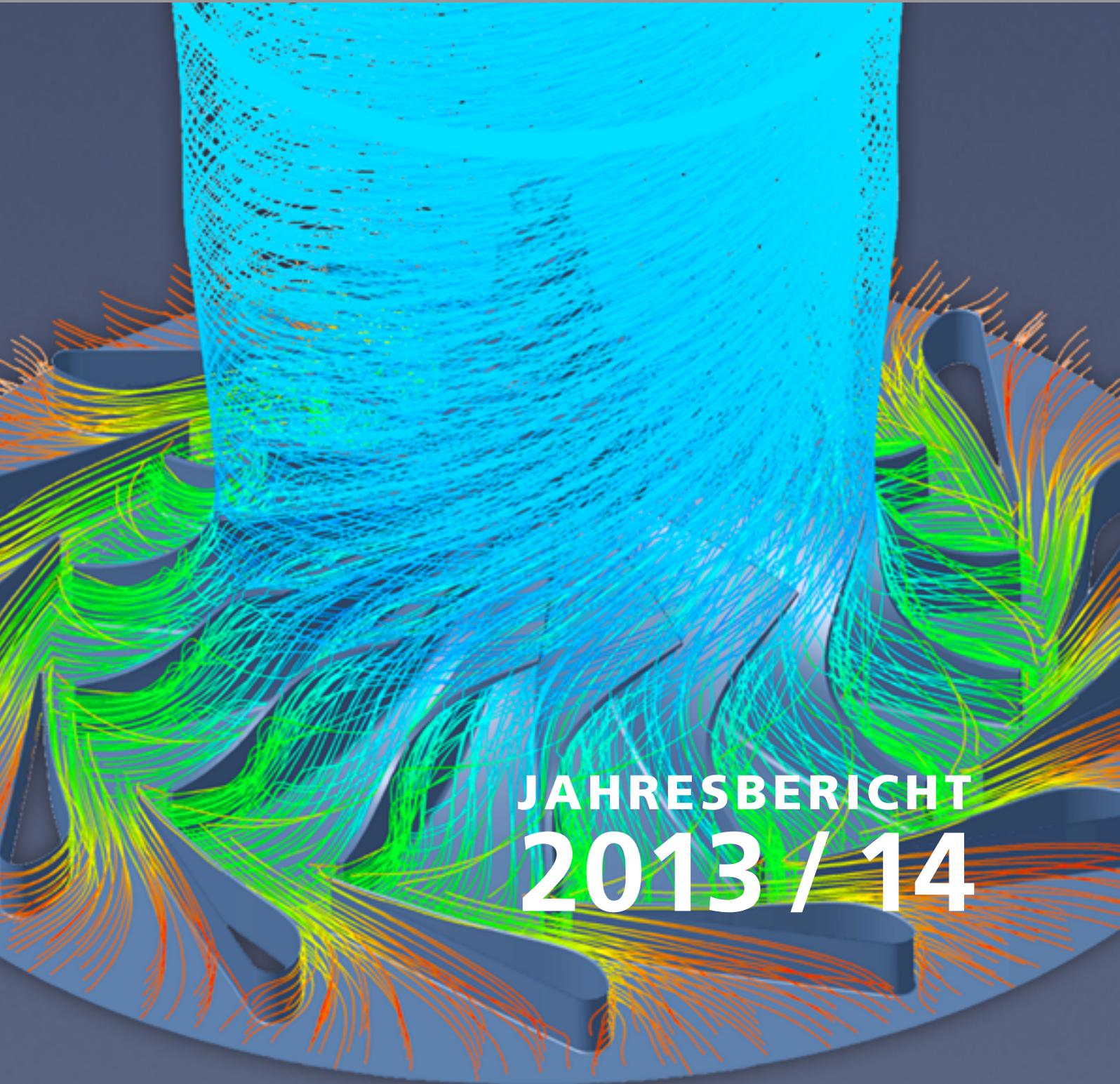




Fraunhofer

SCAI

FRAUNHOFER-INSTITUT FÜR ALGORITHMEN UND WISSENSCHAFTLICHES RECHNEN SCAI



**JAHRESBERICHT
2013 / 14**

**JAHRESBERICHT
2013 / 14**

INHALT

Vorwort	5	Virtual Material Design	40
Profil, Kuratorium, Spin-off	6	Computerchemie und Materialforschung	42
Zahlen und Fakten	7	Multiskalenmodelle in der Materialforschung	43
Die Fraunhofer-Gesellschaft	8	High Performance Analytics	44
Netzwerk	9	Optimierung und statistische Analyse	46
Forschung und Lehre	10	Computational Finance	48
SCAALights	11	Risiko-Management für Lebensversicherungen	50
Produkte	14	Numerische datenbasierte Vorhersage	52
Multiphysics	16	Effiziente Datenanalyse in der Produktentwicklung	54
Hochleistungskeramik in kleinen Gasturbinen	18	Meshfree Multiscale Methods	56
Strömungssimulation optimiert Laborgeräte	19	IT-Lösungen für Kunden und für SCAI	58
High Performance Computing	20	Weiterführende Informationen	60
Quellcode automatisch parallelisieren	22	Online-Rubriken des Jahresberichts	61
Schnelle Belichtung von Leiterplatten	23	Anfahrt	62
Schnelle lineare Löser	24	Impressum, Anschrift	63
SAMG – ein Framework für hocheffiziente Löser	26	Bioinformatik	28
Praxisbeispiele	27	Molekulare Ursachen von Alzheimer verstehen	30
Optimierung	34	Big-Data-Analysen in der Medizin	31
Guillotine-Schnittpläne effizient optimieren	36	Suche nach der richtigen Strategie zur Synthese	32
Ressourceneffizienz durch Optimierung	38	Große Rechenleistung für kleine Unternehmen	33
Optimierte 3D-Verpackungsplanung	39	Optimierung	34



Liebe Leserinnen und Leser,

im vergangenen Jahr haben wir die Mission des Fraunhofer-Instituts für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen SCAI fokussiert: Ziel des Instituts ist die Entwicklung und Bereitstellung innovativer Methoden im Bereich Computational Science und deren Umsetzung in die industrielle Praxis. SCAI kombiniert mathematisches und informatisches Wissen mit dem Schwerpunkt in der Algorithmik zum Nutzen von Kunden und Projektpartnern.

In einigen Bereichen hat unser Institut eine weltweit führende Position erreicht. Dazu gehören beispielsweise die Arbeiten über schnelle Algorithmen für schwach besetzte Gleichungssysteme (Software *SAMG*), die Lösung von Packungs- und Zuschnittproblemen (Software *AutoNester*, *PackAssistant*) oder die multidisziplinäre Simulation (Software *MpCCI*). Wir sind für Industrie und Wissenschaft ein kompetenter und gefragter Forschungs- und Entwicklungspartner für innovative Produkte und Problemlösungen im Bereich Computational Science.

Um auch für die Zukunft gut aufgestellt zu sein, haben wir unser Portfolio durch eine Reihe innovativer Themen erweitert. Die schon länger bestehenden und auch die in den letzten Jahren eingerichteten Geschäftsfelder *Virtual Material Design*, *High Performance Analytics*, *Numerische datenbasierte Vorhersage* und *Computational Finance* entwickeln sich erfolgreich. Neu hinzugekommen sind im Jahr 2013 das Geschäftsfeld *Meshfree Multiscale Methods* unter der Leitung von Prof. Dr. Marc Alexander Schweitzer sowie das Geschäftsfeld *High Performance Computing*, das von Dr. Thomas Soddeman vertreten wird. Insgesamt befinden sich derzeit sechs Geschäftsfelder in einem systematischen Aufbau und werden in Zukunft zum weiteren Wachstum des Instituts beitragen.

Die wirtschaftliche Entwicklung des Instituts war in den Jahren 2013 und 2014 sehr erfolgreich. Die Wirtschaftsertragsquoten lagen bei 44 beziehungsweise 50 Prozent. Hinzu kommen jeweils Projekterträge in Höhe von 25 bis 30 Prozent des Institutshaushalts. Dies war nur durch die Leistung und das außerordentliche Engagement aller Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter zu erreichen.

Die vergangenen beiden Jahre wurden durch einen Strategieprozess begleitet. Die dabei entwickelten Ziele und Maßnahmen wurden in einem Strategieaudit mit externen Auditoren aus Wissenschaft und Wirtschaft evaluiert. In ihren Gutachten haben die Auditoren die strategische Planung des Instituts bestätigt. Wir sehen daher erwartungsvoll in die Zukunft und hoffen, den Ertrag weiter steigern zu können.

Wir laden Sie ein, auf den folgenden Seiten mehr über unsere Forschungsarbeiten, unsere Produkte und unsere Dienstleistungen zu erfahren.

Prof. Dr. Michael Griebel



Sitzung des Kuratoriums vom 15. Mai 2014 auf Schloss Birlinghoven. Das Bild zeigt von links: Dr. Guy Lonsdale, Prof. Dr. Marc Alexander Schweitzer, Prof. Dr. Michael Schäfer, Dr. Klaus Stüben, Dr. Klaus Tschira, Dr. Claus Axel Müller, Prof. Dr. Jochen Garcke, Dr. Anton Schüller, Prof. Dr. Michael Griebel, Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz, Carl Vogt, Dr. Bernd Thomas, Dr. Ralf Heckmann, Dr. Thomas Soddemann, Prof. Dr. Alexander Kurz, Dr. Marc Zimmermann, Dr. Jan Hamaekers, Stephan Springstube, Dr. Ulrich Leiner.

Institutsleitung

Prof. Dr. Michael Griebel

Kuratorium

Forschungsabteilungen

Simulationsanwendungen

Dr. Johannes Linden

Dr. Bernd Thomas, Vorsitzender

Numerische Software

Dr. Klaus Stüben

Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz, *TU München*

Bioinformatik

Prof. Dr. Martin Hofmann-Apitius

Dr. Thomas Lorenz, *BASF AG, Ludwigshafen*

Optimierung

Dr. Ralf Heckmann

Dr. Claus Axel Müller, *Gauss Centre for Supercomputing, Bonn*

Virtual Material Design

Dr. Jan Hamaekers

Dr. Stefan Reimann-Andersen

High Performance Analytics

Dr. Tanja Clees

Prof. Dr. Michael Schäfer, *TU Darmstadt*

Computational Finance

Prof. Dr. Thomas Gerstner

Ulrich Schüller, *Bundesministerium für Bildung und Forschung*

Numerische datenbasierte Vorhersage

Prof. Dr. Jochen Garcke

Dr. Klaus Tschira, *Klaus Tschira Stiftung, Heidelberg*

Meshfree Multiscale Methods

Prof. Dr. Marc Alexander Schweitzer

Spin-off

Zentrale Bereiche

Planung und Controlling

Carl Vogt

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

Marketing und Kommunikation

Michael Krapp

IT-Infrastruktur

Horst Schwichtenberg

Außenstelle Bonn

Dr. Jan Hamaekers

scapos AG

Schloss Birlinghoven

53754 Sankt Augustin

www.scapos.com

Externe Erträge

Fraunhofer SCAI hat im Jahr 2014 Wirtschaftserträge in Höhe von 4,9 Millionen Euro (2013: vier Millionen Euro) erzielt. Dabei lagen sowohl 2013 als auch 2014 die Erträge aus der Lizenzierung der Software-Produkte von Fraunhofer SCAI über drei Millionen Euro. Für 2014 wurde hier mit mehr als 3,8 Millionen Euro sogar ein neuer Höchstwert erreicht. Der Anteil der Wirtschaftserträge am Betriebsaufwand des Instituts stieg 2014 erstmals auf 50 Prozent und liegt damit im fünften Jahr in Folge deutlich über 40 Prozent. Mit diesen hohen Wirtschaftserträgen nimmt das Institut regelmäßig einen der vorderen Plätze unter den Instituten des Fraunhofer-Verbunds Informations- und Kommunikationstechnologie ein.

Garanten für die hohen Lizenzerlöse sind vor allem die aktuellen Versionen der erfolgreichen Software-Produkte *AutoNester* (automatische optimierte Anordnung von Schnittbildern), *PackAssistant* (optimierte Verpackung von Bauteilen in Behälter), *MpCCI* (Software zur Kopplung industrieller Simulationsprogramme) und *SAMG* (Software-Paket zur hocheffizienten Lösung großer Gleichungssysteme).

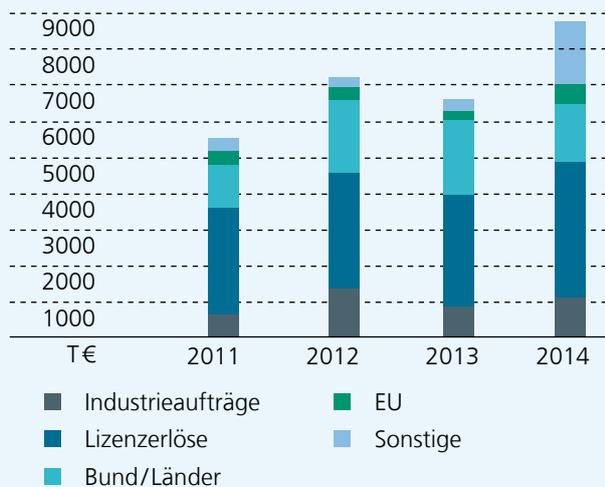
Aufwand

Der Betriebsaufwand des Instituts (Personal- plus Sachaufwand) lag 2014 mit 9,7 Millionen Euro um rund 0,6 Millionen Euro über dem von 2013. Der Gesamtaufwand stieg 2014, unter anderem bedingt durch Investitionen in die Rechnerausstattung des Instituts, von 9,3 auf 10,7 Millionen Euro.

