Existenz von Engpässen signalisieren, nicht aber das Wo und Warum.

Das vom BMBF geförderte Projekt EP-CACHE soll dazu beitragen, diese Probleme zu bewältigen. Durch den Einsatz von Hardware-Monitoren in Verbindung mit entsprechenden Monitor-Kontrolltechniken kann der Benutzer aufschlussreiche Informationen über das Cache-Verhalten seines Programms erhalten. Entsprechende Werkzeuge für die Monitorkontrolle, Performance-Visualisierung und Optimierung bieten erweiterte und zusätzliche Möglichkeiten zur Identifizierung von Speicherproblemen und deren Beseitigung. Die Werkzeuge sind für die Analyse und Optimierung von Programmen für Cache-Architekturen ausgerichtet, insbesondere auch für SMP Cluster.

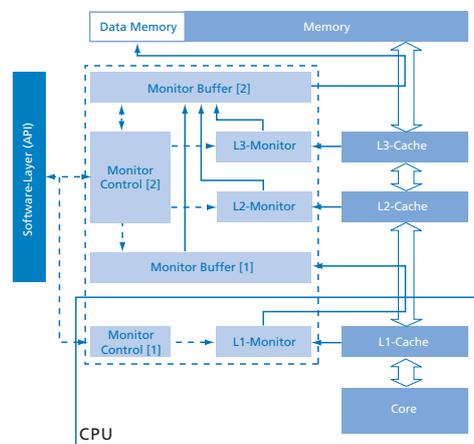
## Ergebnisse

Im Projekt EP-CACHE (Beginn März 2002) wurden bisher Konzepte für neue Hardware-Monitore erarbeitet, mit denen sich mehr Informationen erfassen lassen als mit bisherigen Messmöglichkeiten. Es wurden Strategien entwickelt, um mit den Möglichkeiten des Monitors die Leistungsanalyse und -optimierung von Programmen auf SMP-Clustern zu verbessern. Eine wichtige Rolle spielt die von SCAI entwickelte ADAPTOR-Compilertechnologie, die so weit überarbeitet und erweitert worden ist, dass mit ihrer Hilfe Werkzeuge zur Instrumentierung, Analyse und Optimierung von Programmen für Cache-Architekturen realisiert werden können.

Der Projektansatz beruht auf dem Entwurf verschiedener Monitore zur Beobachtung des Speicherzugriffsverhaltens paralleler Anwendungen auf SMP-Rechnern. Es wird eine Evaluierungsumgebung erstellt, die einen Simulator des jeweiligen Monitors einschließlich der notwendigen Systemsoftwarekomponenten enthält. Weiterhin wird eine automatische Steuerung



Unterschiedliche Entwicklung von Prozessor- und Speicherzugriffsleistung



Design eines Hardware-Monitors zur Überwachung der Cache-Hierarchie

der Monitore realisiert. Die interaktive Visualisierungsumgebung Vampir wird für die Visualisierung der mit Hilfe der Monitore gemessenen Daten eingesetzt, da entsprechende Displays bereits unterstützt werden.

Der Cache-Monitor und die Visualisierung entsprechender Daten tragen dazu bei, die Schwachstellen im Programm zu identifizieren und zu verstehen. Für die Optimierung der Programme dient ein interaktives Transformations-Werkzeug, das alle Cache-relevanten Transformationen unterstützt, sowie die Möglichkeit, mit Hilfe von HPF Direktiven die Lokalität der Daten direkt für eine bessere Cache-Nutzung umzusetzen. Eine besondere Herausforderung stellt dabei die Integration von Techniken dar, die die Optimierung mit Hilfe der gemessenen Daten automatisch steuert.

Während der Laufzeit des Projektes (März 2002 bis Februar 2005) wird ein Simulator als Plattform eingesetzt, um die Werkzeuge bereits entwickeln und testen zu können, auch wenn die

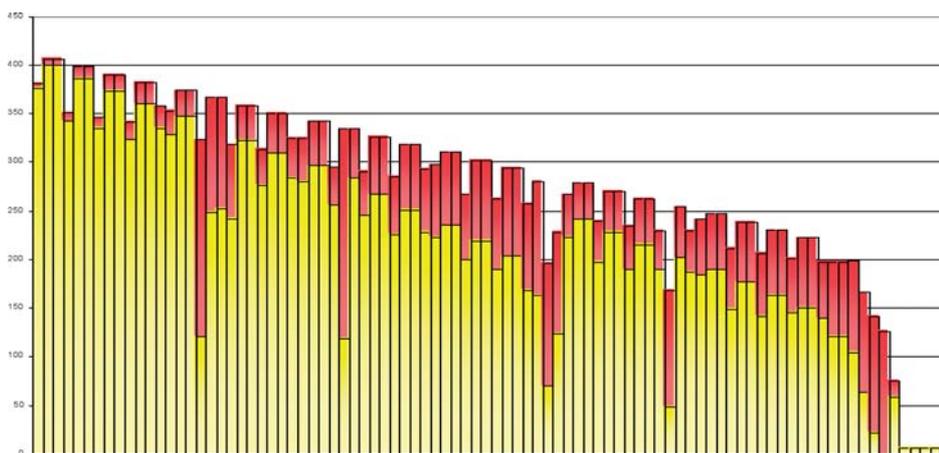
entsprechende Hardware-Unterstützung noch nicht vorhanden ist. Für die Evaluierung werden zudem repräsentative parallele Simulationsanwendungen eingesetzt: u.a. das lokale Modell (LM) des DWD (Deutscher Wetterdienst) und das geophysikalische Simulationspaket GeoFEM, das am RIST in Tokio entwickelt worden ist und auf dem zur Zeit schnellsten Rechner der Welt, dem *Earth Simulator* von NEC, eingesetzt wird.

### Auftraggeber

EP-CACHE wird vom BMBF gefördert.

### Partner

TU München, Lehrstuhl für Rechnerstrukturen;  
TU Dresden, Zentrum für Hochleistungsrechnen;  
Pallas GmbH, Brühl.

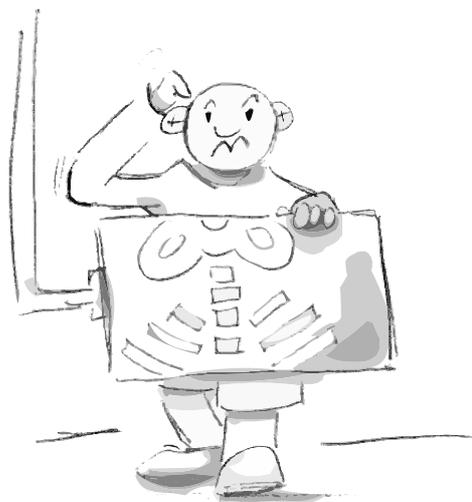


Adressraumüberwachung von Cache-Misses

### Kontakt

Dr. Thomas Brandes  
Tel.: 0 22 41/14-34 72  
Fax.: 0 22 41/14-21 02  
thomas.brandes@scai.fraunhofer.de

## Strahlentherapieplanung (Radioplan)



### Aufgabe

Neben den operativen Behandlungsmethoden und der Chemotherapie bekommt die Strahlentherapie eine zunehmend hohe Bedeutung als Methode zur Behandlung von Krebstumoren. Manche Tumoren, etwa Prostatakrebs, lassen sich nur durch Bestrahlungen behandeln.

Ziel einer schonenden und zugleich effektiven Strahlentherapie ist es, einerseits eine hohe therapeutische Dosis ionisierender Strahlung im Tumor zu realisieren, andererseits aber die bei der Behandlung in den umliegenden gesunden Organen unvermeidliche Strahlendosis zu minimieren, um Nebenwirkungen gering zu halten. Einen patientenabhängigen Strahlentherapieplan zu erstellen, ist eine schwierige und kritische Aufgabe, weil miteinander in Konflikt stehende Ziele in Einklang gebracht werden müssen. Die Lösung dieser inhärent widersprüchlichen Optimierungsaufgabe ist derzeit in der medizinischen Praxis eine Aufgabe des Arztes und erfordert große Erfahrung im Umgang mit Planungssystemen.

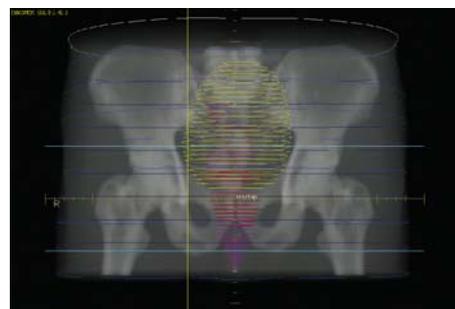
### Lösung

Einen Therapieplan zu erstellen verlangt, die Strahlungsintensität der Bestrahlungsköpfe zu steuern (intensitätsmodulierte Strahlentherapie) und Zahl und Richtung der Strahlen zu bestimmen. Heutige Planungssysteme, die rechnergestützt das Intensitätsspektrum der Strahlungsköpfe sowie die resultierende Dosisverteilung berechnen, sind zwar bereits sehr leistungsfähig, bieten aber Verbesserungsmöglichkeiten hinsichtlich der verwendeten Modelle. Bedenkt man, dass eine Verbesserung von Therapieplänen um nur 1 Prozent – laut deutscher Krebsstatistiken – das Leben von bis zu 500 Menschen pro Jahr retten kann, so wird die Wichtigkeit von Fortschritten in der Optimierung von Therapieplänen offensichtlich.

Im Projekt Radioplan wird ein komplettes Planungssystem für die intensitätsmodulierte Strahlentherapie entwickelt. Dabei nutzt man Grundsätze multi-kriterieller Optimierung und verwendet neue mathematische Modelle, welche die physikalischen Vorgänge bei der Dosisverteilung besser wiedergeben.



Linearbeschleuniger



Radiograph und Tumor-Lokalisierung (PLUNC Radiotherapiesystem)

## Ergebnis

Bisherige Optimierungsansätze verwendeten zur Optimierung der Dosisverteilung im Körper lediglich eine Zielfunktion: Das Unterschreiten einer sinnvollen therapeutischen Dosis im Zielvolumen und das Überschreiten als ideal angesehener Dosisoberranken in gesunden Organen wird dabei durch geeignete Gewichtungsfaktoren verhindert. Im Projekt Radioplan wurde die einzelne Zielfunktion ersetzt durch eine Schar von Zielfunktionen, welche jeweils den relevanten Entitäten zugeordnet sind. Mathematisch führt dies auf ein Problem der multikriteriellen Optimierung. Zur Behandlung dieser Problemklasse verwendet man Methoden der Straffunktionen, um Verfahren der unrestrictierten linearen und nichtlinearen Optimierung nutzen zu können.

Bei der Dosisberechnung werden Effekte der elastischen und inelastischen Streuung berücksichtigt. Das neue deterministische Modell ist vierdimensional (partielle Differentialgleichungen gewonnen aus einem sechs-dimensionalen Ausgangsmodell) und erlaubt es – im Gegensatz zu bisher verwendeten Standardmodellen –, Inhomogenitäten zu simulieren. Methoden der Dosisberechnung in heutigen Planungssystemen können bei Inhomogenitäten bis zu 15 Prozent Fehler beinhalten. Die Lösungen des neuen Modells sind hier erheblich besser.

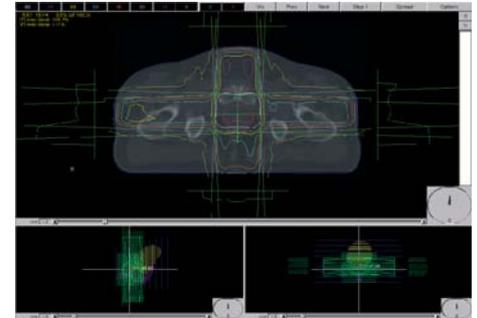
## Perspektiven

Die im Projekt verwendeten Optimierungstechniken lassen sich auf andere Probleme übertragen, bei denen inhärent widersprüchliche Ziele ein gegebenes Problem kennzeichnen. Anwendungsfelder hierbei könnten sein: Das Design einzelner technischer Bauteile in den Ingenieurwissenschaften, die Standortplanung von Produktionsstätten oder Investitions- und Produktionsplanungen in den Wirtschaftswissenschaften.

Die bei der Dosisberechnung erzielten Ergebnisse lassen sich zur Behandlung des direkten und des inversen Problems in der Tomographie nutzen. Die Ergebnisse sind außerdem übertragbar auf andere Anwendungen wie Spektroskopie im infraroten Bereich, Strahlenschutz, industrielle Radiographie und medizinische Bildverarbeitung. Eine Vielzahl von Anwendungen in diesen Bereichen lassen sich als Problem der Parameter-Identifizierung bei partiellen Differentialgleichungen formulieren. Das im Projekt entwickelte neue Modell zur Dosisberechnung kann an diese Probleme angepasst werden und dadurch zu einer Verbesserung existierender Verfahren oder gar zu neuen Methoden in diesen Bereichen führen.

## Auftraggeber

Radioplan wird vom BMBF gefördert.



Optimierte Dosisverteilung  
(PLUNC Radiotherapie-System)



Frontal Shaded View  
(PLUNC Radiotherapie-System)

## Partner

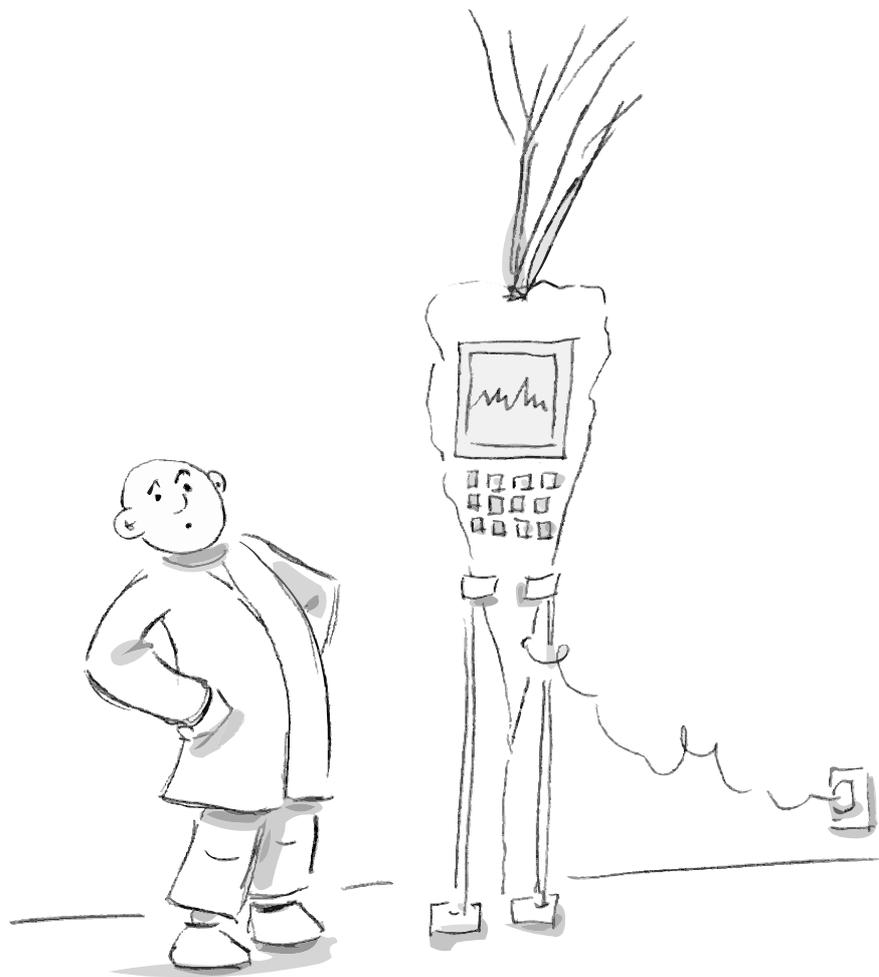
Fraunhofer ITWM, Kaiserslautern;  
Deutsches Krebsforschungszentrum  
(DKFZ), Heidelberg.