Personal

Im Jahr 2014 hat Fraunhofer SCAI insgesamt 139 Personen beschäftigt. Für die kommenden Jahre ist – im Einklang mit dem Aufbau der neuen Geschäftsfelder – eine moderate Erhöhung der Personalstärke geplant.

Externe Erträge



Aufwand



Personal



DIE FRAUNHOFER-GESELLSCHAFT



1



2

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

Die Fraunhofer-Gesellschaft betreibt in Deutschland derzeit 66 Institute und Forschungseinrichtungen. Knapp 24 000 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter, überwiegend mit natur- oder ingenieurwissenschaftlicher Ausbildung, erarbeiten das jährliche Forschungsvolumen von mehr als 2 Milliarden Euro. Davon fallen rund 1,7 Milliarden Euro auf den Leistungsbereich Vertragsforschung. Über 70 Prozent dieses Leistungsbereichs erwirtschaftet die Fraunhofer-Gesellschaft mit Aufträgen aus der Industrie und mit öffentlich finanzierten Forschungsprojekten. Knapp 30 Prozent werden von Bund und Ländern als Grundfinanzierung beigesteuert, damit die Institute Problemlösungen entwickeln können, die erst in fünf oder zehn Jahren für Wirtschaft und Gesellschaft aktuell werden.

Internationale Kooperationen mit exzellenten Forschungspartnern und innovativen Unternehmen weltweit sorgen für einen direkten Zugang zu den wichtigsten gegenwärtigen und zukünftigen Wissenschafts- und Wirtschaftsräumen.

Mit ihrer klaren Ausrichtung auf die angewandte Forschung und ihrer Fokussierung auf zukunftsrelevante Schlüsseltechnologien spielt die Fraunhofer-Gesellschaft eine zentrale Rolle im Innovationsprozess Deutschlands und Europas. Die Wirkung der angewandten Forschung geht über den direkten Nutzen für die Kunden hinaus: Mit ihrer Forschungs- und Entwicklungsarbeit tragen die Fraunhofer-Institute zur Wettbewerbsfähigkeit der Region, Deutschlands und Europas bei. Sie fördern Innovationen, stärken die technologische Leistungsfähigkeit, verbessern die Akzeptanz moderner Technik und sorgen für Aus- und Weiterbildung des dringend benötigten wissenschaftlich-technischen Nachwuchses.

Ihren Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern bietet die Fraunhofer-Gesellschaft die Möglichkeit zur fachlichen und persönlichen Entwicklung für anspruchsvolle Positionen in ihren Instituten, an Hochschulen, in Wirtschaft und Gesellschaft. Studierenden eröffnen sich aufgrund der praxisnahen Ausbildung und Erfahrung an Fraunhofer-Instituten hervorragende Einstiegs- und Entwicklungschancen in Unternehmen.

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

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

2 Joseph von Fraunhofer (1787 - 1826).

Vorstand:

*Prof. Dr.-Ing. habil. Prof. e.h.
Dr.-Ing. E.h. mult. Dr. h.c.
Reimund Neugebauer
(Präsident)*

*Prof. (Univ. Stellenbosch)
Dr. rer. pol. Alfred Gossner
Prof. Dr. rer. publ. ass. iur.
Alexander Kurz
Prof. Dr.-Ing. Dr. h. c. mult.
Alexander Verl*

*Fraunhofer-Gesellschaft
zur Förderung der ange-
wandten Forschung e.V.
Hansastraße 27c
80686 München
www.fraunhofer.de*



MITGLIEDSCHAFT IN VERBÜNDEN DER FRAUNHOFER-GESELLSCHAFT

Fraunhofer-Verbund IUK-Technologie

Der Fraunhofer-Verbund Informations- und Kommunikationstechnologie (IUK) entwickelt Strategien für mittelfristige Forschungsschwerpunkte. Er unterstützt Mitgliedsinstitute bei Technologietransfer und Marketing. Durch internationale Forschungsprogramme sind die Institute mit Unternehmen und Forschungseinrichtungen vernetzt. www.iuk.fraunhofer.de

Fraunhofer-Allianz Cloud Computing

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

Fraunhofer-Allianz Big Data

Der Einsatz von Big Data schafft besonders in der Wirtschaft einen Wissensvorsprung für mehr Effizienz und Wertschöpfung. Mit der Fraunhofer-Allianz Big Data bündeln 25 Institute ihre branchenübergreifende Expertise. Das Angebot reicht von marktgerechten Big-Data-Lösungen für individuelle Fragestellungen bis hin zur Qualifizierung von Nachwuchskräften zu Data Scientists. www.bigdata.fraunhofer.de

Fraunhofer-Allianz Numerische Simulation

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



Institut für Numerische Simulation (INS) der Universität Bonn

Das INS ist ein mathematisches Forschungsinstitut mit den Schwerpunkten Wissenschaftliches Rechnen sowie Numerische Analysis und Numerische Simulation an der Universität Bonn. Das Institut versteht sich als Brücke zwischen Mathematik und Informatik. Es entwickelt in seiner Forschungsarbeit Werkzeuge zur numerischen Simulation in Natur- und Ingenieurwissenschaften, Geowissenschaften, Medizin, Life Sciences sowie Wirtschaft und Finanzindustrie. Der Institutsleiter von Fraunhofer SCAI, Prof. Dr. Michael Griebel, ist zugleich geschäftsführender Direktor des INS.

Teile der SCAI-Abteilung *Virtual Material Design* sind seit Juni 2010 am INS angesiedelt. Ferner leiten Prof. Dr. Jochen Garcke, Abteilungsleiter *Numerische datenbasierte Vorhersage*, und Prof. Dr. Marc Alexander Schweitzer, Abteilungsleiter *Meshfree Multiscale Methods*, jeweils auch eine Arbeitsgruppe am INS. Hierdurch hat sich die Kooperation zwischen Fraunhofer SCAI und der Universität Bonn intensiviert.

www.ins.uni-bonn.de

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

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

www.b-it-center.de

Goethe-Universität Frankfurt am Main

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

Hochschule Bonn-Rhein-Sieg, Sankt Augustin

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

SCAILIGHTS

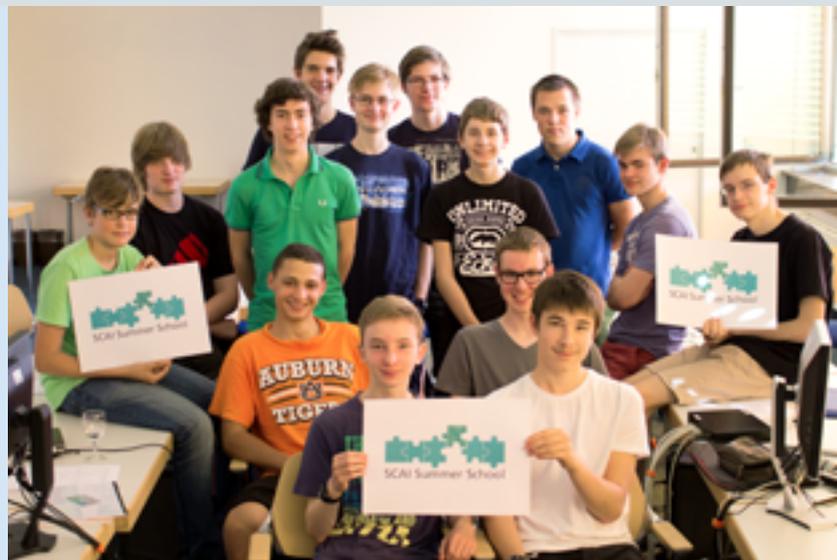


Spiel mit der optimalen Packung: Der PackAssistant auf der Bonner Wissenschaftsnacht

Auf der Bonner Wissenschaftsnacht, die alle zwei Jahre stattfindet, ist Fraunhofer SCAI traditionell mit einem Exponat vertreten. Im Wissenschaftszelt auf dem Bonner Münsterplatz kann die Öffentlichkeit sich an zwei Tagen über die Forschung an den regionalen Wissenschaftseinrichtungen informieren. Im Jahr 2014 präsentierte SCAI ein interaktives Exponat zur Software *PackAssistant* der Abteilung *Optimierung*. Der Stand von SCAI war von zahlreichen Besucherinnen und Besuchern umlagert, die spielerisch versuchten, möglichst dichte Packungen zu erzielen.

Die SCAI-Sommerschule bot Schülern Einblicke in spannende Forschungsprojekte

In den SCAI-Sommerschulen 2013 und 2014 beschäftigten sich mathematisch-naturwissenschaftlich interessierte Schülerinnen und Schüler zwei Wochen lang mit Arbeitsweisen des Wissenschaftlichen Rechnens. Sie lernten anhand aktueller Forschungsprojekte moderne mathematische Methoden für mehrere Anwendungsfelder kennen, wie Verkehrssimulationen, Wettervorhersage, die Behandlung von Optimierungsproblemen, die Verschlüsselung mit Hilfe großer Primzahlen oder das mp3-Format. Die Teilnehmer bewerteten das Angebot durchweg positiv und sehen technische Berufe in neuem Licht.



Software MYNTS: Energienetze flexibel planen, analysieren und optimieren

Die Betreiber von Energienetzen überwachen permanent den Zustand ihrer Leitungen und planen Reaktionen auf mögliche Zustandsänderungen. Die Software *MYNTS* (Multiphysical Network Simulation Framework) ermöglicht es, komplexe Netze für Gas, Wasser oder Energie zu planen und ihr Verhalten im Betrieb vorherzusagen. Auf der Messe E-world in Essen vom 11. bis 13. Februar 2014 präsentierte SCAI den multiphysikalischen Netzwerksimulator in der Version 2.1. Das Bild zeigt Dr. Tanja Clees, Leiterin der Abteilung *High Performance Analytics*, im Gespräch mit Kunden.



SCAI-Mitarbeiter Einar Smith veröffentlicht Biografie über den deutschen Informatik-Pionier Carl Adam Petri

Prof. Dr. Carl Adam Petri (Bild) war einer der bekanntesten deutschen Informatiker. Die nach ihm benannten Petri-Netze bezeichnen eine Methode zur Beschreibung »nebenläufiger« Prozesse. Petris Theorie beeinflusst bis heute viele wissenschaftliche Disziplinen. Petri, 2010 verstorben, war Leiter des GMD-Instituts für Methodische Grundlagen der Informationstechnik, aus dem später SCAI hervorging. Dr. Einar Smith, wissenschaftlichen Wegbegleiter Petris, hat dessen Leben und Werk nun in einer Biographie beschrieben. Sie ist im Springer-Verlag erschienen.

Absolventen interessieren sich für eine Karriere bei Fraunhofer SCAI

Fraunhofer SCAI hat sich am 26. und 27. November 2014 zum zweiten Mal auf dem Absolventenkongress Deutschland in Köln präsentiert. Die Nachfrage nach Karrierechancen bei SCAI war auf der Jobmesse auch in diesem Jahr sehr groß. Auf dem »Unternehmenstag« der Hochschule Bonn-Rhein-Sieg in Sankt Augustin war SCAI am 14. November 2014 auf einem Gemeinschaftsstand mit den Instituten IAIS und FKIE (Wachtberg) vertreten. Prof. Dr. Hartmut Ihne (im Bild links), Präsident der Hochschule, informierte sich über die Zusammenarbeit von Fraunhofer-Instituten und Fachhochschule.