## Kontakt

Dr. Klaus Stüben  
Tel.: 0 22 41/14-27 49  
Fax.: 0 22 41/14-21 02  
klaus.stueben@scai.fraunhofer.de

**Bio-**

**Informatik**



## Situation

Biotechnologie und Pharmaforschung sind heute ohne Unterstützung durch Computer kaum mehr vorstellbar. Gründe dafür sind:

- die exponentiell wachsende Datenflut in der molekularen Biologie, der Genomforschung sowie der Wirkstoffforschung,
- das immer stärkere Zusammenwachsen von Biologie, Medizin, Chemie, Pharmakologie und Toxikologie und die daraus erwachsene Notwendigkeit, über die Grenzen dieser Fachgebiete hinweg interoperable Modelle zu etablieren,
- die Notwendigkeit, zwischen experimenteller Forschung und empirischem Wissen auf der einen Seite und abstrahierten, theoretischen Ansätzen auf der anderen Seite zu vermitteln und vorhandenes Wissen für die Vorhersage neuer Wirkstoffe und ihres pharmakologischen Verhaltens zu nutzen.

Die Anwendungen mathematisch-informatischer Methoden erstrecken sich dabei über den gesamten Pharma-Forschungsprozess, von der Identifizierung von Targetmolekülen und ihrer Einordnung in pathophysiologische Prozesse bis hin zur statistischen Analyse von Screening-Daten und der Vorhersage potenzieller Wirksubstanzen. Aufgrund des stark empirischen Charakters von Biologie und Medizin erfordern rationale Ansätze in der Wirkstoffforschung außerdem, dass das umfangreiche Wissen der Biologie und der Medizin für analytisch-prädiktive Zwecke (etwa im Bereich des überwachten, maschinellen Lernens) aufbereitet wird. In diesem Zusammenhang wächst die Bedeutung formaler Wissensrepräsentationen (Ontologien) sowie moderner Verfahren der Informationsextraktion.

Die Sequenzierung des menschlichen Genoms und die Identifizierung und Kategorisierung der überwiegenden Zahl der menschlichen Gene hat eine graduelle Veränderung der industriellen Bioinformatik mit sich gebracht. Die Vorhersage von Genen und die Aufklärung ihrer Struktur treten hinter Verfahren der Struktur- und Funktionsaufklärung von Proteinen zurück; die Regulation von Genexpression im gesunden sowie im erkrankten Organismus, die funktionelle Genomanalyse,

tritt ins Zentrum des Interesses der forschenden Pharmaindustrie. Die Angriffspunkte pharmazeutischer Wirksubstanzen sowie die von ihnen hervorgerufenen Effekte lassen sich nunmehr vor dem Hintergrund des gesamten Genoms analysieren. Damit besteht erstmals die – nicht nur theoretische – Möglichkeit, Eigenschaften kleiner Wirkstoffmoleküle im Kontext biologischer Systeme zu modellieren. Kernelemente eines zukunftsweisenden, rationalen Wirkstoffentwurfs sind daher

- Methoden zur Identifizierung relevanter Eigenschaften kleiner Wirkstoffmoleküle durch ihre chemische Struktur sowie die Nutzung dieser Eigenschaften für die Vorhersage neuer, potenzieller Wirkstoffmoleküle,
- Extraktion und Repräsentation komplexer, empirisch beschriebener Zusammenhänge (etwa in der Toxikologie), die Ableitung von Gesetzmäßigkeiten (Beziehungen von Struktur und Wirkung) sowie die Nutzung dieser Information für die Vorhersage pharmakologischer Eigenschaften neuer, potenzieller Wirkstoffmoleküle und
- die Kombination wissensbasierter Ansätze (inklusive statistischer Modelle für empirische Beobachtungen) mit theoretischen, auf physikalischen Eigenschaften beruhenden Modellen für die verbesserte Vorhersage spezifischer Wirksubstanzen im physiologischen Kontext (also für Krankheiten, Organe und Anwendungsgebiete).

SCAI arbeitet zusammen mit Industriepartnern an wesentlichen wissenschaftlichen Fragen, die mit diesen Kernelementen verbunden sind.

## Lösungen

SCAI bietet Expertise und Lösungen für folgende Kernkompetenzen im Geschäftsfeld Bioinformatik an:

### 1. *Angewandte Chemieinformatik*

Hier bearbeiten wir Fragen der statistischen Analyse von Daten aus dem industriellen Screening von Wirkstoffmolekülen. Außerdem zielen unsere Forschungsarbeiten darauf ab, pharmakologisches Wissen zu extrahieren sowie biologische und pharmakologische Effekte strukturellen Eigenschaften von Wirkstoffmolekülen zuzuordnen.

## 2. Informationsextraktion und Textmining

In diesem Themengebiet bearbeiten wir Methoden der Erkennung von Namen biologischer Objekte („Entitäten“) wie Genen oder Proteinen sowie die Extraktion semantischer Beziehungen zwischen biologischen Objekten (etwa die Interaktion eines Proteins A mit einem Protein B). Künftige Forschungs- und Entwicklungsanstrengungen zielen darauf ab, Informationen zu den Beziehungen zwischen Wirkstoffmolekülen und ihren biologisch-pharmakologischen Effekten aus unstrukturierten Textdokumenten zu extrahieren.

## 3. Datenmanagement und Informationssysteme für die Life Sciences

Die Heterogenität von Datenbanken in den Life Sciences macht die sinnvolle Verknüpfung und Integration von Daten und Informationen zu einer komplexen Aufgabe. Systeme, die auf GRID-Technologie beruhen, steigern diese Komplexität noch. SCAI arbeitet intensiv an Fragen der Repräsentation biologischer und medizinischer Daten in Datenbanken sowie der semantischen Integration von Daten und Wissen im Kontext in verteilten Systemen.

Ansätze mit analytischen Ansätzen hinausläuft. Diese Projekte können nur in gemeinsamen Forschungs- und Entwicklungsprojekten bearbeitet werden. Beispiele für solche Kooperationen kommen aus dem Textmining, wo wir uns spezifischen Fragen durch die Generierung spezialisierter Grammatiken annähern. Zukünftige Herausforderungen liegen hier vor allem in der Integration von Wissen aus unterschiedlichen Wissensdomänen. Die Verknüpfung von Informationsextraktion biologischer Entitäten (etwa Gene, Proteine und Krankheiten) mit der Informationsextraktion chemischer Entitäten (Wirkstoffbezeichnungen und Strukturformeln) stellt hier eine der großen Herausforderungen für unsere künftige Arbeit dar. Die Abteilung versucht deshalb, die Kompetenzen in der Chemieinformatik und in der Informationsextraktion zusammenzuführen und die resultierende Synergie zu nutzen, um am Markt eine führende Position zu erlangen.

## Perspektiven und Potenziale

Computerunterstützte Verfahren gewinnen in der forschenden Biotechnologie- und Pharmaindustrie an Bedeutung. Obgleich mit der Sequenzierung des humanen Genoms ein Meilenstein in der Entwicklung der Life Sciences erreicht wurde, ist keinerlei Reduktion der Datenflut in den Life Sciences zu beobachten. Vielmehr stellt sich zunehmend das Problem der Integration von Daten mit vorhandenem, publiziertem Wissen und das Problem der Analyse großer Datenmengen (Data Mining), wie sie gegenwärtig vor allem durch die Methoden der funktionellen Genomanalyse generiert werden.

Wir beobachten im Markt eine Aufteilung möglicher Kooperationsgebiete in zwei Felder. Erstens Software zur Lösung konkreter, scharf umrissener Probleme. Zweitens wissenschaftliche Projekte, deren Ziel auf die Untersuchung komplexer Probleme durch die Kombination wissenschaftlicher



### Kontakt

Dr. Martin Hofmann (Abteilungsleiter)  
Tel.: 0 22 41/14 28 02  
Fax.: 0 22 41/14 26 56  
[martin.hofmann@scai.fraunhofer.de](mailto:martin.hofmann@scai.fraunhofer.de)

# Bioinformatikmethoden für die Expressionsanalyse (BEX)

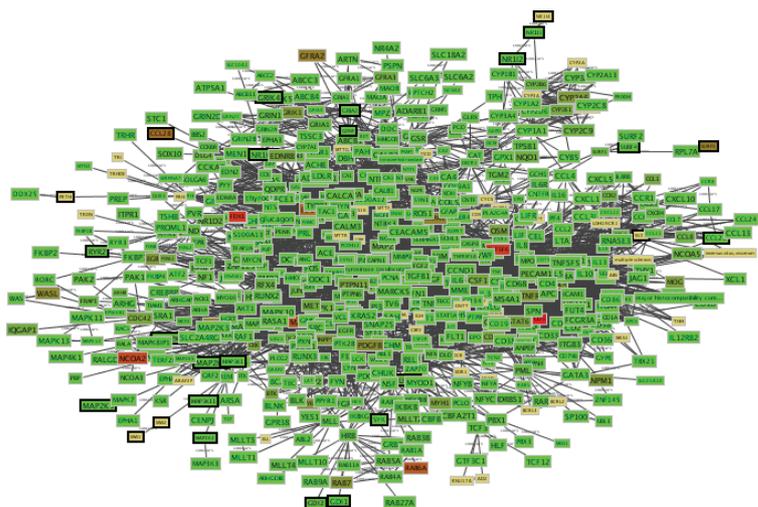


Bild 1: Ausschnitt eines Literaturnetzes, welches Relationen zwischen Proteinen und Genen darstellt. Der Grad differentieller Expression ist durch die Farbe der Knoten dargestellt.

## Aufgabe

Expressionsanalysen klären physiologische Prozesse und die Pathomechanismen wichtiger Krankheiten in der akademischen Welt und in der pharmazeutischen Industrie auf. Die biologisch sinnvolle Interpretation der entstehenden großen Datenmengen gelingt nur mit computergestützten Verfahren aus der Informatik und Statistik. Oftmals berücksichtigen solche Verfahren nicht explizit den biologischen Zusammenhang eines Gens oder Proteins im funktionierenden Organismus. Zur Aufklärung von Wirkmechanismen ist aber dieser biologische Zusammenhang wichtig.

Aventis Pharma, Frankfurt, und der Ludwig-Maximilians-Universität München Methoden, die eine integrierte Analyse der biologischen Netze und der DNA-Chipdaten ermöglichen. Der Significant Area Search Algorithmus detektiert relevante Teilnetze auf Basis von p-Werten, welche die differentielle Expression einzelner Gene quantifizieren. Der Co-Clustering-Ansatz hingegen geht von einer Korrelationsmatrix von Expressionsprofilen aus, verfolgt aber ein ähnliches Ziel: die Extraktion relevanter überschaubarer Netze, die als Ausgangspunkt für biologische Hypothesen dienen können (Bild 2). Die im BEX-Projekt entwickelte TopNet-Applikation integriert die entwickelten Ansätze zur explorativen kontextuellen Analyse von Expressionsdaten in einem benutzerfreundlichen Programm. TopNet wird inzwischen von der BioSolveIT GmbH vertrieben.

## Lösung

Wir extrahierten Netze verschiedener Art (metabolische und regulatorische Beziehungen, Protein-Protein-Interaktionen, Literaturnetze u.a.) aus unterschiedlichen Quellen und modellierten diese in einheitlicher Form. Mit ihnen spezifizieren wir biologisches Wissen, das bei der Analyse von Expressionsdaten von Nutzen sein kann. Auf Basis dieser umfangreichen Daten kann eine computergestützte Generierung und Validierung biologischer Hypothesen erfolgen (Bild 1).

Um die explorativen Analysen zu unterstützen, entwickelten wir mit

## Kooperationspartner

Aventis Pharma GmbH, Frankfurt;  
BioSolveIT GmbH, Sankt Augustin;  
LMU München.

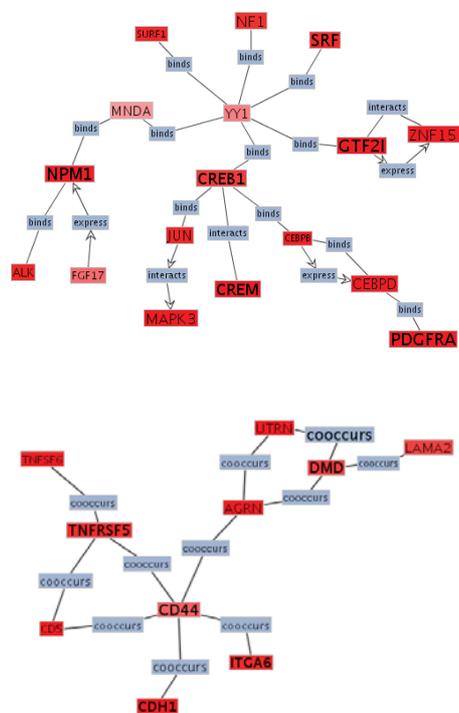


Bild 2: Anwendung der entwickelten Algorithmen (hier Significant Area Search) führt zur Extraktion überschaubarer Teilnetze mit signifikanter differentieller Expression.

## Kontakt

Dipl.-Inform. Daniel Hanisch  
Tel.: 0 22 41/14-25 49  
Fax.: 0 22 41/14-26 56  
daniel.hanisch@scai.fraunhofer.de

## Bioinformatikmethoden für die Proteomanalyse

### Aufgabe

Das Projekt gehört zum Projekt Development of Microbalance Array and Mass Spectrometry (MAMS), welches das Bundesministerium für Bildung und Forschung fördert. Es hat zum Ziel, einen neuen Arbeitsfluss zur Entschlüsselung komplexer biologischer Prozesse zu entwickeln. Dieser Arbeitsfluss beginnt mit der Auswahl eines oder mehrerer Proteine, die näher untersucht werden sollen. In einem ersten Schritt werden die Proteine hergestellt. Danach werden für jedes Zielprotein aus einer Menge RNA-Moleküle (Aptamere) solche ausgewählt und vermehrt, die dieses spezifisch binden (SELEX-Prozess). Sind diese Aptamere gefunden, wandern sie auf die Oberfläche einer Mikrowaage. Dabei lassen sich durch die Microbalance-Array-Technik mehrere interessante Proteine in einem Schritt analysieren. Mit der Mikrowaage messen wir, wie viel von einem speziellen Protein in einer Lösung vorliegt. Das gebundene Protein lässt sich anschließend mit der Massenspektrometrie weiter analysieren.

Der Einsatz von Methoden aus der Bioinformatik ist an mehreren Stellen dieses Prozesses wichtig. Zu Beginn unterstützt die Modellierung und statistische Analyse von Gen- und Proteinnetzen die Auswahl von Zielproteinen. Durch die Vorhersage der Protein- und Domänenstruktur von Zielproteinen gewinnen wir hier Erkenntnisse, die eine vereinfachte Aufbereitung und Herstellung des benötigten Zielproteins ermöglichen. Schließlich werten wir die durch die Kaskade gewonnenen Daten des Microbalance Array und der Massenspektrometrie aus. Dies geschieht im Kontext der relevanten biochemischen Netze und des biologischen Kontextes.

### Ergebnisse

Um die Protein- und Proteindomänenstruktur zu berechnen, verwenden wir den am Institut SCAI entwickelten Proteinstrukturvorhersageserver Arby. Die Vorhersagequalität des Servers testeten wir im internationalen CAFASP3-Wettbewerb. Dabei hat sich gezeigt, dass der Server eine exzellente Vorhersagequalität für Einzeldomänenproteine besitzt (siehe Bilder). Das Ziel besteht darin, diese Qualität auch auf Multidomänenproteine zu übertragen. Dazu entwickeln wir eine neue Komponente, die eine integrierte Proteinstruktur- und Proteindomänenstrukturvorhersage ermöglicht. Zu diesem Zweck richteten wir eine Testumgebung für die Qualität von Domänenstrukturvorhersagen ein.

Gleichzeitig entwickelt die Gruppe an der Ludwig-Maximilians-Universität Verfahren, um interessante Kandidatenproteine für den Chip zu identifizieren. Dabei wertet sie für ein gegebenes biologisches Problem – die aus der Literatur bekannte – Information aus, um relevante Gene und Proteine zu identifizieren. Dazu sucht sie Proteine, die einem gegebenen Eigenschaftsprofil entsprechen. In dieses Eigenschaftsprofil gehen auch die vorhergesagten strukturellen Informationen ein. Weiterhin arbeiten wir an statistischen Methoden, mit denen die Funktion von Proteinen anhand von Genexpressions- und Proteomdaten vorhergesagt werden kann. Des Weiteren entwickeln wir Methoden, um den Effekt der Ausschaltung von Genen und Proteinen in Zellen vorherzusagen.

### Auftraggeber

Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF)

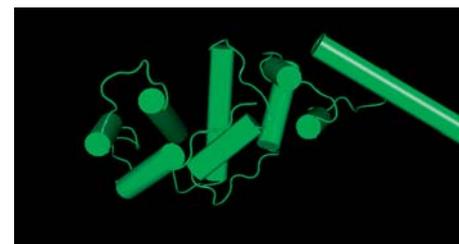
### Kooperationspartner

Im Projekt arbeiten wir eng mit der Arbeitsgruppe von Prof. Dr. Zimmer an der Ludwig-Maximilians-Universität München zusammen.

Bruker Daltonik GmbH, Bremen;  
Ludwig-Maximilians-Universität, München;  
NascaCell GmbH, Prien am Chiemsee;  
Qiagen GmbH, Hilden;  
Stiftung caesar, Bonn;  
Universität Bonn, Institut für experimentelle Hämatologie und Transfusionsmedizin;  
Universität zu Köln, Institut für Virologie.



Cytohesin 1, SEC 7 Domäne (Original)



Vom Arby-Server vorhergesagte Struktur.

### Kontakt

Dipl.-Math. Niklas von Öhsen  
Tel.: 0 22 41 / 14-23 60  
Fax.: 0 22 41 / 14-26 56  
niklas.von-oehsen@scai.fraunhofer.de

# Ontologien – von Mensch und Computer lesbar

## Situation

Ontologien stellen Wissen in einer formalen und kompakten Repräsentation dar, die für Menschen und Computer lesbar ist. Ontologien zeichnen sich aus durch kontrollierte Vokabularien von Termen, ihren Definitionen und der Spezifizierung ihrer Beziehungen. Die Übertragung von Ontologien in Datenstrukturen und das Abspeichern in Datenbanken ist möglich, da auch logische Bedingungen und hierarchische Strukturen in Ontologien abgebildet werden können.

Vorteile durch den Gebrauch von Ontologien in Datenbanken:

- Durch Definition von Relationen und logischen Bedingungen in Ontologien lassen sich viele Informationen – vorher in Textfeldern als ‚Freitext‘ gespeichert – in definierten Datenfeldern ablegen. Ziel einer Ontologienentwicklung ist es, Annotationen in freien Textfeldern überflüssig zu machen. Damit lassen sich Datenfelder gezielt durchsuchen.
- Ontologien erlauben es, verschiedene synonyme Begriffe einem Objekt zuzuordnen, wie Türklinke zu Türgriff. Sogar unterschiedliche Benutzer mit verschiedenen Terminologien finden die gesuchten Einträge.
- Definition hierarchischer Strukturen in Ontologien erlaubt es, Subtypen Oberbegriffen zuzuordnen, z.B. die Zuweisung von Auto, Fahrrad, Motorrad zu dem Oberbegriff Fahrzeug. Gleichzeitig ist es möglich, durch Suche nach Oberbegriffen Subklassen in Datenbanken zu extrahieren.
- Es sind Konsistenzprüfungen möglich. Sie zeigen Widersprüche auf, die sich widersprechen. Zudem identifizieren sie Mehrdeutigkeiten von Begriffen und behandeln sie gesondert.
- In Ontologien kann auf externen Datenbanken referenziert werden, die schon als Wissensrepräsentation in einem Fachgebiet vorliegen.

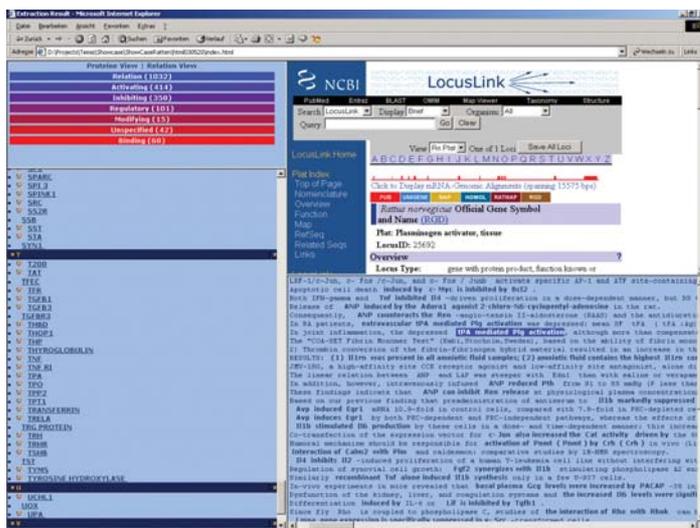


Bild 1: Darstellung der Ergebnisse einer Extraktion von Protein-Protein-Interaktionen aus der Datenbank MEDLINE im Browserfenster.

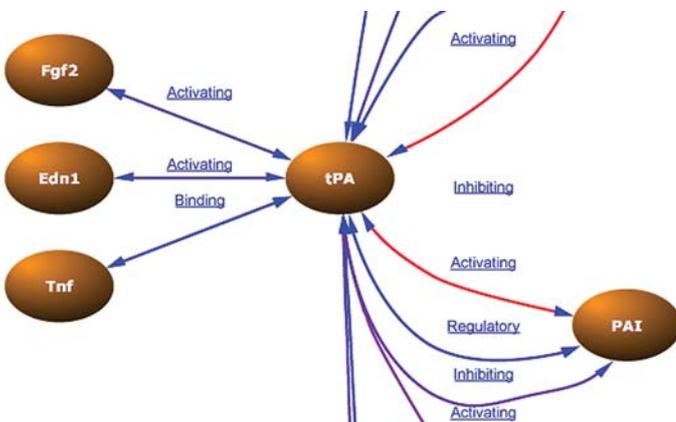


Bild 2: Extrahierte Interaktionen mit dem Protein tPA (tissue-type plasminogen activator).

## Ergebnisse

Wir entwickeln Ontologien in Lebenswissenschaften, die die Extraktion spezifischer Informationen aus bio-medizinischen Texten erlauben und zum definierten Abspeichern von Textmining-Ergebnissen oder anderen biomedizinischen Daten dienen. Daher sind die Themen Ontologie und Textmining hier eng verknüpft. Der Einsatz der Ontologien im Textmining erfordert zuerst die Generierung umfassender

Wörterbücher. Dazu dienen uns die Ressourcen öffentlicher Datenbanken, da die Anzahl der Objekte eine manuelle Generierung nicht zulässt. Zur Generierung eines menschlichen Gen- und Proteinnamens-Wörterbuch nutzen wir

- die Proteindatenbanken SWISSPROT mit über 9000 Einträgen,
- TREMBL mit über 80 000 Einträgen und
- die Gendatenbank LocusLink mit über 14 000 humanen Genen mit Proteinprodukten, deren Funktion bekannt oder angenommen ist.

Aus diesen Quellen entwickelten wir ein Gen- und Proteinnamenswörterbuch. Probleme waren hierbei beispielsweise die automatische Löschung unspezifischer Namen aus den Wörterbüchern und der Umgang mit häufig vorkommenden, nicht eindeutigen Gen- und Protein-Namen. Da für das Textmining ein umfassendes Wörterbuch benötigt wird, mussten wir viele Schreibvarianten hinzufügen. In Bild 4 wird ein Beispiel eines Wörterbuchobjektes gezeigt. Um weitere Schreibvarianten erkennen zu können, wurde ein spezieller Algorithmus zur Identifizierung von Gen-Protein-Namen in biomedizinischen Texten (Produkt *ProMiner*, vertrieben von der BiosolveIT) entwickelt. Vertauschungen (Permutationen), Einfügungen (Insertionen) oder Löschungen (Deletionen) einzelner Wörter (z.B. Type-1 collagen = collagen 1 = collagen-I) können dem richtigen Proteineintrag zugeordnet werden. Neben dem Wörterbuch ist die Referenz der einzelnen Objekte zu den Datenbanken LocusLink und SWISSPROT/TREMBL ein wichtiger Eintrag in der Proteinontologie, da wir dadurch die extrahierten Informationen aus dem Textmining mit anderen Experimenten (Expressionsdaten, Proteomics) verknüpfen können (Bild 2).

Die Definition von Relationen zwischen den Genen und Proteinen und die

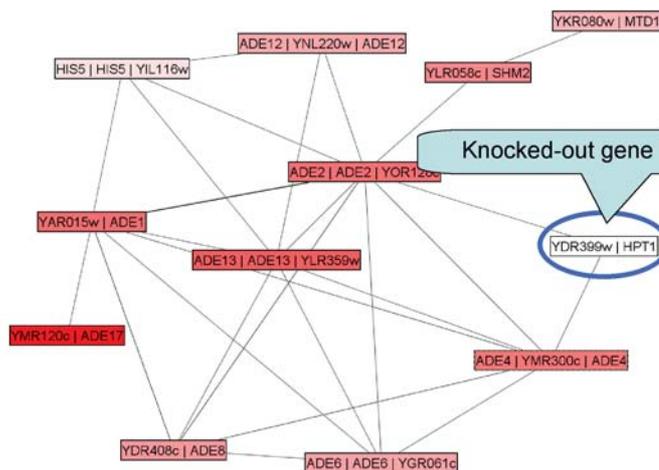


Bild 3: Verknüpfung von Protein-Protein-Interaktionen mit Ergebnissen aus einem Genexpressions-experiment.

Zuordnung der Textmining-Extraktionen zu diesen Relationen ist ein weiterer wichtiger Punkt in der Entwicklung der Proteinontologie. Dadurch gelingt es, die extrahierten Informationen zu normalisieren und Relationsklassen zuzuordnen. Beispiele sind regulatorische Interaktionen wie Aktivierung, Hemmung oder molekulare Interaktionen wie Bindung oder Phosphorylierung (Bild 3).

Die zusätzliche Einbindung der GO-Ontologie in unsere Proteinontologie ermöglicht es uns außerdem, die Relationen der Gene oder Proteine zu suchen, die eine bestimmte molekulare Funktion ausüben (z.B. Protein-Kinasen) oder an definierten biologischen Prozessen (z.B. Zellzyklus) beteiligt sind.

### Perspektive

Wir werden die Erfahrungen in der Entwicklung der Gen-Proteinontologie nutzen, um auch auf anderen biologisch-medizinischen Gebieten Wörterbücher und Ontologien zu generieren. Dazu gehören Wörterbücher von Krankheiten und Geweben sowie phänotypische Beschreibungen und Definitionen in medizinischer Terminologie und äquivalent dazu in den verschiedenen Modellorganismen. Ein weitere Aufgabe ist die Generation eines Wörterbuchs zur Identifikation chemischer Namen und Verbindungen in Texten. Wir streben zudem eine Erweiterung

der Protein-Ontologie an, die Komplexbildung, sekundäre Proteinmodifikationen und damit einhergehende Funktionen der Proteine erfassen kann. Dies ist besonders wichtig für das Abspeichern künftiger Proteomics-Daten.

### Kooperationspartner

TEMIS GmbH, Heidelberg;  
BiosolveIT, Sankt Augustin.

### Object View IL6

Gen name	IL6
Identifier	3569@LOCUSLINK IL6_HUMAN@SWISSPROT
Synonyms	BSF 2 BSF2 HGF HSF IFNB 2 IFNB2 IL 6 IL6 INTERLEUKIN 6 BSF-2 Hybridoma growth factor IFNB-2 IL-6 INTERLEUKIN-6 B-cell stimulatory factor 2 Interferon beta-2 Interleukin-6 precursor interleukin 6 interferon, beta 2

Bild 4: Wörterbucheintrag des Genes IL6

### Kontakt

Dr. Juliane Fluck  
Tel.: 0 22 41/14-21 88  
Fax.: 0 22 41/14-26 56  
juliane.fluck@scai.fraunhofer.de

# Computergestützte Analyse von HTS-Daten (LeadID)

## Aufgabe

Die Entwicklung neuer Medikamente in der pharmazeutischen Forschung ist sehr zeitaufwändig und kostenintensiv. So dauert das gezielte Entwerfen eines innovativen Wirkstoffes bis zur Marktreife etwa 10 bis 15 Jahre. Die Suche nach Wirkstoffen hat sich in den letzten zehn Jahren stark gewandelt. Durch den Fortschritt in kombinatorischer Chemie und der Hochdurchsatztestung (HTS, engl. high-throughput screening) stehen der pharmazeutischen Industrie oft automatische Synthese- und Testsysteme zur Verfügung. Heutige Labors erlauben es, große Mengen potenzieller Wirkstoffe in kurzer Zeit auf ihre Wirkung auf ein einzelnes Zielprotein zu untersuchen (siehe Bild 1). Zur Zeit lassen sich mehrere hunderttausend Substanzen innerhalb weniger Wochen testen. Diese Systeme liefern selbst bei geringer Trefferquote (Anteil der positiv getesteten Substanzen) eine nicht mehr zu überschauende Anzahl von potenziell wirksamen Stoffen. Die manuelle Auswertung dieser Experimente erfordert einen großen personellen Aufwand und die gemeinsame langjährige Erfahrung von Experten wie Biologen, Chemikern und Pharmazeuten. Gerade Computermodelle eignen sich für die Interpretation der großen Mengen verrauschter Daten, die aus den HTS-Experimenten resultieren.

Das Projekt LeadID unterstützt den zielgerichteten Wirkstoffentwurf in der pharmazeutischen Forschung mit computerbasierten Methoden für die schnelle und effiziente Auffindung von neuen Wirkstoffen, insbesondere, um große Datenmengen aus Experimenten auszuwerten.

## Lösung

Zweck der HTS-Experimente ist es, die Substanzen zu identifizieren, die am besten an das gegebene Protein binden. Die Bindungsstärke ist das wesentliche Kriterium im so genannten „Lead Finding“. Gefordert ist die Entdeckung einer breiten Palette chemisch voneinander unabhängiger Substanzen (der Leitstrukturen). Diese werden durch Eliminierung ungeeigneter Verbindungen ausgewählt.

Das neue Softwaretool HTSview unterstützt den Pharmazeuten interaktiv bei der Auswahl neuer Leitstrukturen. Für den Vorschlag geeigneter niedermolekularer Moleküle werden Methoden der Computerchemie mit so genannten Data-Mining-Techniken kombiniert (siehe Bild 2).