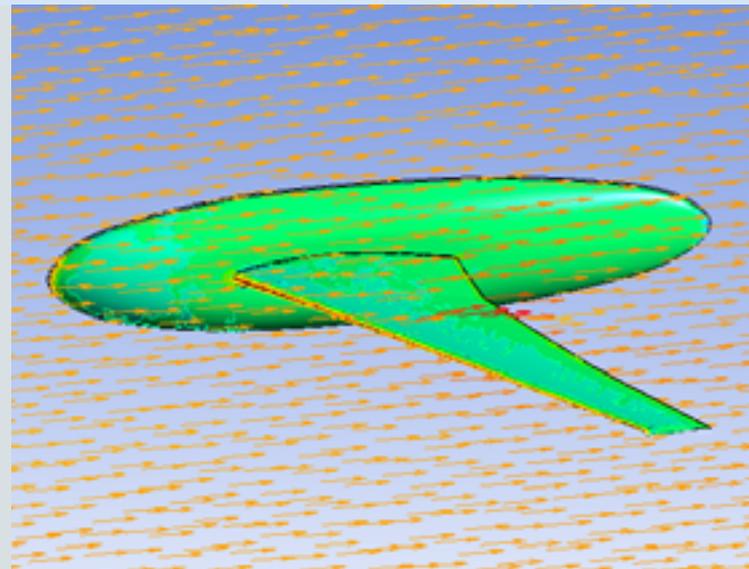
Aktuelle Software und Anwendungen des High Performance Computing für die Industrie

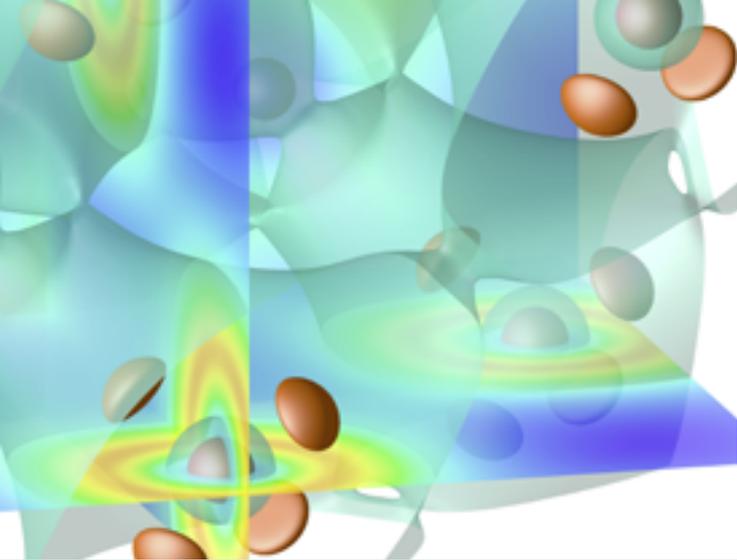
Wie im Jahr 2013 hat sich Fraunhofer SCAI vom 22. bis 26. Juni 2014 auf der International Supercomputing Conference (ISC) in Leipzig präsentiert. Das Geschäftsfeld *High Performance Computing* stellte die Library for Accelerated Math Applications (LAMA) vor, mit deren Hilfe sich Algorithmen zu numerisch-mathematischen Problemen auf Basis dünnbesetzter Matrizen implementieren lassen. Das Geschäftsfeld *High Performance Analytics* präsentierte das Projekt SIMOPEK. Dabei geht es um Simulation und Optimierung des Energiekreislaufs von Klimatisierungsnetzen in Rechenzentren.



Fraunhofer SCAI richtet europäische Konferenz zum Thema Multiphysics-Simulationen aus

Werden bei numerischen Simulationen eine oder mehrere physikalische Eigenschaften in wechselseitiger Abhängigkeit voneinander berechnet (Bild: Luftströmung um einen Flugzeugflügel), spricht man von Multiphysics. Einen Überblick über den Stand der Technik auf dem Gebiet der Multiphysics-Simulationen bot die »NAFEMS European Conference: Multiphysics Simulation 2014« am 21. und 22. Oktober 2014 in Manchester. Fraunhofer SCAI veranstaltete die Konferenz gemeinsam mit der Organisation NAFEMS und der Internationalen Gesellschaft für Multiphysics.



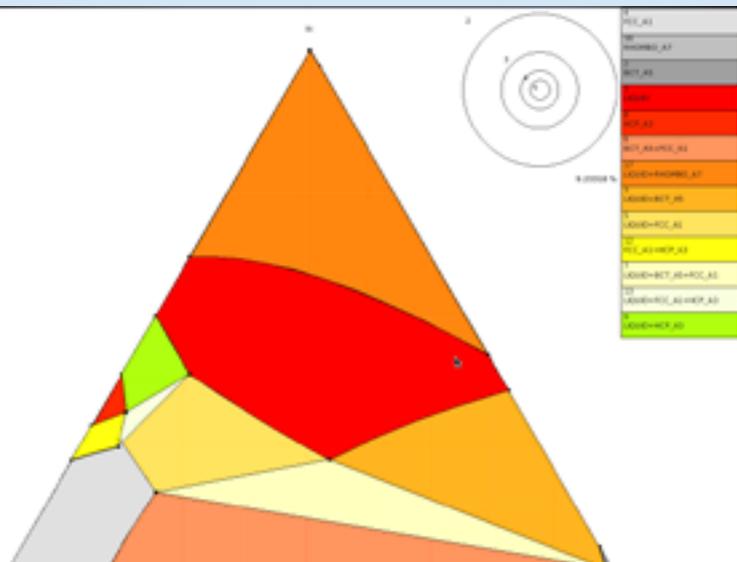
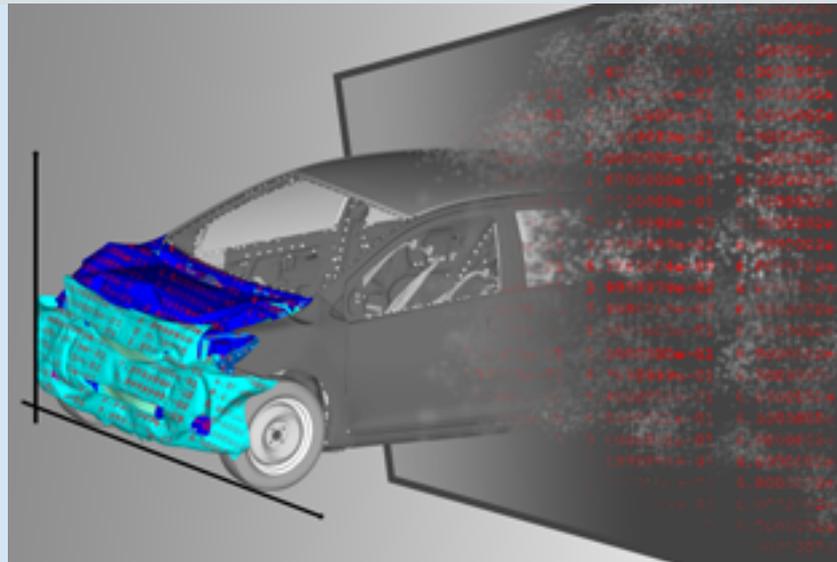


Simulationswerkzeuge auf atomistischer Skala zur Optimierung von Elektronikkomponenten

Elektronikkomponenten sind heute so klein, dass einzelne Atome einen Einfluss auf ihre Leistung und Zuverlässigkeit haben. Da hier die gängigen Modellierungen versagen, sind neue Simulationswerkzeuge auf atomistischer Skala notwendig. Im Projekt ATOMMODEL, gefördert vom Bundesministerium für Bildung und Forschung, entwickelt SCAI eine neue Methode zur automatischen Generierung reaktiver Potentialmodelle und integriert diese in *Tremolo-X*, eine Software von SCAI für molekulardynamische Berechnungen. Das Bild zeigt die Elektronenstruktur von Galliumarsenid.

Mit VAVID bekommen Technologie-Unternehmen ihre Datenmassen besser in den Griff

Im Projekt VAVID entwickelt SCAI gemeinsam mit Partnern aus Industrie und Wissenschaft Methoden, um die enormen Datenmengen zu bewältigen, die in ingenieurtechnischen Branchen anfallen. Beispiele sind Ergebnisdaten aus numerischen Simulationen (Bild: Crash-Simulationen) sowie Sensordaten von Maschinen. Durch vergleichende Analysen und Datenkompression werden die Daten auf ihren relevanten Kern reduziert. Das spart Kosten für die Datenspeicherung und hilft, Produkte zu optimieren. VAVID wird vom Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert.

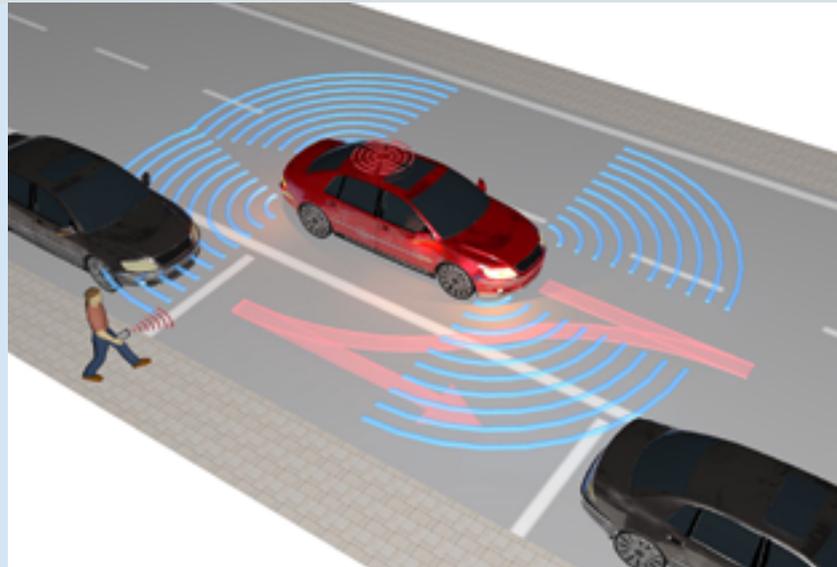


Effiziente und parallele Software zur Simulation in der Materialforschung

Für viele Anwendungen in der Materialforschung ist die Berechnung chemischer Gleichgewichte in multikomponentigen Vielphasensystemen in Abhängigkeit von Temperatur und Druck von grundlegender Bedeutung. Beispiele dafür sind metallische Legierungen und keramische Materialien. Im Projekt »Bephasys« hat SCAI in Kooperation mit der GTT Technologies GmbH in Herzogenrath den Prototyp eines effizienten und parallelen Simulationsprogramms entwickelt. Bephasys wurde vom Bundesministerium für Bildung und Forschung gefördert. Das Bild stellt das 3D-Phasendiagramm einer Blei-Wismut-Zinn-Legierung dar.

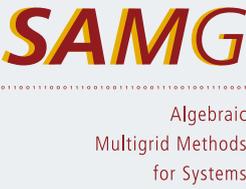
MACH macht Anpassungen von Software an heterogene Hardware überflüssig

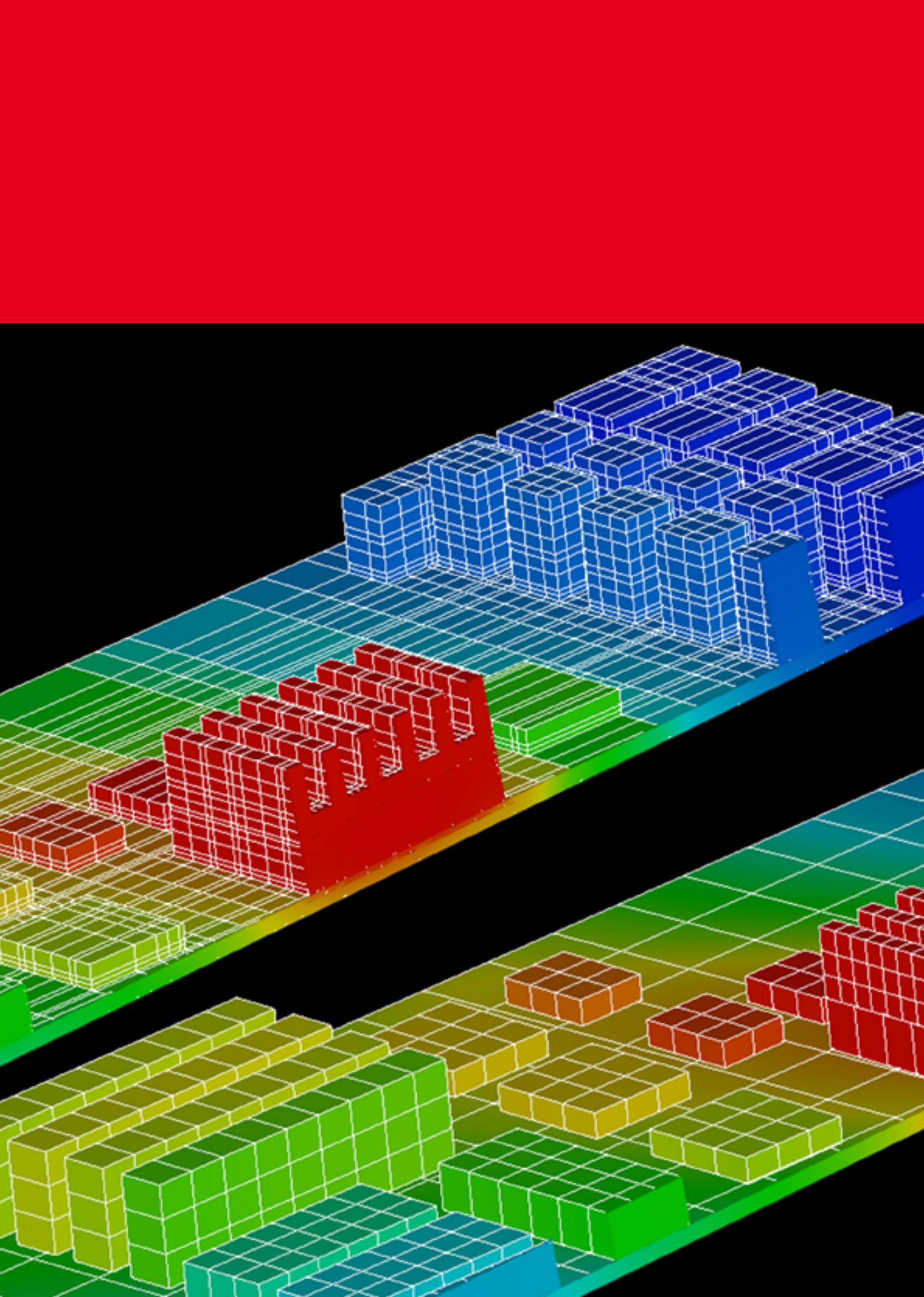
Im Bereich eingebetteter Systeme, die beispielsweise bei autonomen Fahrzeugen (Bild) eine Rolle spielen, und im High Performance Computing ändern sich die Rechnerarchitekturen immer schneller. Hardware-Beschleunigungen, etwa durch den Einsatz von Grafikkarten, erfordern stets aufs Neue komplexe Anpassungen der Anwender-Software an heterogene Hardware. Daher werden im Projekt MACH domänenspezifische Sprachen und High-Performance-Bibliotheken entwickelt, die Anpassungen der Anwender-Software überflüssig machen. Das Projekt wird von der Europäischen Kommission gefördert.