Die Modellierung von Struktur-Wirkungsprinzipien (QSAR) im Rechner basiert auf einem neuen Konzept zur Interpretation von HTS-Daten und zur Visualisierung von strukturellen Klassen



Bild 1: Abbildung einer Mikrotiterplatte für das High-Throughput Screening. Die Platte hat 1536 winzige Vertiefungen, in denen die einzelnen Experimente parallel durchgeführt werden.

aktiver Substanzen, dem sogenannten Biophor. Biophore bauen auf einer fragmentbasierten Beschreibung von Molekülen mit ähnlicher Struktur und Wirkungsweise auf. Jedes Fragment in einem Biophor wird durch die Topologie (Verknüpfung mit benachbarten Fragmenten im Molekül) und einem Aktivitätsgewicht annotiert. Für die Evaluierung und Interpretation dieser Biophormodelle realisierten wir eine grafische Repräsentation (siehe Bild 3). Die einzelnen Moleküle eines Modells werden in einem hexagonalen Gitter

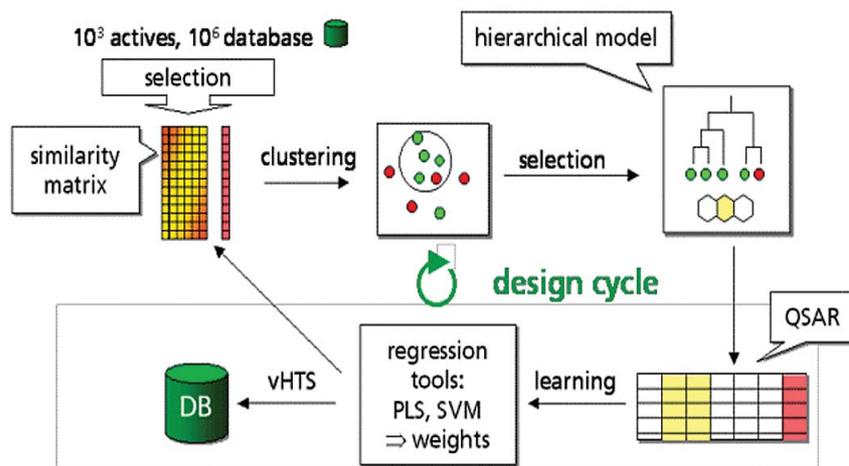


Bild 2: Ablaufschema im LeadID Projekt: Zuerst werden mehrere hunderttausend Substanzen im Experiment getestet. 1.) Für alle Moleküle in der Aktivitätsregion und ihre direkten Nachbarn wird die paarweise Ähnlichkeit berechnet (das können hunderte sein). 2.) Mit Hilfe von Ähnlichkeitsmatrizen werden alle Moleküle in Gruppen eingeteilt. Die Aktivitätswerte des Experiments (roter Spaltenvektor) werden zur Bestimmung von interessanten Clustern herangezogen. 3.) Zu jedem dieser Cluster wird ein Modell berechnet und 4.) dieses dann mit Aktivität korreliert (Biophor). 5.) Mit Biophoren können wiederum neue Moleküle aus einer Datenbank zum Testen vorgeschlagen werden.

### Perspektive

### Kooperationspartner

überlagert. Jedes einzelne Feld des Gitters repräsentiert einander zugeordnete Fragmente der einzelnen Moleküle und kann entsprechend seiner Eigenschaften oder seines Beitrags zur Gesamtaktivität eingefärbt werden.

Die Bindung an ein biologisches Ziel ist nur ein Aspekt bei Medikamenten. Genauso wichtig ist das Erreichen des Wirkortes. Die Untersuchung dieser Zusammenhänge heißt Pharmakokinetik. Damit beschreiben Wissenschaftler die Wirkung der Substanz auf den Organismus. Sie untersuchen die Vorgänge bei der Adsorption, Verteilung, Metabolisierung und Ausscheidung der Substanzen im Organismus (ADME). Viele Substanzen mit guten Bindungseigenschaften erweisen sich in späteren Phasen des Wirkstoffentwurfes als ungeeignet (beispielsweise wegen Nebenwirkungen). Ihre Weiterentwicklung muss beendet werden. Je später ein Projekt aufgegeben wird, desto teurer ist es. Daher gilt es, in den frühen Projektphasen eine große strukturelle Vielfalt der Kandidaten zu bewahren, um eine Streuung und Minimierung des Fehlschlag-Risikos in den folgenden Projektphasen zu gewährleisten. Ein wichtiger nächster Schritt ist, die ADME-Eigenschaften bereits bei der Bildung von Hypothesen für geeignete Leitstrukturen zu berücksichtigen.

Aventis Pharma Deutschland GmbH,  
Frankfurt Höchst  
BioSolveIT GmbH, Sankt Augustin

### Anwendungsbeispiel

Die Software wurde an Referenzdaten aus der Literatur und an experimentellen Projektdaten aus der pharmazeutischen Industrie validiert. Die berechneten Biophormodelle sind sowohl geeignet, um neue potentielle Moleküle in großen Datenbanken zu suchen, als auch QSAR-Hypothesen für verschiedene in der Praxis relevante Proteinfamilien aufzustellen. Biophormodelle liefern akzeptable statistische Modelle und lassen sich direkt vom Pharmazeuten interpretieren.

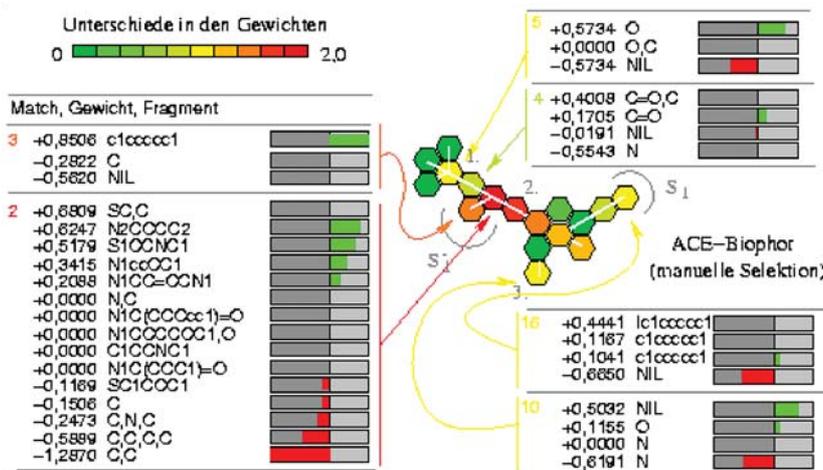


Bild 3: Biophormodell mit trainierten Gewichten für ACE-Hemmer. Fragmente, die mit einer Zunahme der Aktivität korrelieren, sind grün gekennzeichnet.

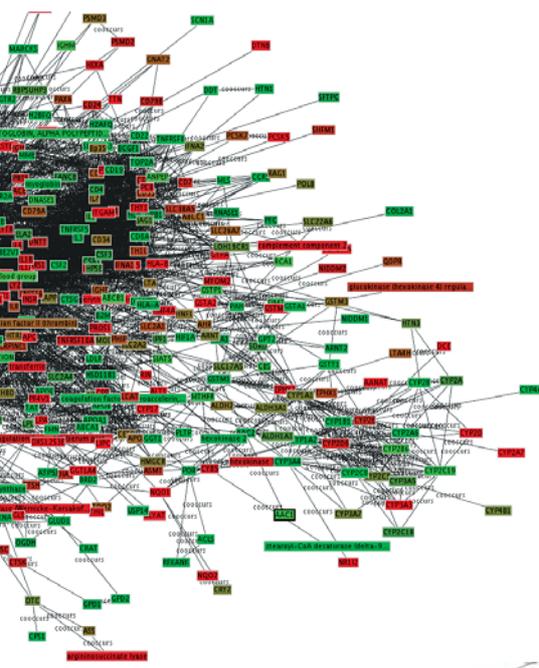
### Kontakt

Dr. Marc Zimmermann  
Tel: 0 22 41/14-22 76  
Fax: 0 22 41/14-26 56  
marc.zimmermann@scai.fraunhofer.de

# Textmining

## Situation

Den Zugang zu Informationen sicherzustellen ist in der biologischen und klinischen Forschung eine große Herausforderung. Gleichzeitig wächst die Nachfrage nach integrierten Informationen aus verschiedenen Quellen und über verschiedene Disziplinen der Life Sciences. Leider ist aber ein Großteil dieser Informationen nur in Form wissenschaftlicher Artikel erhältlich. Ein fast exponentielles Wachstum wissenschaftlicher Literatur macht es jedoch Biologen und klinischen Forschern nahezu unmöglich, die gesamten relevanten Informationen über ein Thema abzurufen und sich auf dem Laufenden zu halten. Textmining-Techniken lösen dieses Problem, da sich mit ihrer Hilfe Informationen aus Freitext automatisch auffinden und extrahieren lassen.



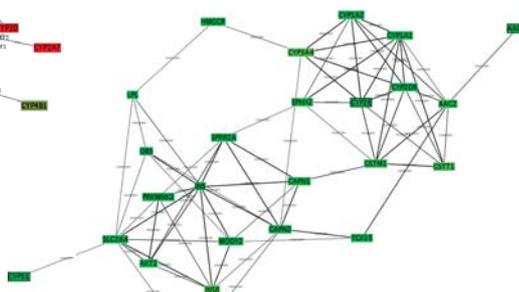
Ein aus der Datenbank MEDLINE extrahiertes Protein- und Gen-Netz.

## Ziel

Mit TEMIS, einer auf Textmining spezialisierten Firma, entwickeln wir BioMed-Cartridges. Sie ermöglichen es, relevante Informationen für viele Disziplinen der Life Sciences zu extrahieren.

Ziele im Textmining sind

- die Extraktion biologischer Information aus wissenschaftlichen Texten mit Methoden des Natural Language Processing. Dazu müssen bei konkreten Fragestellungen Grammatiken für den TEMIS Insight Discoverer™ Extractor erstellt werden;
- IT-Infrastrukturen bereitzustellen, um biomedizinische Literaturdatenbanken an die Extraktionssoftware anzubinden und extrahierte Ergebnisse strukturiert abzuspeichern;
- Gen- und Protein-Netze mit Textmining-Methoden zu erzeugen und zu kurieren. Dies beinhaltet die Annotation von Genlisten an biomedizinische Wörterbücher. Hinzu kommen die Kurierung der Wörterbücher, das Aufdecken und Beheben von Fehlern bei der Proteinnamen-Erkennung und der Informationsextraktion;
- die Forschung in der Informationsextraktion. Zur Lösung von Problemen in der Informationsextraktion sollen neue Methoden zur Auflösung von Ambiguitäten, zur Erkennung von „Multi-Word-Terms“ und zur Erkennung und Auflösung von Acronymen entwickelt werden. Ferner sollen statistische Methoden zum Lernen einer Grammatik evaluiert werden.



Subnetz des aus der MEDLINE extrahierten Protein- und Gen-Netztes.

## Ergebnisse

Basierend auf biomedizinischen Wörterbüchern und dem TEMIS Insight Discoverer™ Extractor, bieten wir eine komplette Lösung mit Textmining-Services und zugehöriger Software. Im wissenschaftlichen Kontext konzentrieren wir uns auf die Extraktion von Interaktionen zwischen biomedizinischen Einheiten (z. B. Protein-Protein-Interaktionen, Protein-Krankheit-Zusammenhängen). Die resultierenden Informationsnetze werden durch eine Verknüpfung mit experimentellen Daten, etwa Genexpressionsdaten, zur kontextspezifischen Interpretation und Hypothesengenerierung genutzt.

## Perspektiven

Zur Zeit erweitern wir unseren primär biologisch geprägten Fokus in der Informationsextraktion, indem wir verstärkt chemisch und klinisch relevante Informationen berücksichtigen. Von großem Wert für die Pharmaindustrie sind beispielsweise möglichst vollständige Informationen über chemische Verbindungen, deren Eigenschaften und biologische Effekte. Im klinischen Bereich ist es zwingend notwendig, bekannte prognostische Faktoren bei der Planung neuer Studien zu berücksichtigen. In beiden Bereichen verbessert Textmining die Informationsgewinnung.

## Kooperationspartner

TEMIS GmbH, Heidelberg

## Kontakt

Dr. Christian Gieger  
Tel.: 0 22 41/14-23 82  
Fax.: 0 22 41/14-26 56  
christian.gieger@scai.fraunhofer.de

## Bonn-Aachen International Center for Information Technology

### Situation

Das Bonn-Aachen International Center for Information Technology (B-IT) bietet englischsprachige Studienprogramme mit dem Abschluss Master of Science (M. Sc.) in Media Informatics und Life Science Informatics an. Die Abteilung Bioinformatik stellt Vorlesungen und Praktika für Studenten des M.-Sc.-Curriculums für Life Science Informatics bereit. Inhalte der Vorlesungen sind:

- Datenbankdesign für biologische, chemische und medizinische Datenbanken,
- Datenmanagement und Datenintegration,
- Data Mining und maschinelle Lernverfahren,
- Statistische Modellierung und angewandte Biostatistik und
- Semantische Textanalyse und Textmining.

### Ziel

Ziel unseres Engagements in der akademischen Lehre ist es, Aspekte und Inhalte der angewandten Bio- und Chemieinformatik an Studierende weiterzugeben. Hiermit tragen wir dazu bei, Studenten des M. Sc. Studienganges Life Science Informatics optimal auf eine spätere Tätigkeit in der Forschung und Entwicklung – auch in der pharmazeutischen Industrie – vorzubereiten.

### Methoden

In den praktischen Kursen behandeln wir reale mathematische und statistische Probleme, denen wir uns in unseren laufenden Projekten stellen. Die Studenten lernen früh, in einem wissenschaftlichen Projekt zu arbeiten und wissenschaftliche Fragen durch Entwicklung und Optimierung spezifischer Algorithmen und Software-Werkzeuge zu beantworten. Unsere wissenschaftlichen Fragen kommen zumeist aus dem Umfeld unserer Kooperationspartner aus der Pharma- und Biotech-Industrie.

### Ergebnisse

Unsere Tätigkeit am B-IT hat den Studierenden bereits jetzt ein umfassendes Lehrangebot mit starkem Anwendungsbezug ermöglicht. Wir konnten den Studierenden Praktika und Betreuung im Zuge der Mitarbeit als studentische Hilfskräfte anbieten.

### Perspektiven

Die intensive Kooperation mit der Universität Bonn sowie der Fachhochschule Bonn-Rhein-Sieg unterstützt das Lehrangebot der Abteilung Bioinformatik und ermöglicht eine Beteiligung an regionalen Forschungsinitiativen.

### Auftraggeber

Das B-IT wurde mit Unterstützung der Bundesrepublik Deutschland aus Mitteln des Bonn-Berlin-Ausgleichsprogramms eingerichtet. Das Land Nordrhein-Westfalen unterstützt es im Rahmen einer Kooperation der Universität Bonn, der Rheinisch-Westfälische Technische Hochschule Aachen, der Fachhochschule Bonn-Rhein-Sieg und des Fraunhofer-Institutszentrums Schloss Birlinghoven. Damit steht das B-IT neben weiteren Förderprojekten des Bonn-Berlin-Ausgleichsprogramms wie dem Forschungszentrum caesar (center of advanced european studies and research) in Bonn und dem Forschungszentrum LIFE&BRAIN (Neurowissenschaftlich ausgerichtete biomedizinische Technologie-Plattform) in Bonn.