PRODUKTE

	<p>Optimierte automatische Anordnung von Schnittbildern</p>	<p><i>AutoNester</i> optimiert die automatische Anordnung von Schnittbildern für Textilien, Leder, Metalle, Holz, Kunststoffe oder Verbundwerkstoffe, etwa bei der Herstellung von Bekleidung, Möbeln, Automobilen, Maschinen, Flugzeugen oder Schiffen. Die Software verschachtelt die Schnittbilder optimal und minimiert so den Verschnitt.</p> <p>www.scai.fraunhofer.de/autonester</p>
	<p>Kompaktierung von 2D-Schnittbildern</p>	<p><i>AutoCompactor</i> ist eine Software zur Kompaktierung zweidimensionaler Schnittbilder. Die Software verdichtet sowohl automatisch mit einer Software erzeugte Schnittbilder als auch von Hand gefertigte Schnittbilder. Dabei nutzt <i>AutoCompactor</i> die gleiche Programmierschnittstelle (API) wie die Software <i>AutoNester</i>.</p> <p>www.scai.fraunhofer.de/compactor</p>
	<p>Reduzierung von Materialverschchnitt in der Holz-, Glas-, Metall- und Kunststoffindustrie</p>	<p><i>AutoPanelSizer</i> erstellt in kurzer Zeit hocheffiziente Schnittpläne und trägt dadurch wesentlich zur Reduzierung von Materialverschchnitt bei. Durch eine genauere Modellierung der Möglichkeiten und Restriktionen der Fertigungsanlage sowie durch bessere Optimierungsalgorithmen konnte mit <i>AutoPanelSizer</i> bei ersten Kunden gegenüber der bisher verwendeten Optimierungssoftware der Materialverschchnitt um etwa 14 Prozentpunkte reduziert werden.</p> <p>www.scai.fraunhofer.de/autopanelSizer</p>
	<p>Automatische Produktionsplanung</p>	<p><i>CutPlanner</i> ist ein Software-Paket zur automatischen Produktionsplanung (Cut Order Planning) in der textilverarbeitenden Industrie, das dazu beiträgt, die aus Material- und Produktionskosten bestehenden Gesamtkosten zu minimieren.</p> <p>www.scai.fraunhofer.de/cutplanner</p>
	<p>Optimierte 3D-Verpackungsplanung</p>	<p><i>PackAssistant</i> ist die führende Software zur optimierten Verpackung baugleicher Bauteile in Containern. Zeitaufwändiges Herumprobieren mit komplexen Geometrien und nicht optimalen Ergebnissen gehört damit der Vergangenheit an. <i>PackAssistant</i> reduziert Kosten und bietet Verpackungsplanern eine schnelle, intuitive Lösung.</p> <p>www.packassistant.de</p>
	<p>Kopplung von Simulationsprogrammen</p>	<p><i>MpCCI</i> koppelt Simulationsprogramme und löst auf diesem Weg multidisziplinäre Probleme. Die Software unterstützt die führenden industriellen Simulationswerkzeuge. Dank <i>MpCCI</i> können Unternehmen gemeinsam mit SCAI schwierige Aufgaben durch gekoppelte Simulation bewältigen.</p> <p>www.mpcci.de</p>
	<p>Kopplung von FEM-Software</p>	<p>Crash-Simulationen helfen immer sicherere Fahrzeuge zu entwickeln. Um die Aussagekraft von Crash-Berechnungen zu verbessern, gilt es, den Herstellungsprozess der im Fahrzeug verwendeten Bauteile (Umformung, lokale Wärmebehandlung, Fugen) mit der Crash-Simulation zu verknüpfen. Derartige Aufgaben löst die SCAI-Software <i>MetalMapper</i>.</p> <p>www.mpcci.de/mpcci-software/metalmapper</p>

	Algebraische Mehrgitterverfahren	<p><i>SAMG</i> ist ein Software-Paket zur hocheffizienten numerischen Lösung großer, dünnbesetzter Gleichungssysteme. Solche Probleme findet man in Anwendungsgebieten wie Strömungs- und Strukturmechanik, Ölreservoir- und Grundwassersimulation oder in der Prozess- und Device-Simulation. <i>SAMG</i> nutzt algebraische Mehrgittermethoden (AMG) und ist besonders zur Lösung umfangreicher Klassen diskretisierter elliptischer Differentialgleichungen geeignet.</p> <p>www.scai.fraunhofer.de/samg</p>
	Analyse und Optimierung parametrisierter Aufgaben	<p><i>DesParO</i> ist eine Software-Toolbox zur interaktiven Exploration und automatisierten Analyse und Optimierung parametrisierter Anwendungen. Sie kann dabei sowohl für Simulationsanwendungen als auch für physikalische Experimente genutzt werden.</p> <p>www.scai.fraunhofer.de/desparo</p>
	Multiphysikalischer Netzwerksimulator	<p><i>MYNTS</i> ist ein multiphysikalischer Netzwerksimulator, der zum Beispiel für elektrische Schaltungen, den Gas-, Wasser- oder Energietransport eingesetzt werden kann.</p> <p>www.scai.fraunhofer.de/mynts</p>
	Identifikation von Gen- und Protein-namen	<p>Die Software <i>ProMiner</i> identifiziert Namen von Genen und Proteinen, Krankheiten und Medikamenten in wissenschaftlichen Texten. Die Identifikation basiert auf automatisch erzeugten Wörterbüchern, die beispielsweise Mehrdeutigkeiten ausschließen.</p> <p>www.scai.fraunhofer.de/prominer</p>
	Knowledge-Discovery für die Life Sciences	<p><i>SCAIVIEW</i> ist eine Knowledge-Discovery-Software für die Life Sciences. Sie erlaubt das schnelle Auffinden aggregierter Informationen aus großen Textmengen. Dazu integriert <i>SCAIVIEW</i> die Information von <i>ProMiner</i> mit den zugehörigen Texten und erlaubt eine semantische Suche.</p> <p>www.scai.fraunhofer.de/scaiview</p>
	Automatische Erkennung chemischer Strukturformeln in Abbildungen	<p><i>chemoCR</i> erkennt chemische Strukturformeln und deren Abbildungen in wissenschaftlichen Texten. Die Software wandelt die Abbildungen in ein Format um, mit dem ein Computer die Informationen aus den Formelabbildungen verarbeiten kann.</p> <p>www.scai.fraunhofer.de/chemocr</p>
	Numerische Simulation in der Moleküldynamik	<p><i>Tremolo-X</i> ist ein Software-Paket zur numerischen Simulation in der Moleküldynamik. <i>Tremolo-X</i> wird erfolgreich in unterschiedlichen Anwendungsbereichen eingesetzt, zum Beispiel in der Nanotechnologie, den Materialwissenschaften, der Biochemie und der Biophysik.</p> <p>www.tremolo-x.com</p>



MULTIPHYSICS

Im Geschäftsfeld *Multiphysics* werden Methoden und Software zur Lösung multidisziplinärer Simulationsprobleme entwickelt, bei denen eine einzige physikalische Disziplin zur Modellierung nicht ausreicht und Effekte aus unterschiedlichen physikalischen Disziplinen berücksichtigt werden müssen.

Beispiele für Multiphysics-Anwendungen sind die thermische Spannungsanalyse in Fahrzeugen, Motoren oder Turbinen (Einfluss heißer Strömungen auf die Strukturbauteile), das dynamische Verhalten flexibler Bauteile unter Strömungsbelastung (Ventilklappen, Flugzeugflügel, Schläuche) oder auch die Prozessketten-Integration (Umform-Fügen-Crash) für Karosseriebauteile. In solchen Fällen werden mehrere Simulationsprogramme miteinander gekoppelt, um die Wechselwirkungen unterschiedlicher technischer und physikalischer Effekte möglichst realitätsgetreu abbilden zu können.

Mit der Software-Lösung *MpCCI* hat sich Fraunhofer SCAI als unabhängiger Anbieter einer herstellerneutralen Schnittstelle sowohl für die bidirektionale Simulationskopplung als auch für die unidirektionale Übertragung von Simulationsergebnissen in Prozessketten etabliert.

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

Das Geschäftsfeld ist an einer Reihe von öffentlich geförderten Forschungsprojekten zur Weiterentwicklung der methodischen Grundlagen beteiligt und realisiert im Rahmen von Auftragsprojekten kundenspezifische Sonderlösungen. Beispiele hierfür sind:

- Fluid-Struktur-Kopplung für Maschinenbau- und Aeroelastik-Anwendungen,
- thermische Lasten- und Vibrationsanalyse in Turbomaschinen,
- gekoppelte 1D-3D-Modelle für die Maschinen- und Fahrzeugdynamik,
- thermisches Management im Automobilbereich,
- virtuelle Auslegung von elektrischen Komponenten,
- Mapping-Lösungen für die thermische Spannungsanalyse in der Mikro-Elektronik,
- integrierte Prozessketten – von der Fertigung bis zur Produktsimulation,
- Strömungsmodellierung für biomedizinische und Mikrofluidik-Anwendungen.

Konkrete Anwendungsbeispiele aus dem Arbeitsbereich sind die strömungstechnische Auslegung von Systemen zur Aerosolmessung oder die virtuelle Berechnung der thermischen und der dynamischen Lasten auf einen Turbinenrotor aus Hochleistungskeramik.

*ABTEILUNG SIMULATIONS-
ANWENDUNGEN*

ABTEILUNGSLEITER

Dr. Johannes Linden

Telefon +49 2241 14-2910

johannes.linden@

scai.fraunhofer.de

LEITER DES

GESCHÄFTSFELDES

Dipl.-Informatiker

Klaus Wolf

Telefon +49 2241 14-2557

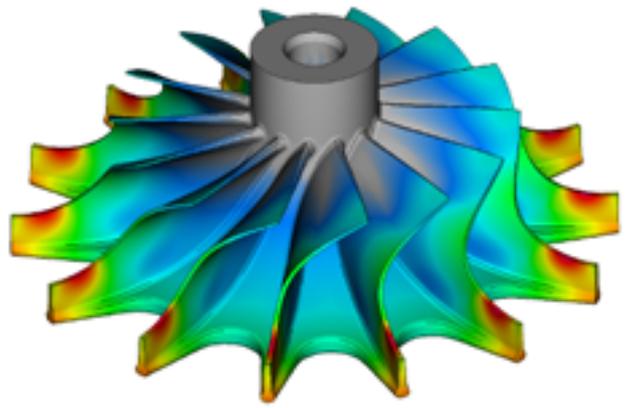
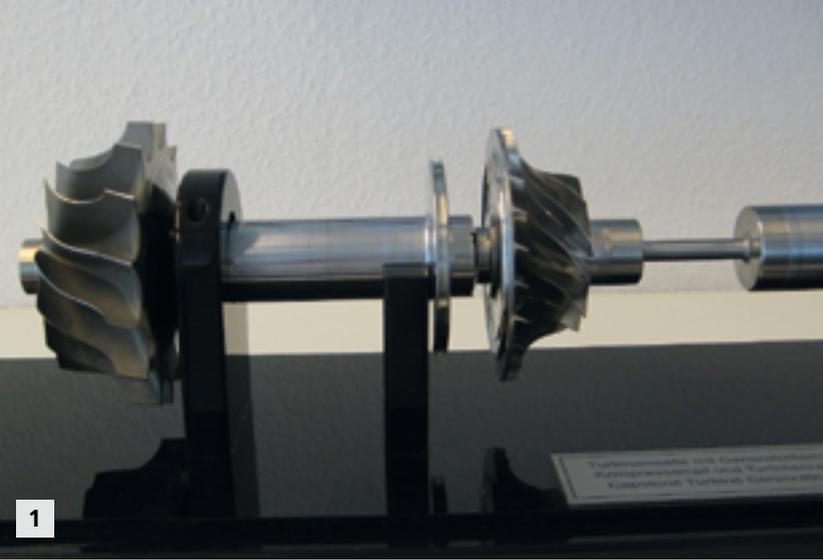
klaus.wolf@

scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/mp

LINKS

*Simulation der thermischen
Belastung eines
elektronischen Bauteils.*



HOCHLEISTUNGSKERAMIK IN KLEINEN GASTURBINEN

Dezentrale Kraft-Wärme-Kopplungsanlagen werden zukünftig für die effiziente Energiegewinnung an Bedeutung zunehmen. Gasturbinen, bei denen keramische Bauteile für den Rotor eingesetzt werden, bieten das Potenzial, den Wirkungsgrad deutlich zu steigern.

Im Projekt TurboKeramik liegt die Herausforderung in der Entwicklung eines Hochleistungskeramikrotors, der den Belastungen im Betrieb standhält. Darüber hinaus muss der Spritzgussprozess so optimiert werden, dass defektfreie Bauteile verlässlich erzeugt werden, die in die reale Turbine eingebaut werden können. Das Projekt wird im Rahmen der Fraunhofer-Vorlauforschung gefördert, von den Fraunhofer-Instituten IPK, IKTS, IFF, IWS und SCAI durchgeführt und von den Unternehmen Siemens, MAN Diesel & Turbo, E-quad und Euro-K begleitet.

Fraunhofer SCAI nutzt strömungs- und strukturmechanische sowie gekoppelte Simulationen, um die Betriebsfestigkeit des Rotors im Betrieb zu gewährleisten. Die spezielle Problematik besteht darin, dass die maximal zulässige Spannung in Keramiken deutlich unter denen herkömmlicher Turbinenmaterialien liegt. Die heißen Abgase der Verbrennung liefern einen signifikanten Wärmeeintrag in die Rotor-Verdichter-Baugruppe. Dadurch können thermische Spannungen entstehen; stark unterschiedliche Wärmeausdehnungskoeffizienten haben zur Folge, dass Kraftschlüsse nicht mehr bestehen. Die Fliehkräfte induzieren weitere Spannungen.

Mit Hilfe der Kopplungssoftware *MpCCI* wird die thermische Belastung im Betrieb simuliert. Der Wärmeeintrag des strömenden Fluids in die Baugruppe kann in Wechselwirkung mit der sich einstellenden Wandtemperatur berechnet werden. *MpCCI* koppelt dazu die kommerziellen Simulationstools FINE/Turbo (NUMECA) und ABAQUS (3DS Simulia). Mit der berechneten thermischen Belastung lassen sich die Einbaubedingungen bestimmen und der Betrieb simulieren. Auf dieser Basis wird das Rotordesign so optimiert, dass die maximal auftretenden Spannungen minimiert und somit das Risiko eines Bauteilversagens verringert wird.

Neben dieser statischen Belastung wird auch das Schwingverhalten der Keramikblätter im Betrieb untersucht. Der schwingungsinduzierende Druck wird dabei von der auskonvergierten Turbinensimulation auf eine Frequenzganganalyse abgebildet. Die Besonderheit dabei ist, dass die Strömung und die Schwingung nicht im Zeitbereich, sondern im Frequenzbereich – und damit deutlich schneller – berechnet werden.

1 Rotor-Verdichter-Baugruppe.

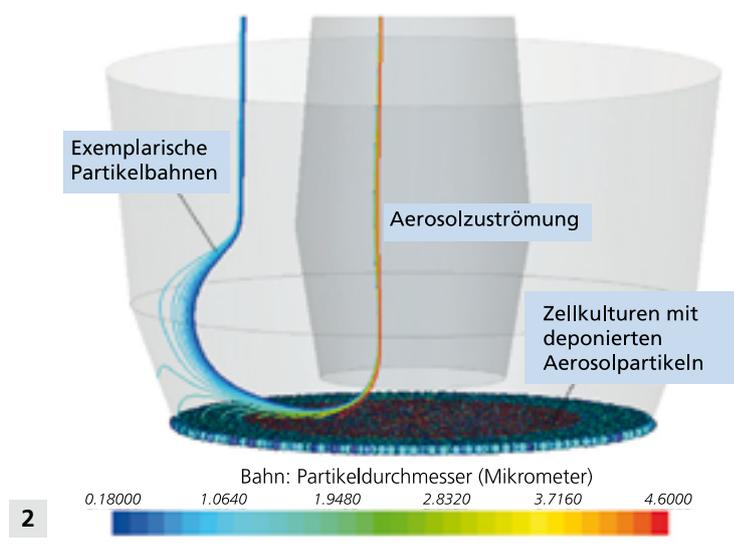
2 Simulation der thermischen Belastung eines keramischen Turbinenrotors.

ANSPRECHPARTNERIN

Dipl.-Math. techn. Nadja Wirth
Telefon +49 2241 14-2995
nadja.wirth@scai.fraunhofer.de



1



2

STRÖMUNGSSIMULATION OPTIMIERT LABORGERÄTE

Durch den Einsatz von Strömungssimulationen können Laborgeräte wesentlich besser geplant werden. Fraunhofer SCAI hat detaillierte Simulationsmodelle zur virtuellen Auslegung der Strömungsvorgänge in solchen Geräten entwickelt. Im von SCAI und dem Fraunhofer ITEM durchgeführten Projekt »Boundless Cultures« entstand ein neuartiges Baukastensystem zur Untersuchung von potentiell inhalationstoxischen luftgetragenen Substanzen.

Um das inhalationstoxikologische Potential einer Prüfsubstanz durch In-vitro-Testungen mit Barrierekulturen (beispielsweise Lungenzellen) zu erfassen, sind viele komplexe Einzelschritte nötig. Das System P.R.I.T.-ExpoCube bietet den Vorteil einer einfachen und standardisierten Vorgehensweise in einem Gerät und ersetzt aufwändige Laboraufbauten für In-vitro-Testungen. Dabei können übliche Systeme für die Züchtung der Zellkulturen verwendet werden.

- 1 *P.R.I.T.-ExpoCube.*
- 2 *Partikelbahnen und -deposition auf Zellmembran.*

Um dies zu ermöglichen, muss die Funktion des gesamten Systems verifiziert und hinsichtlich der physikalischen und biologischen Anforderungen ausgelegt werden. Im Projekt wurde zur Analyse und Optimierung die numerische Strömungssimulation sowohl für die Zuströmung der potentiell toxischen Substanzen, etwa Aerosole, zum biologischen Testsystem als auch für die Flüssigkeitsversorgung der lebenden Zellen mit Nährstoffen eingesetzt.

Die Projektziele waren

- die Effekte von Designänderungen auf die Funktion des Gerätes zu analysieren,
- technische Anpassungen zu entwickeln, die für Partikelgrößen zwischen 10nm und 3000nm zur Steigerung der Aerosoldeposition auf die Zellmembranoberflächen führen, sowie
- die Liquidversorgung mit Nährstoffen des biologischen Testsystems zu verbessern.

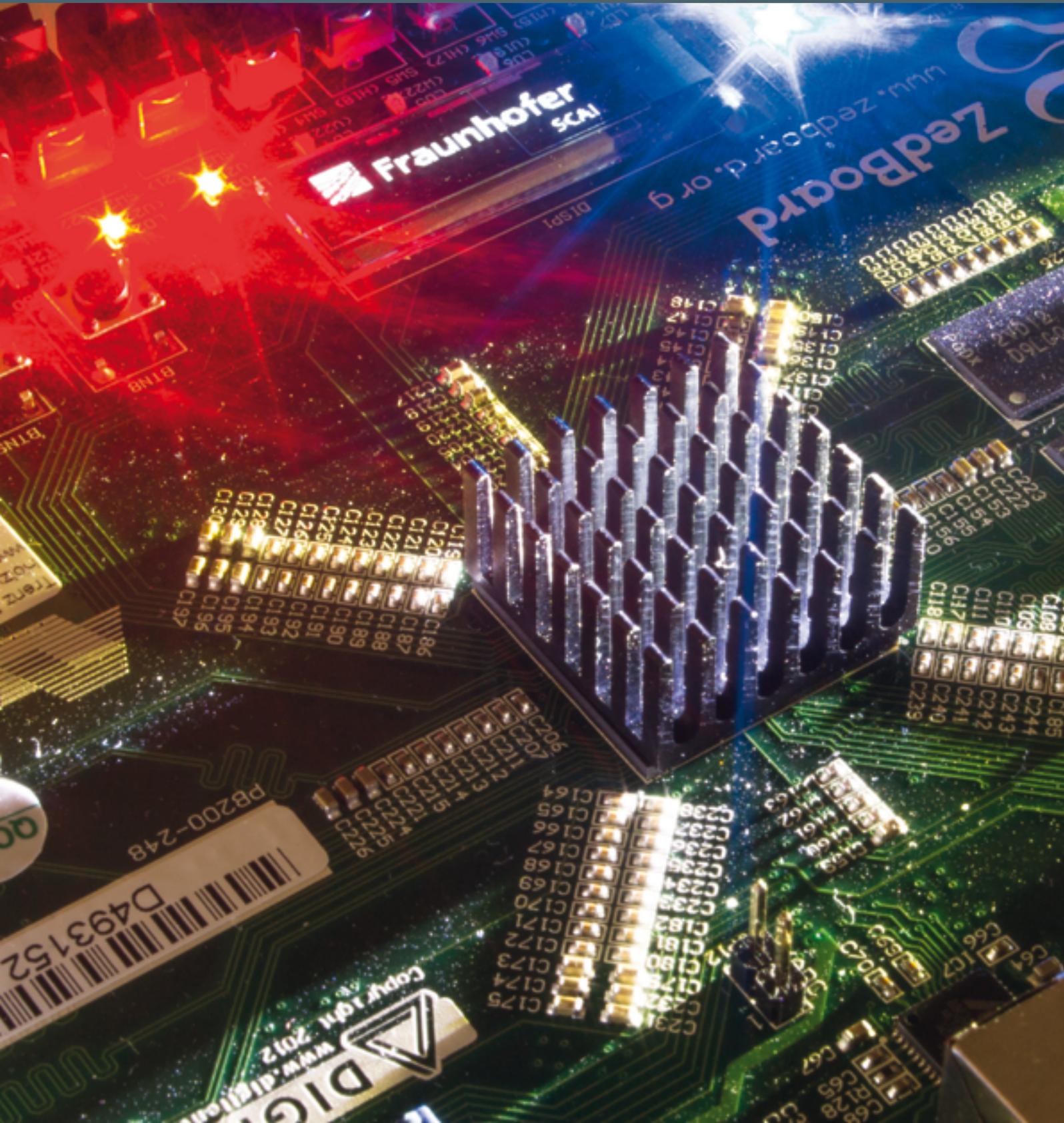
Für diesen Zweck wurden kommerzielle Simulationsprogramme eingesetzt und um eigene Methoden ergänzt. Aufgrund der Größe der Partikel (bis unter einem Mikrometer) mussten in den Simulationen nicht-kontinuumsmechanische Effekte berücksichtigt werden.

Als Ergebnis der Untersuchungen konnte die Aerosoldeposition auf die Zellen für einen großen Bereich an Partikelgrößen auch im Experiment drastisch erhöht werden. Zudem wurde das Liquidssystem zur Zellversorgung analysiert und die Funktionsfähigkeit nach Strömungsanalysen, einschließlich Luftblasensimulation, optimiert. Die neuen Entwicklungen sind zum Patent angemeldet.

ANSPRECHPARTNER

Dr. Carsten Brodbeck
 Telefon +49 2241 14-2645
 carsten.brodbeck@
 scai.fraunhofer.de

www.prit-systems.de



HIGH PERFORMANCE COMPUTING

Im Geschäftsfeld *High Performance Computing* (HPC) entwickelt Fraunhofer SCAI Algorithmen für naturwissenschaftliche und technische Anwendungen, parallelisiert Software und optimiert sie für unterschiedliche Zielsysteme. Die Kunden profitieren von verkürzten Rechenzeiten auf klassischen Rechnersystemen wie Multicore-PCs, Hochleistungs-Workstations mit Hardware-Beschleunigern, Supercomputern sowie auch auf eingebetteten Systemen.

Bei der Parallelisierung von Software geht es meistens darum, die kürzeste Programmlaufzeit mit dem optimalen Einsatz von Ressourcen zu erreichen. Das Leistungsversprechen der Hardware soll bestmöglich in der konkreten Anwendung ausgenutzt werden.

Bei Software-Entwicklungen für die Kleinstrechner, die in Fahrzeugen und Maschinen zum Einsatz kommen, spielen weitere Aspekte wie Echtzeitanforderungen und Minimierung der Energieaufnahme eine Rolle. Hier ist es oft viel wichtiger, ein Ergebnis nach einer vorgegebenen Zeit sicher zur Verfügung stellen zu können und dafür nur die Hardware-Komponenten des Systems zu nutzen, die insgesamt eine minimale Energieaufnahme gewährleisten.