### Kontakt

Dr. Martin Hofmann  
 Tel.: 0 22 41 / 14-28 02  
 Fax.: 0 22 41 / 14-26 56  
[martin.hofmann@scai.fraunhofer.de](mailto:martin.hofmann@scai.fraunhofer.de)

# Optimierung



## Situation

Fragen der Optimierung sind heute in technischen und industriellen Anwendungen sehr weit verbreitet. Bekannte Beispiele sind die optimale Einsatzplanung von Ressourcen (Personal, Maschinen, Kapital), Minimierung von Transportaufwand (Wege, Transportmittel), Minimierung von Baugrößen (VLSI-Layout) sowie die Optimierung von Packdichten (Containerbeladung, Verschnittminimierung). Viele weitere Anwendungsgebiete für Optimierungsaufgaben sind denkbar. Dabei werden die in der Forschung gewonnenen Methoden der Optimierung stetig weiterentwickelt und auf industrielle Probleme angewendet. Die vom Anwender definierten Probleme werden in höchster Praxistreue mit allen vorgegebenen Randbedingungen untersucht und exakt angepasste Verfahren zu deren Lösung erarbeitet.

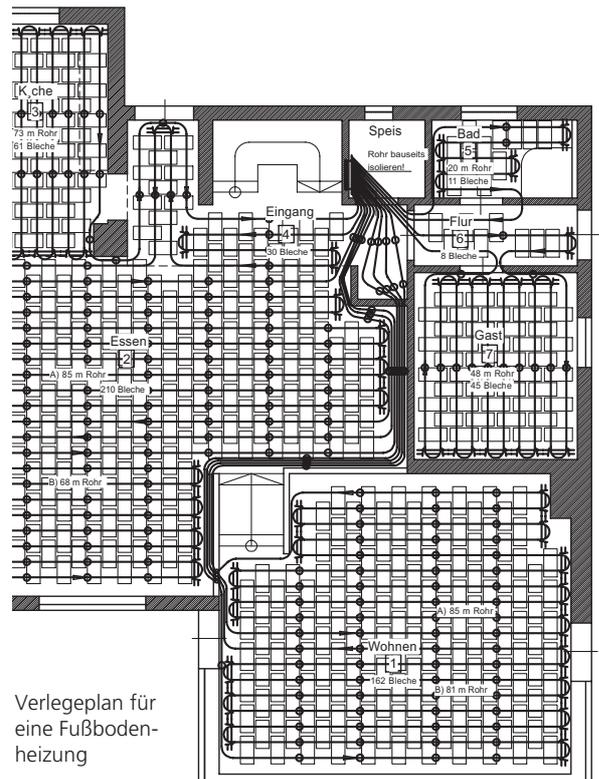
## Lösung

Die betrachteten Aufgaben gehören zur Klasse der sogenannten NP-harten Probleme, d.h. ein Verfahren zur optimalen, zeiteffizienten Lösung der Probleme ist nicht bekannt. Die zur Lösung derartiger Probleme angewendeten Methoden sind recht verschieden voneinander und ihre Auswahl ist abhängig vom konkreten Problem. Wir verwenden exakte und heuristische Optimierungsmethoden (Branch and Bound/Cut/Price, Simulated Annealing, Simulated Trading, Greedy, Tabu Search, Simplex und andere).

Schwerpunkte unserer Arbeit sind:

- Lösung von Verschnitt- und Packungsproblemen in der Textil-, Leder- und Blechindustrie sowie Optimierung der Bauteilanordnung im dreidimensionalen Raum,
- Transportoptimierung, Tourenplanung und Standortwahl,
- Optimierungen im industriellen Produktionsablauf, etwa von Maschinenbelegungs- und Arbeitsplänen und
- Planung für die Flächen- und Raumnutzung sowie Platzierung von Sicherheitsanlagen.

Wir bieten neben der Individualentwicklung auch Standard-Softwarepakete an, die sich bereits seit einigen Jahren im industriellen Einsatz befinden. Diese haben wir weiter verbessert und optimiert und neue Randbedingungen sowie die Behandlung neuer Produktionstechnologien integriert.



Verlegeplan für eine Fußbodenheizung

## Ergebnis

Durch den Einsatz von Optimierungsmethoden im industriellen Umfeld ist es möglich, erhebliche Kosteneinsparungen zu realisieren. Unsere Aktivitäten reichen dabei von der Problemaufnahme beim Kunden, der mathematischen Problemformulierung, der präzisen Berücksichtigung aller Randbedingungen über die Entwicklung und Bereitstellung von Algorithmen und Software bis hin zur Implementierung. Kundenindividuelle Beratung und Schulung runden unser Leistungsspektrum ab.

Neben der Erweiterung der Software in ihren Kerneinsatzgebieten haben wir auch neue Anwendungsfelder erschlossen. So haben wir etwa für die Planung von Fußbodenheizungen (siehe Bild) eine Software entwickelt, die errechnet, wie vorgegebene Schlauchlängen von Rollen optimal geschnitten werden können, damit die erforderlichen Längen in einzelnen Räumen eines Gebäudes eingehalten werden. Ergänzend sind weitere Randbedingungen zu berücksichtigen, wie die Fertigung von Rohren für benachbarte Räume aus möglichst derselben Rolle oder gewisse Toleranzgrenzen, was sowohl den Bedarf als auch den Vorrat angeht.

## Perspektiven

Ein weiteres neues Anwendungsfeld unserer Software haben wir beim Zuschnitt von Blechen erschlossen. Hierzu war die Berücksichtigung neuer Bedingungen notwendig, etwa von zu nutzenden Löchern in Teilen.

Im Bereich dreidimensionaler Anordnungsprobleme haben wir ein Projekt mit der BMW Group und mit Audi gestartet, das sich mit der effizienten Beladung von Containern beschäftigt. Ein wichtiges Ziel ist die Senkung von Transport- und Logistikkosten mit Hilfe einer effizienten Softwarelösung. Eine Möglichkeit, die Effizienz von Transportvorgängen zu verbessern, ist eine Erhöhung der Ausnutzung des vorhandenen Transportvolumens. Ziel ist es, eine möglichst hohe Ausnutzung des Containers bei gleichzeiti-

ger Beachtung verschiedenster Randbedingungen, wie etwa manuelle Be- und Entladbarkeit oder Gewichtsrestriktionen, zu erreichen.

In der Automobilindustrie müssen für die Montage einer Fahrzeugreihe viele, unterschiedlich geformte Teile in Behältern vom Zulieferer zur Montagehalle transportiert werden. Da für den Transport eine Vielzahl an Behältern unterschiedlicher Größe und unterschiedlichen Typs dient, soll das Programm außerdem aus einer Liste von Containern die am besten geeignete Größe für eine gegebene Anzahl von Objekten auswählen können



### Kontakt

Dr. Ralf Heckmann (Abteilungsleiter)  
Tel.: 0 22 41 / 14-28 10  
Fax.: 0 22 41 / 14-26 56  
ralf.heckmann@scai.fraunhofer.de

## Optimierungslösungen für die Industrie

### Situation

Im Arbeitsgebiet Optimierung untersuchen wir schwierige Fragen der Optimierung technischer und industrieller Anwendungen. Die betrachteten Aufgaben gehören zur Klasse der sogenannten NP-harten Probleme, das heißt, ein Verfahren zur optimalen, schnellen Lösung der Probleme ist nicht bekannt. Derartige Probleme sind weit verbreitet und in vielen Branchen anzutreffen. Bekannte Beispiele sind

- die optimale Einsatzplanung von Ressourcen (Personal, Maschinen, Kapital),
- Minimierung der benötigten Transportkapazitäten (Wege, Transportmittel),
- Minimierung von Baugrößen (VLSI-Layout) und
- die Optimierung von Packdichten (Containerbeladung, Verschnittminimierung).

Kommerzielle Lösungen werden häufig nicht angeboten oder sind technisch nicht ausgereift, da die Probleme zu komplex sind. Wir wenden in der Forschung gewonnene Methoden der Optimierung auf industrielle Probleme an und entwickeln sie für die konkrete Anwendung weiter. Dabei untersuchen wir die vom Anwender definierten Probleme in hoher Praxistreue mit allen vorgegebenen Bedingungen und erarbeiten exakt angepasste Lösungsverfahren. Durch unsere langjährige Erfahrung bei der Anwendung klassischer Optimierungsmethoden konnten wir ein umfangreiches Wissen über Einsatz und Wirksamkeit der verschiedenen Verfahren erarbeiten. Die angewandten Methoden sind recht verschieden voneinander und ihre Auswahl hängt vom konkreten Problem ab.

### Lösungen

Ein Schwerpunkt unserer Arbeit ist es, Verschnitt- und Packungsprobleme zu lösen. Wir bieten Individualentwicklung und Standard-Softwarepakete an, die in der Industrie seit einigen Jahren im Einsatz sind. Diese haben wir weiter verbessert und neue Bedingungen sowie die Behandlung neuer Produktionstechniken integriert.

Wir haben die Software in ihren Kern-einsatzgebieten erweitert und neue Anwendungsfelder erschlossen. So haben wir für die Planung von Fußbodenheizungen eine Software entwickelt. Sie errechnet, wie vorgegebene Schlauchlängen von Rollen optimal geschnitten werden können, damit die erforderlichen Längen in den Räumen eines Gebäudes eingehalten werden. Ergänzend sind weitere Bedingungen zu berücksichtigen, wie die Fertigung von Rohren für benachbarte Räume aus möglichst derselben Rolle oder gewisse Toleranzgrenzen, was Bedarf und Vorrat angeht. Die für dieses Anwendungsgebiet speziell entwickelte Software lässt sich natürlich beim Zuschnitt eindimensionaler Materialien (wie Kabel, Rohre, Stangen) einsetzen. Ein weiteres neues Anwendungsfeld unserer Software ist der Zuschnitt von Blechen. Hierzu mussten wir Bedingungen berücksichtigen, etwa von zu nutzenden Löchern in Teilen. Unser Vertriebspartner ist die Firma Jetcam, eines der weltweit führenden Unternehmen in diesem Bereich.



Bild 1: Stanzwerkzeug zur Verschachtelung von Blechteilen

### Perspektiven

Wir bieten Dienstleistungen und Kooperationen in allen Bereichen von Produktion und Logistik an. Gemeinsam mit zwei Großunternehmen beschäftigen wir uns mit den neuen Themen Belegungsplanung von Maschinen und der von Kundenbestellungen abhängigen Produktionsplanung.

Bei dreidimensionalen Anordnungsproblemen haben wir ein Projekt gestartet, das sich mit der effizienten Beladung von Containern beschäftigt (siehe Projektbeispiel Containerbeladung).

Dreidimensionale Anordnungsprobleme treten in unterschiedlichen industriellen Anwendungen auf, bei denen räumliche Kapazitäten (z.B. Laderäume, Container, Transportboxen) möglichst gut ausgenutzt werden sollen, um Kosten (z.B. Lagerkosten, Transportkosten) zu sparen. Durch zunehmende Automatisierung beim Beladen steigt die Nachfrage nach Software zur automatischen Lösung der Anordnungsprobleme. Die Probleme sind mathematisch äußerst schwierig lösbar, was mathematisch nachweisbar ist. Daher liegen in ihrer industriell akzeptierten Lösung noch viele Herausforderungen.



Bild 2: Blechzuschnitt

# Blechverschachtelung

## Aufgabe

Autokarosserien werden aus einigen hundert Metallteilen hergestellt. Im Produktionsablauf werden diese dreidimensionalen Bauteile aus aufgerollten Blechbahnen, so genannten Coils, ausgestanzt, bevor sie geformt und zusammengeschweißt werden. Im Projekt minimieren wir für die BMW Group die Produktionskosten im Karosseriebau (primär bestimmt durch die Materialkosten des Blechs). Wir ermitteln die kostenoptimale Anordnung der Teile auf Blechbahnen, indem wir die zweidimensionalen Teile geeigneten Coils zuordnen. Steht die kostenoptimale Anordnung fest, stellt die BMW Group ein Spezialwerkzeug her, um die Teile wie berechnet auszuschneiden. Bild 1 zeigt ein solches Werkzeug.

## Lösung

Es sind zahlreiche Bedingungen zu berücksichtigen, beispielsweise hat jedes Bauteil spezifische Materialanforderungen. Bauteile dürfen nur dann zusammen angeordnet werden, wenn es ein gemeinsames Material gibt, aus dem alle gefertigt werden dürfen. Zudem dürfen maximal vier Bauteile zusammen angeordnet werden, weil es derzeit nicht möglich ist, Schnittwerkzeuge für komplexere Anwendungen zu bauen.

Auch für die Verschachtelung können zahlreiche Randbedingungen in unsere Software eingegeben werden, etwa ob ein Teil frei drehbar ist oder nicht, ob es mit der Unterseite nach oben platziert werden darf oder ob es spezielle Anforderungen an die Produktionsart gibt.

## Ergebnisse

Vor Realisierung dieses Projektes konnte die BMW Group nur ein Bauteil je Blechbahn fertigen. Dazu wurde zunächst ein rechteckiges oder trapezförmiges Stück abgetrennt, das weiter zurechtgeschnitten wurde. Dabei fielen unnötige Kosten durch Verschnitt an. Um den Produktionsablauf zu optimieren, beauftragte uns die BMW Group mit der Entwicklung eines Lösungsverfahrens und der software-technischen Umsetzung. Die BMW Group setzt die Software mittlerweile zur Produktion ein. Mit ihr erzielt der Automobilhersteller Materialkosteneinsparungen bis zu zehn Prozent.

## Perspektiven

Das von uns entwickelte Lösungsverfahren ist maßgeschneidert auf die Bedürfnisse des Produktionsprozesses bei der BMW Group. Jedoch ist das Anordnungsproblem mit den berücksichtigten Bedingungen typisch für ähnliche industrielle Aufgaben. Auch in anderen Zusammenhängen tritt die Frage auf, wie man eine Menge von Objekten (hier die zweidimensionalen Teile) optimal in kleine Mengen aufteilt (hier Mengen, die auf derselben Blechbahn angeordnet werden). Zum Beispiel in der Logistik bei der Zuordnung von zu beliefernden Kunden zu verschiedenen LKW-Touren. Die Software entwickeln wir mit der BMW Group weiter. Die erste Version unserer Software optimierte lediglich die Materialkosten. Im Zuge der Weiterentwicklung analysierten wir mit BMW die Kosten, die weiter im Produktionsprozess anfallen. Das sind beispielsweise Kosten für Werkzeuginvestitionen, Kosten des Maschinenbetriebs und Personalkosten. Wir haben unser Lösungsverfahren so erweitert, dass die Software diese wesentlich

komplexere Kostenfunktion nun zuverlässig minimiert. Durch diese neue Sichtweise ermöglicht die Software eine wesentlich umfassendere Kostenbetrachtung und Kostenanalyse auf einer übergeordneten Planungsebene. Es sind weitere Schritte in diese Richtung geplant. Einer ist die Entwicklung eines integrierten Optimierungsverfahrens, um die verfügbaren Maschinen optimal zu belegen. Mit dem Ziel einer hohen Maschinenausnutzung und unter Berücksichtigung von Maschinenrestriktionen müssen den Maschinen die jeweils zu schneidenden Anordnungen zugewiesen werden. Ein weiterer Schwerpunkt unserer Arbeit ist es, neue, komplexe Produktionstechnologien in die Software zu integrieren.

## Partner

BMW Group, München

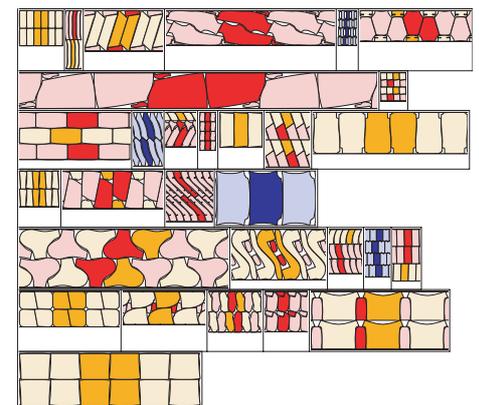


Bild 3: Die Software ermittelt die Anordnung der Teile auf verschiedenen Blechbahnen.

## Containerbeladung



### Aufgabe

Dem Transport von Gütern kommt weltweit eine immer größere und bedeutendere Rolle zu. Die Menge transportierter Güter nimmt ständig zu; in Deutschland wuchs sie um circa 50 Prozent in den letzten zehn Jahren. Gleichzeitig verteuern sich Transporte durch knapp werdende Infrastruktur (etwa Wartezeiten durch Staus und Baustellen), steigende Energiepreise, umweltpolitische Auflagen und Steuern.

Ein wichtiges Ziel von Unternehmen ist es, die Transport- und Logistikkosten zu senken. Der Einsatz geeigneter Software zur Planung und Steuerung von Transportvorgängen ist bei großen Unternehmen mittlerweile zum Alltag geworden. Eine bessere Nutzung des Transportvolumens ist eine weitere Möglichkeit, um die Effizienz von Transportvorgängen zu erhöhen. Wir haben ein Projekt gestartet, das die Packung hochgradig komplexer, dreidimensionaler Objekte in Transportcontainern zum Thema hat. Ziel ist es, eine möglichst hohe Ausnutzung des Containers zu erreichen – bei gleichzeitiger Beachtung mehrerer Bedingungen, wie manuelle Be- und Entladbarkeit oder Gewichtsrestriktionen. Außerdem soll die Software selbst aus einer gegebenen Menge den besten Container ermitteln können.

### Projektziel

Fragen der 3D-Packungsoptimierung treten in Bereichen der Industrie auf, in denen der Wunsch besteht, Transport- und Lagerkapazitäten zu reduzieren, um damit Kosten zu sparen. Gängige Praxis in vielen Unternehmen ist es, diese Packungsprobleme trotz fortschreitender Automatisierung immer noch manuell zu lösen. Aus mathematischer Sicht zählen Packungsprobleme zur Klasse der sogenannten NP-schweren Probleme, d.h. es existiert kein Verfahren, um eine nachweisbar optimale Lösung in vertretbarer Zeit berechnen zu können. Man ist daher auf die Entwicklung neuer Verfahren angewiesen, die in vertretbarer Zeit möglichst gute Lösungen berechnen. Für den häufig auftretenden Fall quader- oder zylinderförmiger Objekte (z.B. Kartons und Rohre) gibt es bereits kommerzielle Lösungen mit unterschiedlichen Eigenschaften und unterschiedlicher Qualität.

Ziel unseres Projektes ist es, automatisch Anweisungen für das Packen beliebig geformter polyedrischer Objekte in quaderförmigen Containern zu erzeugen. Die Anweisungen sollen zeigen, wie die einzelnen Objekte im Container platziert werden müssen, um sein Volumen möglichst gut auszunutzen. Insbesondere die effiziente

Packung komplexer Objekte ist eine aktuelle Forschungsfrage und eine Herausforderung in der industriellen Anwendung.



## Perspektiven

Zum Einsatz kommt die Software zunächst bei den Firmen BMW und Audi. Dort werden für die Montage einer Fahrzeugreihe unterschiedlich geformte Teile in Behältern vom Zulieferer zur Montagehalle transportiert. Da man für den Transport Behälter unterschiedlicher Größe und unterschiedlichen Typs benutzt, soll das Programm außerdem aus einer Liste von Containern die am besten geeignete Größe für eine gegebene Anzahl von Objekten auswählen. Mit Hilfe einer Software für dieses Packungsproblem lassen sich bereits während der Entwicklung neuer Produkte schnelle, übersichtliche Planungen für deren Transport und Lagerung und die dadurch entstehenden

Kosten durchführen, ohne Prototypen in ausreichender Anzahl zu besitzen. Diese Ergebnisse können dann in den Entwurf neuer Produkte einfließen. Die Integration der Packungssoftware in die CAD-Systeme erleichtert die Planungen.

## Partner

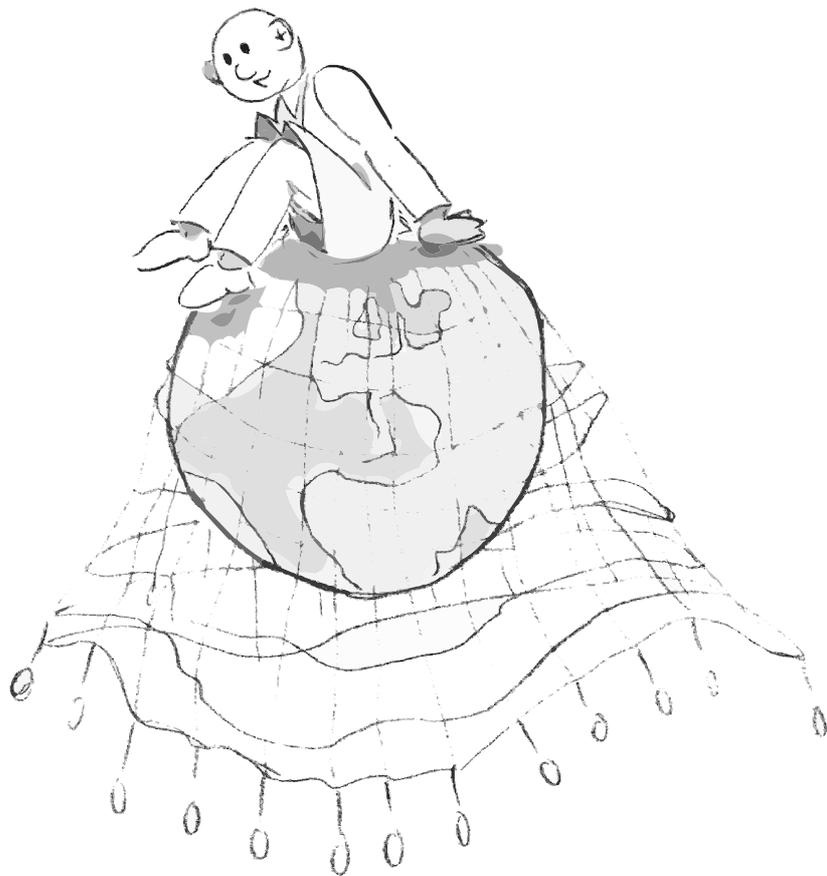
BMW Group, München;  
Audi AG, Ingolstadt;  
MVI SOLVE-IT GmbH, München.

Die Bilder zeigen Automobilteile in Transportbehältern.

Abdruck mit freundlicher Genehmigung  
des Online-Magazines *Logistics Pilot*



# Webbasierte Anwendungen



## Situation

Das Internet hat sich in den letzten Jahren zum Träger neuer Geschäftsmodelle sowohl zwischen Anbietern und Kunden als auch zwischen Firmen und ihren Zulieferern entwickelt. Produktinformationen, Bestellvorgänge sowie Logistikprozesse werden zunehmend über das Internet abgewickelt.

In der virtuellen Produktentwicklung wachsen die neuen Möglichkeiten jedoch sehr zögerlich. Dies liegt unter anderem an den Sicherheitsbedürfnissen der Entwickler, die ihr Wissen aus neuen Produktentwürfen nicht in potenziell unsichere Informationskanäle leiten.

## Lösung

Die Abteilung Webbasierte Anwendungen hat das Ziel, sichere Web-Portale für wissenschaftlich-technische Anwendungen zu schaffen. Solche Portale sind im Internet die Tür zu Software-systemen, die beispielsweise Entwurfsprozesse simulieren und optimieren.

Die Kunden sind große Firmen, die zentrale Hard- und Software ihrer Abteilungen im Intranet anbieten wollen. Aber auch kleine Firmen können über das Internet Simulationsleistungen abrufen, beispielsweise bei SCAI. Für ihre Produktentwicklung müssen sie so keine schnellen Hardwaresysteme und teuren Softwarelizenzen beschaffen.

Das Angebot von SCAI umfasst die Gesamtkonzeption, das Design und die Implementierung webbasierter Anwendungen. Besonders berücksichtigen wir kundenspezifische Anwendungen, die in das Internet integriert werden. In diesen neuen Internetlösungen nutzen wir auch aktuelle Sicherheitstechnologien.

## Aktivitäten

### Bioinformatik-Netzwerk

Eines der ersten Projekte der neuen Abteilung war es, verschiedene Software-Werkzeuge ([www.hnbioinfo.de](http://www.hnbioinfo.de)) aus der Abteilung Bioinformatik in das Helmholtz-Netzwerk für Bioinformatik zu integrieren.

Im Portal ist es möglich, dutzende Softwarewerkzeuge der deutschen Bioinformatik-Forschung interaktiv zu nutzen. So auch die Werkzeuge FlexS<sup>TM</sup>, FlexX<sup>TM</sup> und TopLign<sup>TM</sup> von SCAI.

SCAI strebt eine strategische Kooperation mit der Sun Microsystems GmbH an. Ziel der Zusammenarbeit ist es, Internet-Portale für technisch-wissenschaftliche Anwendungen mit der Software Sun ONE<sup>TM</sup> zu entwickeln.

### Telematik in der Medizin

In Zusammenarbeit mit der JENASENSORIK ([www.jenasensoric.de](http://www.jenasensoric.de)) und der *Telematik-Center TMD* ([www.telematik-tmd.de](http://www.telematik-tmd.de)) haben wir begonnen, ein Patientenüberwachungssystem für Diabetespatienten zu entwickeln. Die Patienten tragen kleine nichtinvasive Multisensoren am Körper und sind in ihrer Bewegungsfähigkeit nicht eingeschränkt. Die Messdaten werden über eine Mobilfunk-Verbindung an einen Zentralrechner gesandt, wo sie gespeichert und einer automatischen Risikoklassifikation unterworfen werden. Das System soll kritische Ausnahmesituationen erkennen, wie einen Schockzustand, und Rettungsmaßnahmen einleiten. Die gesammelten Messreihen nutzen Ärzte für weitere Untersuchungen.

### Grid Computing

Die Idee des Grid Computing ist es, Datenbestände und Rechenleistung weltweit und zu jeder Zeit über eine Grid-Zwischenschicht zugänglich zu machen. Auf diesem Netz wird eine Grid-Infrastruktur geschaffen, die es dem Benutzer ermöglicht, vielfältige Computerleistungen von seinem Arbeitsplatz aus anzufordern: Datenbanken, Speicherplatz, Rechenleistung oder Softwarelizenzen. SCAI betreibt verschiedene PC- und

Workstation-Cluster, die zu einem Grid zusammengeschaltet sind. Auf dieser Basis werden verschiedene Middleware-Systeme, wie Globus, UniCore oder die Grid-Engine von Sun eingesetzt, bewertet und teilweise weiterentwickelt. Ferner dient die SCAI-Installation als Testumgebung für verschiedene internationale Projekte.

Ein Grid auf Basis ihrer Clustersysteme haben SCAI und die C&C Research Laboratories seines Kooperationspartners NEC ([www.ccr1-nec.de](http://www.ccr1-nec.de)) aufgebaut. Dieses Grid dient dazu, Grid-Technologien zu evaluieren, Middleware weiterzuentwickeln und Anwendungen zu testen.



### Kontakt

Dipl.-Inform. Ottmar Krämer-Fuhrmann  
 (Abteilungsleiter)  
 Tel.: 0 22 41/14-22 02  
 Fax.: 0 22 41/14-21 81  
[ottmar.kraemer-fuhrmann@scai.fraunhofer.de](mailto:ottmar.kraemer-fuhrmann@scai.fraunhofer.de)

## Anwendungen des Grid Computing

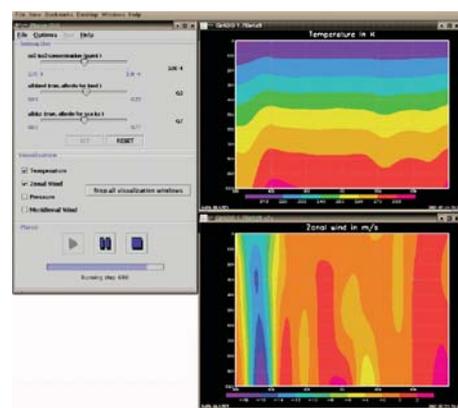
Die Kooperation zwischen SCAI und den C&C Research Laboratories von NEC in Sankt Augustin besteht seit 1994. Seit 1997 haben wir verschiedene Parallelrechnersysteme der NEC Cenju-Serie im Projekt „Massive Parallel Computing in a Scientific Environment“ (PreCiSE) installiert, um Forschungs- und Entwicklungsaufträge durchzuführen. So bearbeiteten wir gemeinsam Fragen zum Scheduling und zu parallelen Dateisystemen. Durch die Evaluierung von leistungsfähigen, kostengünstigen PC-Clustern hat sich der Fokus der Kooperation verlagert auf:

- Kopplung von PC-Clustern,
- Einbettung von PC-Clustern in Grid-Umgebungen,

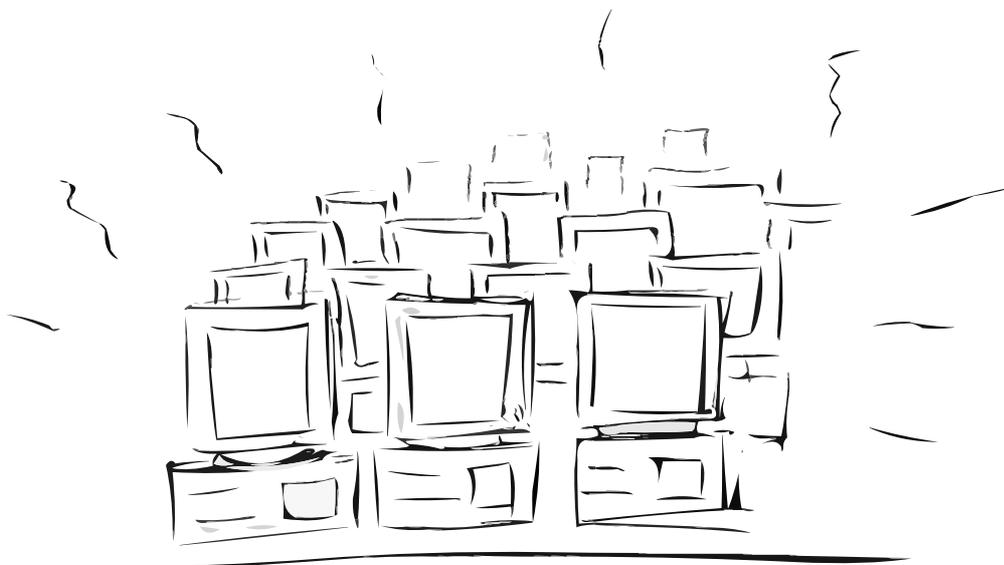
- Ressourcenmanagement im Grid und
- produktive Nutzung des Grids für Anwendungen.

Im Projekt *SCAI and NEC Grid Application (SaNGriA)* entwickelten wir ein Grid-Testbett mit PC-Clustern von NEC C&CRL und SCAI, um hierauf Anwendungen anzupassen und zu evaluieren.