Im Mittelpunkt der Forschungsarbeiten des Geschäftsfeldes stehen Methoden und Werkzeuge, die dem Kunden eine möglichst einfache und robuste Programmierung und zugleich eine möglichst effiziente Nutzung seiner konkreten Hardware ermöglichen. Die Formulierung des parallelen Anwenderprogramms soll zudem weitgehend unabhängig und transparent vom aktuellen Zielsystem erfolgen. Damit wird für die Anwender Investitionssicherheit in einem sehr heterogenen und sich schnell verändernden Hardware-Markt gewährleistet. Das gilt generell übergreifend, vom eingebetteten System bis hin zum Großrechner.

Fraunhofer SCAI richtet sich mit Beratungs- und Entwicklungsprojekten sowohl an direkte Anwender, die proprietäre Codes auf parallele Systeme portieren wollen, als auch an unabhängige Software-Anbieter. Das Angebot umfasst die Beratung bei einzelnen numerischen oder algorithmischen Fragen bis hin zum kompletten Neuentwurf einer Software.

Ein weiterer Schwerpunkt der Arbeiten ist die Entwicklung der HPC-Bibliothek LAMA (Library for Accelerated Math Applications), die zentrale Funktionalitäten aus der numerischen linearen Algebra hochperformant und systemunabhängig zur Verfügung stellt. Vervollständigt wird das Forschungsspektrum durch Arbeiten zur automatischen Parallelisierung und Optimierung von Quellcode für eingebettete sowie für hochparallele Systeme.

*ABTEILUNG SIMULATIONS-
ANWENDUNGEN*

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

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

www.scai.fraunhofer.de/hpc

LINKS

*HPC fängt im Kleinen an:
Optimierungen bringen
schon bei eingebetteten
Systemen erhebliche
Vorteile.*



1

QUELLCODE AUTOMATISCH PARALLELISIEREN

Heterogene Rechnerarchitekturen etablieren sich zunehmend in vielen Bereichen von Industrie und Wissenschaft, da sie verschiedene Anforderungsprofile von Anwendungen bedienen können. Die (Aus-)Nutzung solcher Architekturen stellt allerdings hohe Anforderungen an Anwendungsentwickler und Systemanbieter.

Im Projekt ENHANCE (enabling heterogeneous hardware acceleration using novel programming and scheduling models) haben sich Industrie und Forschung zusammengeschlossen, um eine bessere Integration und vereinfachte Nutzung heterogener Recheneinheiten in aktuellen und zukünftigen Computersystemen zu ermöglichen. Ziel war es, hochgradig heterogene Systeme, die Multicore-Prozessoren, Grafikprozessoren oder auch rekonfigurierbare Prozessoren (FPGAs) enthalten, durch angemessene Zuweisung passender Aufgaben optimal auszunutzen. Das ENHANCE-Framework portiert rechenintensive Teile eines Codes automatisch auf heterogene Hardwaresysteme und verteilt, organisiert und optimiert deren Ausführung. Da unterschiedliche Programme oder Programmteile häufig ganz verschiedene Anforderungen an die Hardware stellen, variiert die erzielte Performance auf den verschiedenen Architekturen oft stark. Im Projekt wurden daher Analyse- sowie Scheduler-Werkzeuge entwickelt mit dem Ziel,

- durch eine Code-Analyse und Mikro-Benchmarks die Eignung eines Programmabschnittes für jede verfügbare Hardware abzuschätzen und
- diese Abschätzung durch Laufzeitinformationen stetig zu verfeinern.

Die Aufgabe von SCAI im ENHANCE-Konsortium war die Entwicklung eines Source-to-Source-Compilers für die automatische Parallelisierung und Optimierung von existierendem Quellcode.

Das Forschungsprojekt FaST (Find a Suitable Topology for Exascale Applications) beschäftigt sich mit der zeitlichen und räumlichen Platzierung von Prozessen in Hochleistungsrechnern der Zukunft. Es wird angenommen, dass die CPU-Leistung deutlich schneller als andere Ressourcen wie etwa die I/O-Leistung wachsen wird. Um zu verhindern, dass es im System zu Engpässen kommt, soll ein neues Scheduling-Konzept entwickelt werden. Eine der Aufgaben dabei ist es, zukünftige Exascale-Systeme und deren Verhalten zu simulieren. Dazu werden Anwendungen mit der bei SCAI entstandenen HPC-Bibliothek LAMA entwickelt, die auf Exascale-Architekturen skalieren. Dabei sollen die rechenintensiven Module dieser Anwendungen mit den im Projekt erarbeiteten Scheduling-Strategien und Werkzeugen einfach und effizient zwischen verschiedenen Ressourcen verteilt und verschoben werden können.

Dies soll dazu beitragen, verlässliche Aussagen zu den Systemen zu treffen und damit fundierte Strategien für ihre optimale Ausnutzung zu entwickeln. Mit solchen Strategien soll ferner ein automatisiertes Framework entwickelt werden, das eine optimale Verteilung der Aufgaben vornimmt.

Beide Projekte, ENHANCE und FaST, werden vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) gefördert.



SCHNELLE BELICHTUNG VON LEITERPLATTEN

Mit neu entwickelten Algorithmen und Methoden aus dem *High Performance Computing* konnte ein Hersteller von Leiterplatten den Produktionsprozess enorm beschleunigen.

Moderne Leiterplatten bestehen meistens aus acht bis zehn Schichten. Nur so ist es möglich, die komplexen Bauteile mit vielen Pins dicht und auf kleinstem Raum zu elektronischen Komponenten zusammenzufassen. Während der Herstellung werden die verschiedenen Schichten aufeinander laminiert. Mechanischer Druck auf die Leiterplattenschichten führt dazu, dass diese sich nichtlinear verziehen. Wenn man nun die hoch aufgelösten Leiterplattenschichten ohne weitere Maßnahmen zusammenfügen würde, würden die Kontakte und unter Umständen auch die Anschlusspunkte für Bauteile mit vielen Pins nicht mehr passen. Um diesen Verzug zu vermeiden, kommen Vorlagen zum Einsatz, die von einer bedruckten, durchsichtigen Kunststoffolie – vergleichbar mit einem Dia – auf die Platine projiziert werden.

Die KLEO Halbleitertechnik GmbH in Tettngang hatte eine Maschine entwickelt, die den Fotolack auf einer Leiterplatte direkt mit Hilfe von Laserdioden belichtet. Damit ist es möglich, von einer Leiterplatte zur nächsten im laufenden Betrieb das zu belichtende »Bild« auszutauschen. Dafür muss das Abbild der Leiterbahn, das in einem Vektorformat vorliegt, skaliert, in eine Bitmap verwandelt und schließlich auf den Fotolack projiziert werden. Bei Platinen in der Größe eines DIN-A2-Blattes und Auflösungen bis zu 1µm fallen dabei erhebliche Datenmengen an, die in den wenigen Sekunden der Laserbelichtungseinheit zur Verfügung gestellt werden müssen.

SCAI unterstützte die Firma KLEO dabei, einen Algorithmus zu entwickeln, um aus den Vektordaten in der gegebenen Zeit Bitmap-Daten für die Lasereinheiten zu erstellen. In der Maschine beschleunigen Grafikkarten die Rechnungen. Der Algorithmus berechnet aus den Vektordaten eine für die Ansteuerungselektronik der Lasereinheiten verständliche Bitmap-Repräsentation. Verzüge beim Laminieren werden berücksichtigt und kompensiert. Der Algorithmus wurde soweit verbessert, dass die Zeitvorgabe der Kunden eingehalten wird, ohne weitere aufwändige Hardware einzusetzen. Die Maschine wird jetzt in der Produktion erfolgreich eingesetzt. Es ist möglich, in wenigen Sekunden von einem Leiterplattenrohling zum nächsten und von einem Layout auf ein anderes zu wechseln. Neben Zeitersparnis und verbessertem Durchsatz lassen sich damit auch Kleinserien von Leiterplatten in großen Prozessstraßen wirtschaftlich herstellen.

1 Webseite der bei Fraunhofer SCAI entwickelten HPC-Bibliothek LAMA (www.libama.org).

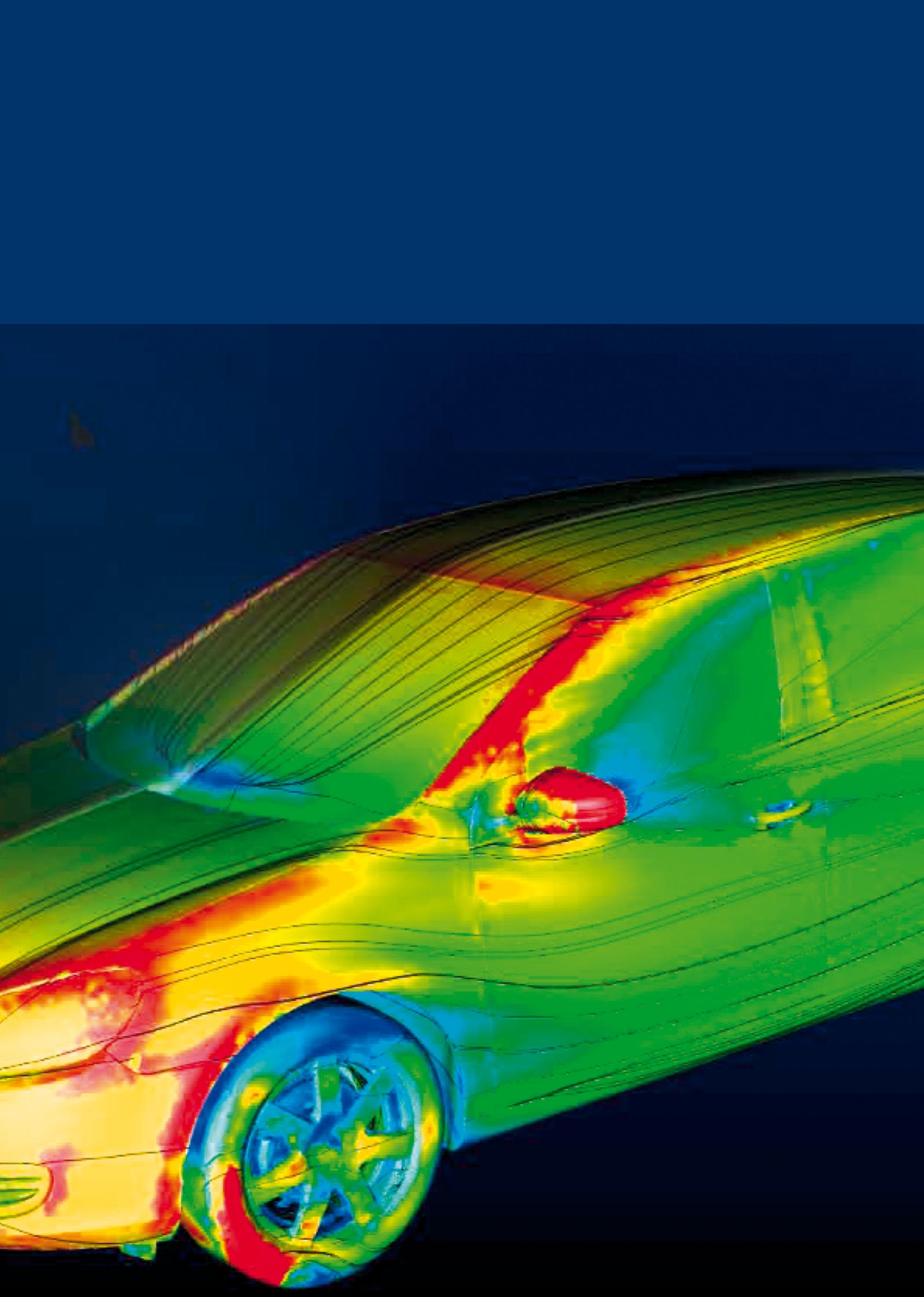
2 Laserdirektbelichter der Firma KLEO.

3 Lasereinheiten im Laserdirektbelichter.

ANSPRECHPARTNER

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

www.enhance-project.de
www.fast-project.de



SCHNELLE LINEARE LÖSER

Die Bedeutung numerischer Simulation für die Industrie ist immens. Sie steigt kontinuierlich, weil computerbasierte Simulationsansätze in einer zunehmenden Zahl von Industriezweigen zu unternehmenskritischen Komponenten bei der Analyse industrieller Prozesse werden.

Externe Zwänge zur Verbesserung der Qualität von Produkten, zur Optimierung technischer Prozesse sowie zur Reduktion entsprechender Kosten haben dazu geführt, dass sich virtuelles Prototyping zu einer Schlüsseltechnologie entwickelt hat. Computersimulationen ersetzen reale Experimente und werden so zu einem festen Bestandteil der Entwicklungsphase von Produkten oder der Analyse von komplexen Prozessen bei gleichzeitig geringeren Kosten. Die ständig wachsenden Anforderungen an die Simulationsgenauigkeit führen allerdings zu enormen Steigerungen der Rechenzeiten. In der Regel ist dabei die Lösung riesiger linearer Gleichungssysteme mit vielen Millionen bis Milliarden von Unbekannten der mit Abstand rechenzeitintensivste Teil einer praxisnahen numerischen Simulation. Klassische numerische Verfahren sind zur Lösung derartiger Gleichungssysteme viel zu ineffizient und bilden daher den Flaschenhals für die Praktikabilität komplexer Simulationsprozesse.

Bereits seit vielen Jahren erforscht Fraunhofer SCAI moderne numerische Methoden zur hocheffizienten Lösung linearer Gleichungssysteme, die in vielen industriellen Anwendungen die Simulation komplexer Prozesse erst praktikabel machen. Im Zentrum der Forschung stehen dabei auf dem algebraischen Mehrgitterprinzip (AMG) beruhende methodische Ansätze. Hierauf aufbauend hat SCAI die umfangreiche Software-Bibliothek *SAMG* entwickelt, die hocheffiziente Alternativen zu klassischen Lösungsverfahren beinhaltet.

SAMG wird als Lizenzprodukt für eine Nutzung in Industrie und Wissenschaft zur Verfügung gestellt. Die Zielgruppe besteht einerseits aus kommerziellen Software-Häusern, die ihre eigene Simulationssoftware mit *SAMG* als integrierter Komponente vertreiben wollen, und andererseits aus den Entwicklern industrieller inhouse Simulationssoftware, die *SAMG* zur Beschleunigung ihrer Simulationsläufe einsetzen wollen. Bis heute ist *SAMG* bereits in viele industrielle Software-Produkte eingebunden, unter anderem in den Anwendungsbereichen Strömungsmechanik, Ölreservoir- und Grundwassersimulation, Gießereisimulation, Prozess- und Device-Simulation der Halbleiterphysik, Strukturmechanik und Schaltkreissimulation.

Zum Leistungsumfang des Institutes SCAI gehören auch kundenspezifische Beratungs- und Anpassungsarbeiten in Zusammenhang mit der optimalen Nutzung der Software. Technologische Beratung und Unterstützung sowie projektbasierte Dienstleistungen bei der numerischen Beschleunigung industrieller Simulationscodes ganz allgemein runden das Angebot ab.

Der Name *SAMG* steht eigentlich für eine Suite von Bibliotheken: Während *SAMG* »im engeren Sinne« serielle und Multi-Core-Berechnungen bedient, unterstützt *SAMGp* verteiltes Rechnen auf Clustern von Multi-Core-Rechenknoten. Im Gegensatz dazu nutzt *XSAMG* die Parallelität eines Compute-Clusters durch die automatische Verteilung der Daten auf verschiedene Knoten, das übergeordnete Simulationsprogramm selbst braucht daher gar nicht für eine parallele Cluster-Infrastruktur entwickelt zu sein.

ABTEILUNGSLEITER

Dr. Klaus Stüben

Telefon +49 2241 14-2749

klaus.stueben@

scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/

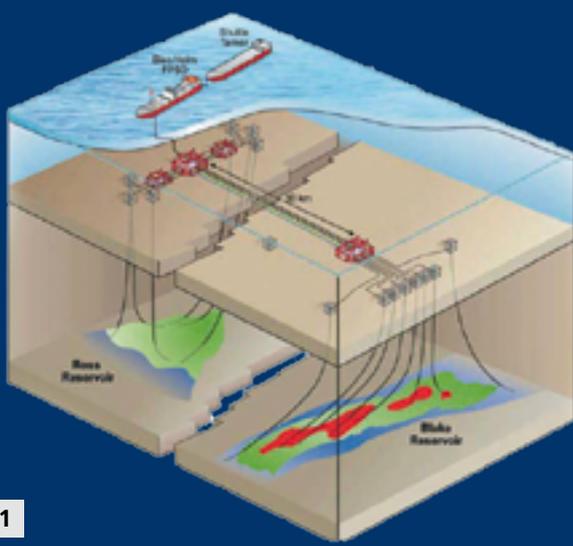
nuso

LINKS

Numerisch berechnete

Strömung um ein

komplettes Fahrzeug.



1



2

SAMG – EIN FRAMEWORK FÜR HOCHEFFIZIENTE LÖSER

Gegenüber klassischen Verfahren haben auf dem AMG-Prinzip basierende lineare Löser den großen Vorteil einer weitgehenden numerischen Skalierbarkeit, das heißt, die Rechenzeit zur Lösung eines Gleichungssystems hängt nur linear von der Zahl der Unbekannten ab. Je nach Anwendung und Problemgröße kann die daraus resultierende Reduktion der Rechenzeit bei einem Faktor 10 bis 100 oder sogar darüber liegen.

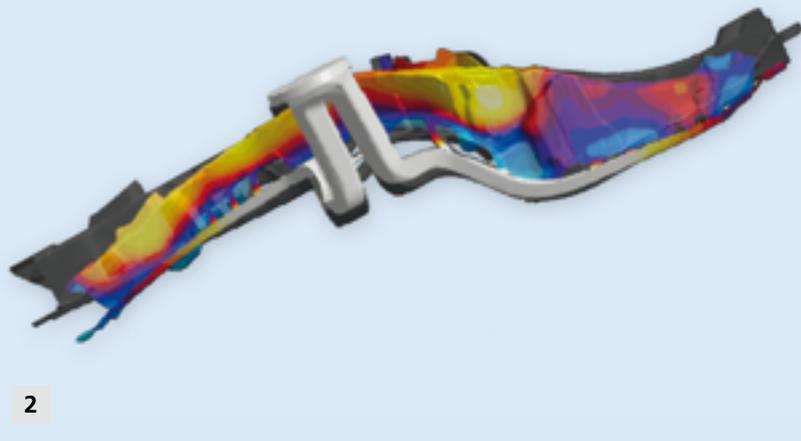
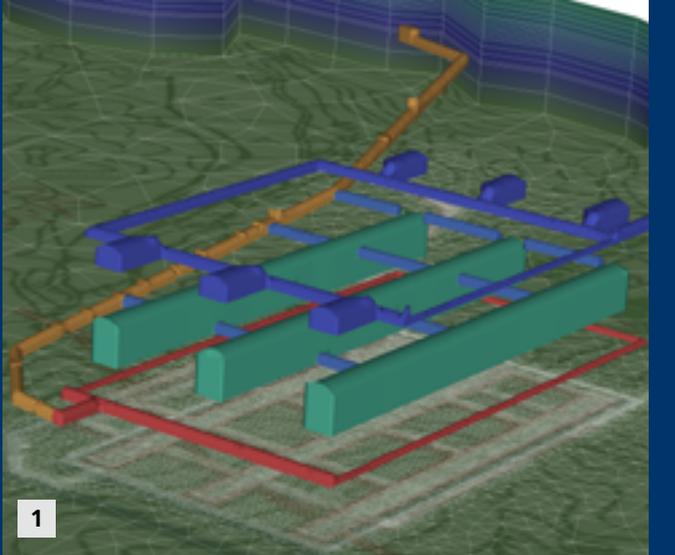
Der mathematische Grund für die hohe Effizienz eines AMG-basierten Lösungsverfahrens liegt in seiner hierarchischen Arbeitsweise: Durch die Kombination geeigneter numerischer Informationen aus den einzelnen Ebenen einer Hierarchie approximativer, zunehmend größerer Gleichungssysteme gelingt es für große Klassen von Anwendungen, numerische Skalierbarkeit sicherzustellen. Da die Bildung einer geeigneten Hierarchie (basierend auf dem sogenannten Galerkinprinzip) vollautomatisch als Teil des numerischen Algorithmus geschieht, sind AMG-basierte Verfahren – trotz ihrer hohen Komplexität – genauso einfach in eine Simulationssoftware integrierbar wie klassische Verfahren.

1 *Beispielhafte Darstellung unterschiedlicher Bohrlöcher und oberirdischer Anlagen in einem Offshore-Feld.*

2 *Ölplattform.*

AMG-basierte Verfahren sind aus verschiedenen algorithmischen Komponenten zusammengesetzt, deren Konstruktion und Abstimmung stark anwendungsabhängig sind. Dementsprechend ist die bei Fraunhofer-SCAI entwickelte Software-Bibliothek *SAMG* kein spezifischer, fester Löser, sondern vielmehr ein Framework, das die optimale Anpassung verschiedener algorithmischer Komponenten an die Anforderungen einer konkreten Anwendungsklasse beziehungsweise Simulationsumgebung erlaubt. Während dabei bereits viele Anwendungsbereiche effizient abgedeckt sind, erfordern andere Bereiche, darunter vor allem spezielle Systeme partieller Differentialgleichungen, noch anwendungsspezifische Forschung. Die *SAMG*-Bibliothek wird daher ständig weiterentwickelt mit dem Ziel, den Nutzen der AMG-Technologie zu Beschleunigung industrieller Simulationen weiter zu erhöhen.

Ein wichtiger Schwerpunkt der *SAMG*-Entwicklung liegt auf der effizienten Nutzung aller moderner Rechnerarchitekturen, von Hochleistungs-Clustern über Multicore-Maschinen bis hin zu Workstations, einschließlich der Berücksichtigung neuer Beschleunigungskarten (wie GPUs oder Intel Xeon Phi). Dementsprechend ist *SAMG* gleichermaßen geeignet für realitätsnahe Simulationen im Bereich des High-Performance Computing (etwa Strömungsmechanik in der Automobilindustrie oder Erdölexploration) wie auch für weitverbreitete Anwendungen speziell für kleine und mittlere Unternehmen (etwa Grundwassersimulationen in der Umweltindustrie).



PRAXISBEISPIELE

In verschiedenen Industriebereichen haben sich AMG-Verfahren – und hier insbesondere die SAMG-Bibliothek von SCAI – zu einem etablierten Werkzeug zur Beschleunigung komplexer Simulationsprozesse entwickelt, beispielsweise in der Ölindustrie, der Autoindustrie oder der Gießereiindustrie.

In der Ölindustrie dient die numerische Reservoirsimulation primär der Optimierung der Förderung von Öl und Gas bei gleichzeitiger Kostenreduktion. Mathematisch gesehen besteht das Problem in der genauen Simulation von Mehrphasenströmungen in porösen, stark heterogenen und frakturierten Materialien mit sehr komplexer Geometrie. Die numerischen Schwierigkeiten steigen ständig, bedingt durch eine wachsende Komplexität der Reservoirs, der Diskretisierungsmethoden und vor allem der physikalischen Modelle. Der Einsatz klassischer Verfahren zur Lösung der zugrunde liegenden Gleichungssysteme ist nicht mehr praktikabel.

Design-Prozesse in der Automobilindustrie werden in immer stärkerem Maße durch numerische Simulation unterstützt. So tragen Strömungssimulationen dazu bei, die Entwicklungszeit für ein neues Automodell zu reduzieren sowie die Qualität zu steigern. Ein weiteres numerisches Anwendungsfeld ist Wärmeentwicklung und -strahlung. Um höchstmögliche Genauigkeit einer Simulation zu erreichen sind heutige Modelle so groß, dass höchste Anforderungen an die Computerleistung und die Effizienz der linearen Lösungsverfahren gestellt werden. So kommen heute in großen Automobilfirmen moderne Parallelrechner mit tausenden Prozessoren zum Einsatz. Die SAMG-Bibliothek ermöglicht hier hocheffiziente Simulationen durch eine optimale Kombination der Skalierbarkeitseigenschaften von Software und Hardware.

In der Umweltindustrie ist Grundwassersimulation eine wichtige Komponente (zum Beispiel für verschiedenste hydrologische Untersuchungen, für das Wassermanagement sowie die Analyse und Vorhersage von Grundwasserverschmutzungen). Auch bei der heute gängigen Simulation von Grundwasserflüssen stoßen klassische Lösungsverfahren oft an ihre Grenzen. Für große Anwendungen wird SAMG vermehrt eingesetzt.

In der Gießereiindustrie wird Simulation zur Optimierung des Herstellungsprozesses von Gussteilen eingesetzt. Simulationen geben einen tieferen Einblick in und ein besseres Verständnis für die grundlegenden Prozesse wie etwa Formfüllung, Erstarrung, mechanische Eigenschaften sowie thermischen Spannungen und Verbiegungen. Hier erlaubt der Einsatz von SAMG, größere und genauere Simulationen durchzuführen als dies mit klassischen Lösern möglich wäre.

1 Modellierung der unterirdischen Lagerung von Flüssiggas in einer Höhle.

2 Verformung der Struktur eines druckgeegossenen Aluminiumbauteils nach der Herstellung im Ausformwerkzeug. Die Farben zeigen die Abweichungen von der gewünschten geometrischen Form an.