Als Grid-Software installierten wir das Globus-Toolkit (Version 2.4) auf den PC-Clustern, die unter Linux betrieben wurden. Globus wird in Forschungseinrichtungen und in der Industrie eingesetzt. Auch das Fraunhofer Resource Grid basiert auf Globus. Die Cluster sind intern jeweils mit Myrinet und Fast Ethernet vernetzt und zusätzlich über

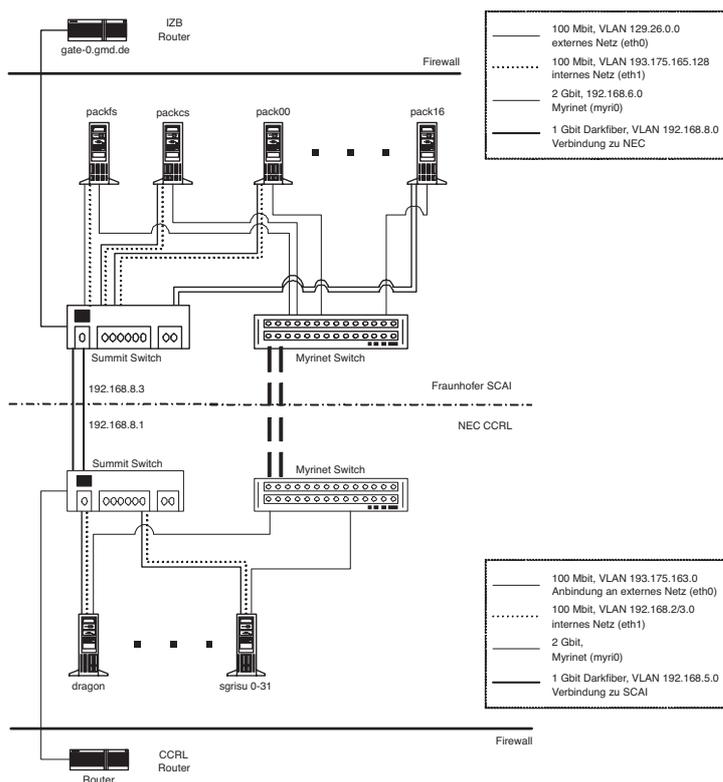


Klimasimulation auf dem Grid



eine eigene, schnelle Glasfaserleitung verbunden. Um das Testbett zu evaluieren, wählten wir PUMA aus, eine Anwendung aus der Klimasimulation, die SCAI zum Planeten-Simulator weiterentwickelt. In der Evaluierung untersuchen wir das Verhalten der Anwendung in einer Grid-Umgebung. Besonders interessiert uns dabei der Einfluss des Testbetts, denn dieses besteht aus heterogener Hardware, unterschiedlichen Compilern und verschiedenen Netzwerktechnologien. Damit ist es sehr gut geeignet, die Situation in realen Grids nachzubilden, insbesondere Grids eines Firmen-Intranet.

Im Anschluss an das laufende Projekt planen wir, es auf weitere Anwendungen auszuweiten. Seit Ende 2003 ist das neue Globus-System verfügbar, welches auf Web-Service-Technologie aufbaut. Damit lässt sich die spannende Frage beantworten, wie industrielle Anwendungen als Service in einer Grid-Umgebung genutzt werden können.



Aufbau des SCAI-NEC Testbetts

### Auftraggeber

C&C Research Laboratories;  
NEC Europe Limited.

### Kontakt

Wolfgang Ziegler  
Tel.: 0 22 41/14-22 58  
Fax.: 0 22 41/14-28 89  
wolfgang.ziegler@scai.fraunhofer.de

## Simulationsdienstleistungen über Web-Portale nutzen

### Aufgabe

Der Ausbau des Internet und die Entwicklung sicherer Zugriffs- und Kommunikationsmethoden ermöglichen eine neue, integrative Nutzung von Simulationstools. Web-Portale bieten die Integration von Daten, Anwendungen und Ressourcen in einer personalisierten Umgebung. Durchs Intranet oder Internet können Entwickler über eine grafisch unterstützte Benutzerschnittstelle auf zentrale Ressourcen wie Datenbanken oder Rechnersysteme zugreifen. Dies vermindert Investitionskosten sowie den Bedarf an Installations- und Wartungsarbeiten und spart zudem Lizenzgebühren.

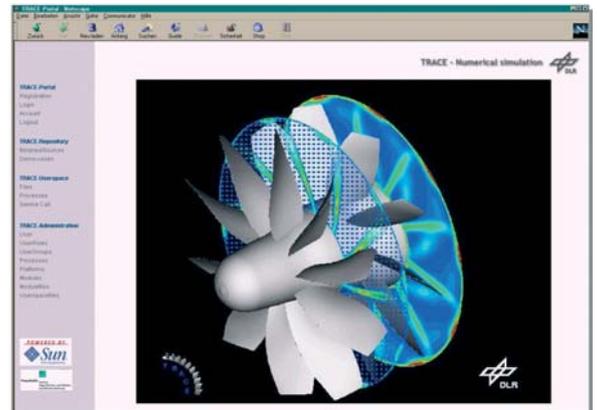
Wichtige Komponenten eines Web-Portals sind

- die Benutzerverwaltung als Basis der Authentifizierung,
- das Objekt-Management zur Realisierung von „User-Workspaces“ und
- die Steuerung von Prozessen mit (abteilungsübergreifender) Kostenabrechnung von Rechnerressourcen und Lizenzgebühren.

Die Benutzer können unabhängig von Ort und Zeit auf die im Portal integrierten Ressourcen zugreifen. Das ist möglich durch moderne Authentifizierungsmethoden, sichere Kommunikation und eine schnelle Datenbank-Anbindung.

Durch gestiegene Rechenleistung gewinnt die numerische Simulation auch bei der Entwicklung von Turbomaschinen an Bedeutung. Das Institut für Antriebstechnik des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Köln-Porz hat die Software TRACE (Turbo-machinery Research Aerodynamic Computational Environment) entwickelt. Sie bietet einen detaillierten Einblick in komplexe Strömungsprozesse.

Die Bedienoberfläche des TRACE-Webportals



### Lösung

Fraunhofer-SCAI hat die Software TRACE in ein Web-Portal integriert und ermöglicht der Industrie so eine bessere Nutzung. Portale haben nicht nur den Vorteil einer einfachen Nutzung per Browser, sondern bieten zudem eine personalisierte Internet-Umgebung und Benutzerführung. Diese wird vielen verschiedenen Benutzerrollen gerecht:

- Internetsurfer erhalten erste Informationen über das TRACE-System und können sich registrieren.
- Registrierte Benutzer können TRACE an ausgewählten Beispielen testen – lokal auf einem Arbeitsplatzrechner (Client) oder „remote“ auf Rechnerplattformen des Portals (Server).
- Lizenzierte Kunden greifen auf die Dokumentation, das Programm-System TRACE und Updates zu. Sie können mit TRACE simulieren und Daten ihres „User Workspace“ bearbeiten und auswerten. Weiterhin können Lizenznehmer über das Portal Beratungen anfordern und Service-Anfragen an das Support-Team für TRACE senden.
- Administratoren verwalten Benutzer mit Rollen- und Gruppendifinition, führen Konten und erledigen die Abrechnung. Zusätzlich sind auch alle Funktionen für das Datei- und Prozess-Management vorhanden. Insbesondere die Rollen- und Gruppendifinition von Benutzern erlaubt es, Entwicklergruppen oder Abteilungen optimal zu unterstützen.

Die Portallösung ist nicht nur portabel und einfach zu adaptieren, sondern auch modular aufgebaut. Auf diese Weise lässt sich das Portal leicht an neue Technologien anpassen.

Der Zugriff vom Client-System auf den Web-Portal-Server geschieht im einfachsten Fall mittels eines Webbrowsers über ein verschlüsseltes Protokoll. Die Benutzer authentifizieren sich am Server und werden durch eine grafische Benutzeroberfläche geführt und unterstützt. Die Berechnungen werden – transparent für den Benutzer – auf einem Rechner-Grid ausgeführt. Die Implementation nutzt die Software Sun Open Network Environment (Sun ONE™).

### Perspektiven

Auf Grundlage der Referenz-Installation am DLR bietet das SCAI Unternehmen Komplettlösungen für die Konzeption, das Design und die Realisierung von Internetpräsenzen. Web-Portale vereinigen mit einfach zu bedienenden grafischen Werkzeugen den sicheren, Kosten sparenden und komfortablen Zugriff auf Datenbestände und die Nutzung verschiedener Auswertungs- und Simulationstools.

## Ausgewählte Publikationen (2002 bis 2003)

2002

- Albrecht, Mario; Hanisch, Daniel; Zimmer, Ralf; Lengauer, Thomas:  
**Improving fold recognition of protein threading by experimental distance constraints.**  
In: *Silico Biology 2* (2002), Special Issue GCB 2001, Nr. 30, S. 325-337
- Bendisch, Jürgen; Reimann, Stefan; von Trotha, Hartmuth:  
**Site percolation for a class of constrained honeycomb lattices.**  
In: *Physica A* 307 (2002), S. 1-14
- Benkner, Siegfried; Brandes, Thomas:  
**Efficient Parallel Programming on Scalable Shared Memory Systems with High Performance-Fortran.**  
In: *Concurrency and Computation: Practice and Experience* 14 (2002), Nr. 8-9, S. 789-803.
- Clees, Tanja; Stüben, Klaus:  
**Algebraic Multigrid for Industrial Semiconductor Device Simulation.**  
In: *Challenges in Scientific Computing* (Proceedings of the 1st International CISC Conference Berlin, October 2-5, 2002). Berlin: Springer, 2002
- Eggeling, Eva; Ta'asan, Shlomo:  
**An Optimization Algorithm for the Meteorological Data Assimilation Problem.**  
In: Chan, Tony et. al. (Hrsg.): *Recent Progress in Computational and Applied PDEs*. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2002
- Freudenberg, Jan; Zimmer, Ralf; Hanisch, Daniel; Lengauer, Thomas:  
**A hypergraph-based method for unification of existing protein structure- and sequence-families.**  
In: *Silico Biology 2* (2002), Special Issue GCB 2001, Nr. 31, S. 339-349
- Füllenbach, Tanja:  
**Algebraic multigrid for selected systems of partial differential equations.**  
Köln: Universität zu Köln, 2002.  
– Forschungsbericht Graduiertenkolleg Scientific Computing 4/2001 bis 3/2002.  
Füllenbach, Tanja; Stüben, Klaus:  
**Algebraic multigrid for selected PDE systems.**  
In: Bemelman, Josef et. al. (Hrsg.): *Elliptic and Parabolic Problems* (Proceedings of the 4th European Conference Rolduc, Gaeta 2001). New Jersey: World Scientific, 2002, S. 399-410
- Hanisch, Daniel; Zien, Alexander; Zimmer, Ralf; Lengauer, Thomas:  
**Co-clustering of biological networks and gene expression data.**  
*Bioinformatics* 18 (2002), Nr. 1, S. 145-154
- Hanisch, Daniel; Zimmer, Ralf; Lengauer, Thomas:  
**ProML – the Protein Markup Language for specification of protein sequences, structures and families.**  
In: *Silico Biology 2* (2002), Special Issue GCB 2001, Nr. 29, S. 313-324
- Hoffmann, Daniel; Schnaible, Volker; Wefing, Stephan; Albrecht, Mario; Hanisch, Daniel; Zimmer, Ralf:  
**A New Method for the Fast Solution of Protein-3D-Structures, Combining Experiments and Bioinformatics.**  
In: Hoffmann, K.-H. (Hrsg.): *Coupling of Biological and Electronic Systems* (Proceedings of the 2nd Caesarium Bonn, November 2001). Bd. 2. Berlin: Springer 2002
- Hotzel, Eckehart:  
**Right projective semigroups with 0.**  
In: *Journal of Pure and Applied Algebra* 170 (2002), S. 35-66
- Klawonn, Axel; Widlund, Olof B.; Dryja, Maksymilian:  
**Dual-Primal FETI Methods for Three-Dimensional- Elliptic Problems with Heterogeneous- Coefficients.**  
In: *SIAM Journal on Numerical Analysis* 40 (2002), Nr. 1, S. 159-179
- Lengauer, Thomas (Hrsg.):  
**Bioinformatics – From Genomes to Drugs.**  
Weinheim: Wiley-VHH, 2002. Bd. 1 : Basic Technologies, Bd. 2 : Applications
- Lengauer, Thomas:  
**Appendix: Glossary of algorithmic terms in bioinformatics.**  
In: Lengauer, Thomas (Hrsg.): *Bioinformatics – From Genomes to Drugs*. Bd. 1 : Basis Technologies. Weinheim: Wiley-VCH, 2002, S. 405-424
- Lengauer, Thomas:  
**From Genomes to Drugs with Bioinformatics.**  
In: Lengauer, Thomas (Hrsg.): *Bioinformatics – From Genomes to Drugs*. Bd. 1 : Basis Technologies. Weinheim: Wiley-VCH, 2002, S. 3-25
- Lengauer, Thomas:  
**Future Trends.**  
In: Lengauer, Thomas (Hrsg.): *Bioinformatics – From Genomes to Drugs*. Bd. 2 : Applications. Weinheim: Wiley-VCH, 2002, S. 171-187
- Li, Ziming; Schwarz, Fritz; Tsarev, Serguei P.:  
**Factoring Zero-dimensional Ideals of Linear Partial Differential Operators.**  
In: Mora, Teo (Hrsg.): *Proceedings of the International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation ISSAC 2002* (Lille, France, July 2002). ACM Press, 2002, S. 168-175
- Oosterlee, Cornelis W.; Wienands, Roman:  
**A Genetic Search for Optimal Multigrid Components within a Fourier Analysis Setting.**  
In: *SIAM Journal on Scientific Computing* 24 (2002), Nr. 3, S. 924-944
- Post, Peter; Schilcher, Karl:  
 **$K_3$  form factors at order  $p^6$  of chiral perturbation theory.**  
In: *The European Physical Journal C* 25 (2002), S. 427-443

- Rarey, Matthias:  
**Protein-Ligand Docking in Drug Design.**  
In: Lengauer, Thomas (Hrsg.): Bioinformatics – From Genomes to Drugs. Bd. 1 : Basis Technologies. Weinheim: Wiley-VCH, 2002, S. 315-360
- Reinhardt, Silke; Gastreich, Markus; Marian, Christel M.:  
**Quantum Chemical Investigation of Initial Reactions between the Molecular Precursor TADB and Ammonia.**  
In: Journal of Physical Chemistry A, Gas-Phase reactions 106 (2002), Nr. 16, S. 4205-4216
- Schwarz, Fritzt:  
**ALLTYPES: An Algebraic Language and Type System.**  
In: Cohen, Arjeh M. et. al. (Hrsg.): Proceedings of the First International Congress of Mathematical Software ICMS 2002 (Peking, China, August 2002). World Scientific, 2002, S. 486-500
- Schwarz, Fritz:  
**Equivalence Classes, Symmetries and Solutions- of Linear Third Order Differential Equations.**  
In: Computing 69 (2002), Nr. 2, S. 141-162
- Sommer, Ingolf; Zien, Alexander; von Öhsen, Niklas; Zimmer, Ralf; Lengauer, Thomas:  
**Confidence Measures for Protein Fold Recognition.**  
In: Bioinformatics 18 (2002), Nr. 6, S. 802-812
- Stahl, Martin; Rarey, Matthias; Klebe, Gerhard:  
**Screening of Drug Databases.**  
In: Lengauer, Thomas (Hrsg.): Bioinformatics – From Genomes to Drugs. Bd. 2 : Applications. Weinheim: Wiley-VCH, 2002, S. 137-170
- Stüben, Klaus:  
**Scalable Solvers for Sparse Linear Systems.**  
In: ERCIM News 50 (2002), S. 20-21
- Trottenberg, Ulrich; Linden, Johannes; Thole, Clemens-A.:  
**Simulation und virtuelles Engineering.**  
In: Sommerlatte, T. (Hrsg.): Angewandte Systemforschung. Wiesbaden: Gabler, 2002, S. 285-296
- Zien, Alexander; Fluck, Juliane; Zimmer, Ralf; Lengauer, Thomas:  
**Microarrays: How Many Do You Need?**  
In: Proceedings of the sixth annual conference on Computational biology RECOMB'02 (Washington DC, April 2002). New York: ACM Press, 2002, S. 321-330
- Zimmer, Ralf; Lengauer, Thomas:  
**Protein Structure Prediction.**  
In: Lengauer, Thomas (Hrsg.): Bioinformatics – From Genomes to Drugs. Bd. 1 : Basis Technologies. Weinheim: Wiley-VCH, 2002, S. 237-313
- 2003**
- Eggeling, Eva:  
**Meteorological Data Assimilation – Local Analysis and Efficient Numerical Techniques for Constrained Differential Optimization.**  
Aachen: Shaker Verlag, 2003 (Fraunhofer Series in Information and Communication Technology 1/2003)
- Gaspar, F.J.; Lisbona, F.J.; Oosterlee, Cornelis W.; Wienands, Roman:  
**An efficient multigrid solver based on distributive smoothing for poroelasticity equations.**  
In: SIAM Journal on Scientific Computing, 2003, submitted
- Gaspar, F. J.; Lisbona, F.J.; Oosterlee, Cornelis W.; Wienands, Roman:  
**Systematic comparison of coupled and distributive smoothing in multigrid for the poroelasticity system.**  
In: Numerical Linear Algebra with Applications 11 (2003), Nr. 2-3, S. 93-113
- Galbas, Hans-Georg; Kolp, Otto:  
**Multiphase overpartitioning in crashworthiness simulation.**  
In: Onate, Eugenio (Hrsg.): VII International Conference on Computational plasticity COMPLAS 2003 (Barcelona, Spain, Juni 2003).
- Gieger, Christian; Deneke, Hartwig; Fluck, Juliane:  
**The Future of Text Mining in Genome-based Clinical Research.**  
In: BIOSILICO 1 (2003), S. 97-102
- Hanisch, Daniel; Fluck, Juliane; Mevissen, Hans-T.; Zimmer, Ralf:  
**Playing Biology's Name Game: Identifying Protein Names in Scientific Texts.**  
In: R. B. Altman et. al. (Hrsg.): Biocomputing 2003 (Proceedings of the Pacific Symposium Kauai, Hawaii January 2003). Singapore: World Scientific, 2003, S. 403-414
- Joppich, Wolfgang; Quaas, Johannes:  
**Coupling General Circulation Models on a Meta-Computer.**  
In: Sloot, Peter M. et. al. (Hrsg.): Proceedings of the International Conference on Computational Science ICCS 2003 (Melbourne, Australia and St. Petersburg, Russia, June 2-4, 2003). Heidelberg: Springer, 2003, S. 161-170 (Lecture Notes in Computer Science 2658)
- Kuhlmann, Annette; Thole, Clemens-A.; Trottenberg, Ulrich:  
**AUTOBENCH/AUTO-OPT: Towards and Integrated- Construction Environment for Virtual- Prototyping in the Automotive Industry.**  
In: Kranzlmüller, Dieter; Kacsuk, Peter; Dongarra, Jack (Hrsg.): Recent Advances in Parallel Virtual Machine and Message Passing Interface. Heidelberg: Springer, 2003, S. 686-690 (Lecture Notes in Computer Science 2840)

Li, Ziming; Schwarz, Fritz; Tsarev, Serguei:  
**Factoring systems of linear PDEs with finite-dimensional solution space.**  
In: Journal of Symbolic Computation 36 (2003), Nr. 3-4, S. 443-471

MacLaren, Jon; Sander, Volker; Ziegler, Wolfgang:  
**Advance Reservations: State of the Art.**  
Global Grid Forum, 2003

Mohr, Markus; Wienands, Roman:  
**Cell-centered Multigrid Revisited.**  
In: Computing and Visualization in Science (2003), submitted

Öhsen, Niklas von; Sommer, Ingolf; Zimmer, Ralf:  
**Profile-Profile Alignment: A Powerful Tool for Protein Structure Prediction.**  
In: Altman, Russ B. et. al. (Hrsg.): Bio-computing 2003 (Proceedings of the Pacific Symposium PSB 2003, Kauai, Hawaii, January 3-7, 2003). Singapore: World Scientific, 2003, S. 252-263

Reinhardt, Silke:  
**Atomare Verknüpfungen in (Carbo)-Borosilazan-Hochleistungskeramiken.**  
Aachen: Shaker Verlag, 2003 (Fraunhofer Series in Information and Communication Technology 5/2003).

Reinhardt, Silke; Marian, Christel M.:  
**Carboborosilazane Ceramics: Initial Reactions between TSDE and Methylamine – A Combined Quantum Chemical and First Principles Molecular Dynamics Study.**  
Journal of Non-Crystalline Solids (2003), submitted

Schwarz, Fritz:  
**Symmetries of Second- and Third-Order Ordinary Differential Equations.**  
In: Winkler, Franz; Langer, Ulrich (Hrsg.): Symbolic and Numerical Scientific Computation (Second International Conference, SNSC 2001, Hagenberg, Austria, October 10-11, 2001). Berlin: Springer, 2003, S. 108-139 (Lecture Notes in Computer Science 2630)

Schwarz, Fritz; Gurski, V.; Samsonov, A.:  
**Classical and non-classical symmetries for non-linear equations with dispersion and dissipation.**  
In: Technical Physics 48 (2003), S. 1-5

Stüben, Klaus; Delaney, Patrick; Chmakow, Serguei:  
**Algebraic Multigrid (AMG) for Ground Water Flow and Oil Reservoir Simulation.**  
In: Proceedings of MODFLOW and More 2003, Understanding through Modeling (Golden, Colorado, Sept 17-19, 2003).

Trottenberg, Ulrich; Linden, Johannes:  
**Simulation und Optimierung – Innovation durch Mathematik.**  
In: Warnecke, Hans-Jürgen; Bullinger Hans-Jörg (Hrsg.): Kunststück Innovation: Praxisbeispiele aus der Fraunhofer-Gesellschaft. Berlin: Springer, 2003, S. 55-60

Zimmermann, Marc; Rarey, Matthias; Naumann, T.; Matter, H., Hessler, G.; Lengauer, Thomas et.al.:  
**Extracting Knowledge from High-Throughput Screening Data: Towards the Generation of Biophore Models.**  
In: Proceedings of the 14th European EuroQSAR 2002 Symposium Bournemouth, UK: Designing Drugs and Crop Protectants: processes, problems and solutions. Massachusetts: Blackwell Publishing, 2003, S. 63-67

## Dissertationen

Eggeling, Eva:

**Meteorological Data Assimilation – Local Analysis and Efficient Numerical Techniques for Constrained Differential Optimization.**

Universität zu Köln, Dissertation, 2002

Reinhardt, Silke:

**Atomare Verknüpfungen in (Carbo)-Borozalisan-Hochleistungskeramiken.**

Universität Düsseldorf, Dissertation, 2002

Maaß, Astrid:

**Modellierung von Protein-Ligand-Komplexen: Validierung und vorhersage von ausgewählten Fällen.**

Universität Bonn, Dissertation, 2003

Zien, Alexander:

**Computational Analysis of Gene Expression Data.**

Universität Bonn, Dissertation, 2003

## Mitarbeit in Gremien

**Görg, Bruno**

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

**Krapp, Michael**

- ERCIM-Newsletter, Editorial Board
- Bonner Medienclub

**Linden, Johannes**

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

**Joppich, Wolfgang**

- Beirat Bundeswettbewerb Informatik, stv. Vorsitzender

**Stüben, Klaus**

- Copper Mountain Conference on Multigrid Methods, Organization Committee

**Trottenberg, Ulrich**

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

**Ziegler, Wolfgang**

- Global Grid Forum
- ERCIM Task Force on Grids (geht 2004 im EU Network of Excellence CoreGrid auf)
- Program Committee Workshop on Programming Paradigms for Grid & Metacomputing Systems 2004

## Informationen zur Anfahrt

### Mit dem Auto

Auf der **A59** bis Abfahrt Bonn-Beuel, Hangelar; dann rechts abbiegen auf die B56 Richtung Sankt Augustin und Siegburg (ostwärts); in Höhe von Sankt Augustin-Hangelar (Rechtsabbieger-Spur, Ampel, Wegweiser nach Schloss Birlinghoven und Bonn-Hoholz) rechts abbiegen in die Konrad-Adenauer-Straße; nach ca. drei Kilometern ist links die Einfahrt zum Schloss.

Über die **A3** kommend bis Autobahnkreuz Sankt Augustin/Hennef. Weiter auf die A 560 Richtung Bonn bis Ausfahrt Siegburg-Mülldorf. Auf der B56 weiter Richtung Bonn. An der Ampel in Sankt Augustin-Hangelar dem Wegweiser nach Schloß Birlinghoven und Bonn-Hoholz folgend links abbiegen in die Konrad-Adenauer-Straße. Nach 3 km liegt auf der linken Seite die Einfahrt zum Institutszentrum Schloss Birlinghoven.

Das Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI befindet sich auf dem Campus des Fraunhofer-Institutszentrums Schloss Birlinghoven in Gebäude C3.

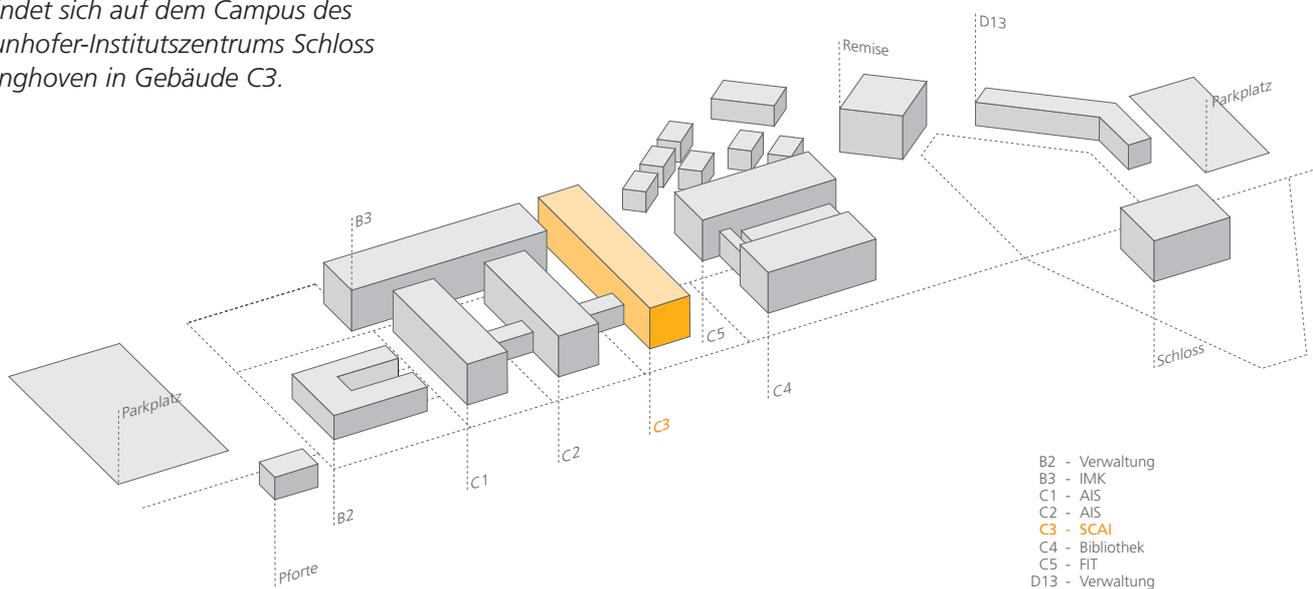
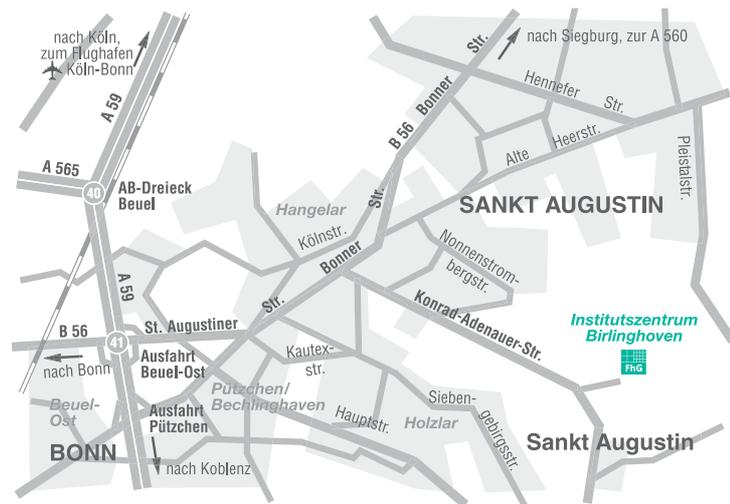
### Mit der Bahn

Vom Hauptbahnhof Bonn ab Bushaltestplatz B3 mit Bus 634 nach Hoholz bis zur Endstation (Schloss Birlinghoven, Hoholz); Bus fährt zu typischen Zeiten alle 20 Minuten, planmäßige Fahrzeit 35 Minuten.

Vom Bahnhof Siegburg/Bonn (ICE Haltepunkt der neuen rechtsrheinischen Strecke Köln - Frankfurt) dauert die Fahrt mit dem Taxi zum Schloss Birlinghoven zehn bis 15 Minuten und kostet ca. 15 Euro.

### Mit dem Flugzeug

Vom Flughafen Köln/Bonn mit dem Bus 670 nach Bonn Hauptbahnhof, meist alle 20 Minuten, planmäßige Fahrzeit 30 Minuten; weiter wie oben. (Alternative Taxi: ca. 25 km, 20 Minuten, 30 Euro).



## Adressen

Fraunhofer-Institut für Algorithmen und  
Wissenschaftliches Rechnen SCAI

Schloss Birlinghoven  
53754 Sankt Augustin

Telefon: 0 22 41/14-27 60  
Telefax: 0 22 41/14-24 60  
info@scai.fraunhofer.de  
www.scai.fraunhofer.de

### Institutsleitung

Prof. Dr. Ulrich Trottenberg  
(Institutsleiter)  
Tel.: 0 22 41/14-27 60  
Fax.: 0 22 41/14-24 60  
trottenberg@scai.fraunhofer.de

Dr. Johannes Linden (stv.)  
Tel.: 0 22 41/14-29 10  
Fax.: 0 22 41/14-21 02  
johannes.linden@scai.fraunhofer.de

Planung und Controlling  
Dipl.-Math. Carl Vogt  
Tel.: 0 22 41/14-26 92  
Fax.: 0 22 41/14-20 95  
carl.vogt@scai.fraunhofer.de

Marketing und Kommunikation  
Dipl.-Journ. Michael Krapp  
Tel.: 0 22 41/14-29 35  
Fax.: 0 22 41/14-21 67  
michael.krapp@scai.fraunhofer.de

## Impressum

© Fraunhofer-Institut für Algorithmen  
und Wissenschaftliches Rechnen  
SCAI 2004

Alle Rechte vorbehalten.  
Ohne schriftliche Genehmigung des  
Herausgebers ist es nicht gestattet, den  
Bericht oder Teile daraus in irgendeiner  
Form durch Fotokopie, Mikrofilm  
oder andere Verfahren zu reprodu-  
zieren oder in eine für Maschinen,  
insbesondere Datenverarbeitungs-  
anlagen, verwendbare Form zu über-  
tragen. Dasselbe gilt für das Recht der  
öffentlichen Wiedergabe.

Warennamen werden ohne  
Gewährleistung der freien  
Verwendbarkeit benutzt.

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

### Redaktion

Dipl.-Journ. Michael Krapp (verantw.)  
Gordon Bolduan

### Illustration und Gestaltung

Traugott Haas

### Mitarbeit

Michael Gehrmann, Markus Möritz,  
Jennifer Sauerland

### Druck

Köllen Druck und Verlag GmbH, Bonn