ANSPRECHPARTNER

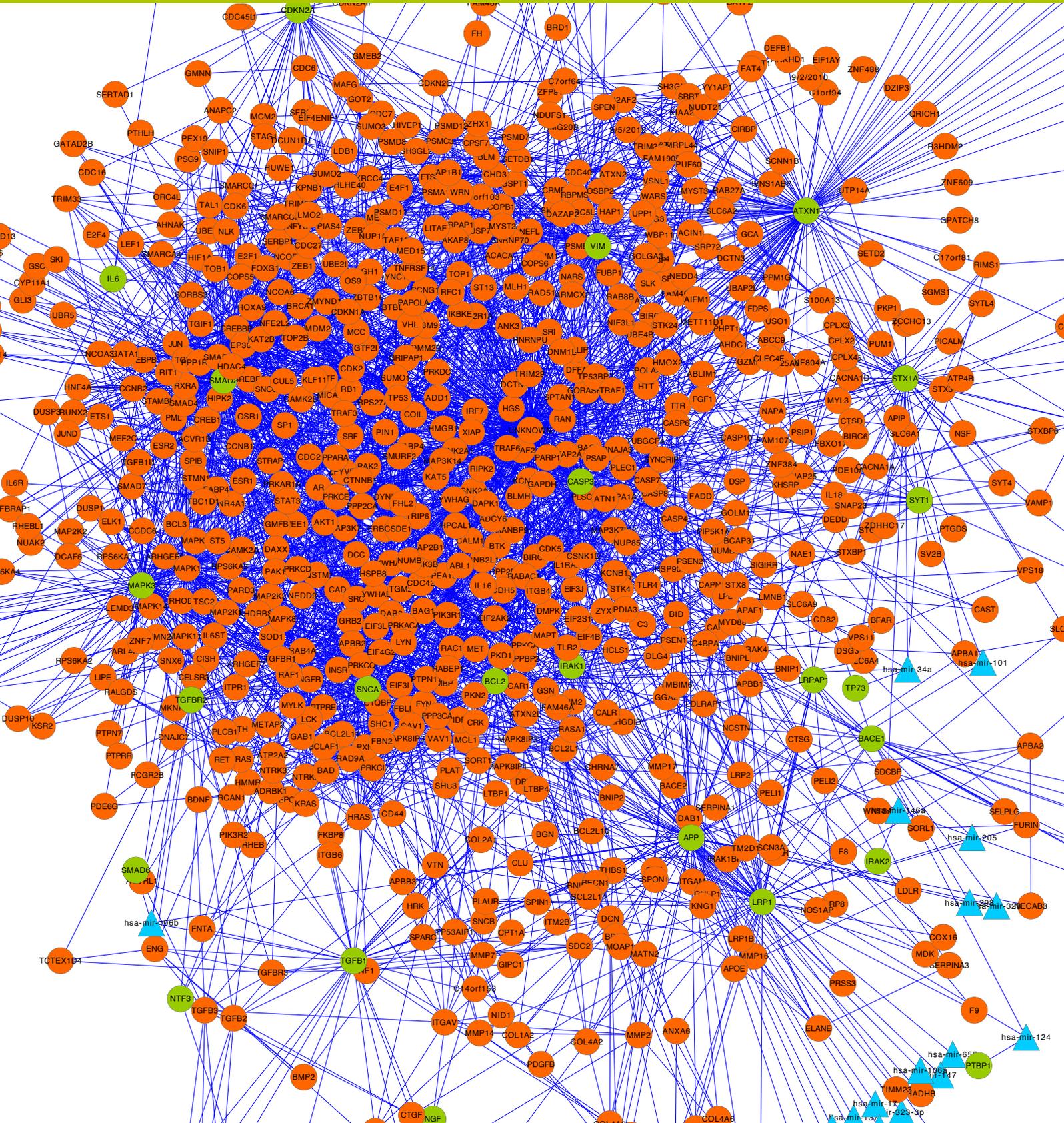
Dr. Klaus Stüben

Telefon +49 2241 14-2749

klaus.stueben@

scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/samg



BIOINFORMATIK

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

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

ABTEILUNGSLEITER

Prof. Dr. Martin

Hofmann-Apitius

Telefon +49 2241 14-2802

martin.hofmann-apitius@

scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/bio

Das Geschäftsfeld umfasst drei Problemlösungsfelder der angewandten, biomedizinischen Informatik:

- **Modellierung neurodegenerativer Erkrankungen:** Die Modellierung neurodegenerativer Erkrankungen adressiert ein emergentes Gebiet der Forschung im Bereich der Demenzerkrankungen. In diesem Bereich ist die Forschung bisher nicht modellgetrieben, sondern befindet sich weitgehend noch in der »Daten-Sammelphase«. Es mangelt nicht an Ideen, wie Alzheimer zustande kommen könnte, aber es mangelt durchaus an einem umfassenden Modell von Alzheimer, welches für die Identifizierung neuer Targets genutzt werden könnte.
- **Informations- und Wissensextraktion in den Life Sciences:** Biomedizinisches Wissen ist zum überwiegenden Teil nicht in Datenbanken, sondern nur in unstrukturiertem Text (Veröffentlichungen in Zeitschriften, Websites, Monographien) verfügbar. Aktuelle, relevante Information lässt sich aufgrund der Informationsflut von circa 3500 neuer biomedizinischer Publikationen pro Arbeitstag nur noch mit Hilfe von Computern extrahieren. Dabei kommt unser Produkt *ProMiner* zum Einsatz. Das Angebot im Geschäftsfeld reicht hier von der Lizenz für das Software-Produkt *ProMiner* bis hin zu Projekten, in denen *ProMiner* auf spezifische Fragen hin adaptiert wird.
- **Skalierende Life-Science-Informatik-Dienste:** Unstrukturierte Informationsquellen wie Journal-Publikationen, elektronische Patientenakten, aber auch Patente, liegen in sehr großer Zahl vor. Die automatisierte Analyse dieser unstrukturierten Wissensquellen erfordert substanzielle Compute-Ressourcen; skalierende Systeme für die Informationsextraktion müssen jedoch für HPC-Umgebungen optimiert werden und beispielsweise mit den existierenden Middlewares für die Verteilung rechenintensiver Aufgaben harmonisieren. Fraunhofer SCAI macht komplexe Text-Mining-Workflows auf HPC-Umgebungen lauffähig und demonstriert den wissenschaftlichen Einsatz von Hochleistungsrechnern für die Informationsextraktion. Die angebotenen Leistungen konzentrieren sich hierbei auf die kostengünstige Indexierung von Firmenarchiven mit dem Schwerpunkt Chemie sowie auf die Erschließung klinischer Routinedaten für Zwecke der Forschung und für Studien in der Gesundheitsökonomie.

LINKS

*Interaktion zwischen
microRNA und Genen der
Alzheimer-Erkrankung.*



1

MOLEKULARE URSACHEN VON ALZHEIMER VERSTEHEN

Das Projekt AETIONOMY ist eines der »Flaggschiff-Projekte« der Innovative Medicine Initiative (IMI), einer öffentlich-privaten Partnerschaft der Europäischen Union und der Föderation der Pharmazeutischen Industrie-Verbände in Europa (EFPIA).

Die IMI wurde gegründet, um die Kooperation zwischen akademischer und industrieller Forschung in der Wirkstoffentwicklung zu erleichtern. Die Organisation fördert »prä-kompetitive, kooperative Forschungsprojekte«. Es geht dabei um Krankheiten, die zwar eine große gesellschaftliche Relevanz haben, deren Erforschung für einzelne Pharmaunternehmen jedoch unter dem Aspekt der Wirtschaftlichkeit zu risikoreich ist. Ein typisches Beispiel für eine Krankheit mit hoher gesellschaftlicher Relevanz und einem eklatanten Mangel an Wirkstoffen zu ihrer Behandlung ist die Alzheimer-Demenz. Es gibt bis heute – 100 Jahre, nachdem Alois Alzheimer diese Erkrankung erstmals beschrieb – keinen Wirkstoff gegen die Alzheimer-Demenz.

Mit dem IMI-Projekt AETIONOMY hat Fraunhofer SCAI ein Projekt konzipiert, das einen Big-Data-Ansatz auf die Demenzforschung anwendet. Die große Herausforderung der Forschung an neurodegenerativen Erkrankungen besteht darin, dass die initialen Vorgänge, die zu einer Demenzerkrankung führen, möglicherweise 20 bis 30 Jahre vor der Diagnose »Alzheimer« beginnen. Man möchte die molekularen Ursachen der Alzheimer-Demenz verstehen, ohne zum Zeitpunkt der kausalen Dysregulationsvorgänge, die schließlich zur Erkrankung führen, zurückgehen zu können. Dieses Problem kann nur mit modellbasierten Ansätzen bearbeitet werden; reine datengetriebene oder rein wissensgetriebene Ansätze helfen hier kaum weiter.

AETIONOMY zielt darauf ab, in den nächsten fünf Jahren eine »Mechanismus-basierte Taxonomie« für die beiden neurologischen Erkrankungen Alzheimer und Parkinson zu generieren. Die Strategie basiert auf der Daten- und Wissens-Aggregation, der Identifizierung neuen Wissens durch Technologien des »Knowledge Discovery« und der Modellierung komplexer biomedizinischer Vorgänge mit dem Ziel, neue Krankheitsmechanismen zu identifizieren.

Fraunhofer SCAI hat für AETIONOMY ein international hochrangiges Konsortium mit komplementärer Expertise zusammengestellt. Gemeinsam mit den Industriepartnern von UCB Pharma, Novartis, Sanofi und Boehringer Ingelheim arbeitet SCAI daran, möglichst frühe Krankheitsmechanismen aufzufindig zu machen und in einer klinischen Studie zu validieren.

1 Die Zahl der Menschen, die an einer Alzheimer-Demenz erkranken, steigt stetig an. Big-Data-Methoden beschleunigen die Suche nach Wirkstoffen zur Behandlung.

ANSPRECHPARTNER

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

www.aetionomy.eu



BIG-DATA-ANALYSEN IN DER MEDIZIN

Fraunhofer SCAI stellt im Projekt cloud4health eine sichere »Trusted-Cloud«-Infrastruktur für eHealth-Anwendungen im Gesundheitswesen bereit. Für die Sekundärnutzung medizinischer Rohdaten entwickelt SCAI spezialisierte und leicht adaptierbare Textanalyse-Technologien.

Leistungserbringer im Gesundheitswesen stehen vor der Herausforderung, die Behandlungsqualität zu verbessern, die Patientensicherheit zu erhöhen und gleichzeitig die Kosten zu reduzieren. Die Sekundärnutzung klinischer Routinedaten hat das Potenzial, die Wertschöpfungskette im Gesundheitswesen zu revolutionieren. Dabei liegen die benötigten Daten meist in unstrukturierter Form wie in Arztbriefen vor. Natural Language Processing (NLP) erlaubt die semantische Erschließung derartiger Textinformationen. In cloud4health werden anonymisierte medizinische Routinedaten der Patientenversorgung auf Basis großer Populationen unter Nutzung flexibler Cloud-Infrastrukturen übergreifend ausgewertet. So können die Behandlungsqualität überprüft und verbessert sowie die Patientensicherheit erhöht werden. Gleichzeitig entsteht ein Spielraum für Kostensenkungen.

Fraunhofer SCAI stellt einen modularen Baukasten von Werkzeugen zur Textanalyse und zum NLP zur Verfügung. Zur Erkennung biomedizinischer Namen können etwa Diagnosen und Medikamentennamen in die SCAI-Software *ProMiner* eingepflegt werden. Andere Module erlauben die Erkennung und Interpretation von Klassifikationscodes von Tumoren. Durch Anwendung regelbasierter Systeme oder Methoden des maschinellen Lernens lassen sich Relationen in Arztbriefen, Operations- oder Pathologieberichten erkennen. In cloud4health wurden verschiedene Anwendungen implementiert, jeweils in mindestens zwei unterschiedlichen Klinikumgebungen eingesetzt und evaluiert. Dabei ist es möglich, die Anwendung in einzelnen Krankenhäusern zu starten oder zentral für verschiedene Krankenhäuser anzubieten.

Der Schutz medizinischer Daten hat in cloud4health höchste Priorität. Daher entwickelte SCAI ein umfangreiches und detailliertes Sicherheitskonzept. Hierzu gehören zum Beispiel verschlüsselte Verbindungen zu den Cloud-Ressourcen, Begrenzung und Kontrolle des Nutzerkreises, Separierung des Cloud-internen Datenverkehrs, keine Speicherung von Daten in der Cloud.

Das Projekt cloud4health startete im Dezember 2011 und wird vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie gefördert.

1 Die Datenanalyse hilft Patienten beispielsweise dabei, das für sie am besten geeignete künstliche Hüftgelenk auszuwählen.

ANSPRECHPARTNERIN

Dr. Juliane Fluck
Telefon +49 2241 14-2188
juliane.fluck@
scai.fraunhofer.de

www.cloud4health.de



SUCHE NACH DER RICHTIGEN STRATEGIE ZUR SYNTHESE

Gemeinsam mit dem Industriepartner Taros Chemicals hat Fraunhofer SCAI im Projekt UIMA-HPC die Herausforderung gemeistert, unter Millionen von Patenten das Dokument herauszufiltern, welches das genaue Syntheseprotokoll zu einer gesuchten Substanz beschreibt.

Für ein Auftragsprojekt sollte ein geeigneter Fotoentwickler hergestellt werden. Die Suche in strukturierten chemischen Spezialdatenbanken ergab keinerlei brauchbaren Treffer, dagegen führte eine schnelle stichwortbasierte Suche in Google Patents zu 452 interessanten Dokumenten. Diese Patente, die in unterschiedlichen Sprachen verfasst sind, lassen sich als PDF-Dateien bei den Patentämtern bestellen, müssen dann aber anschließend vom Chemiker mühsam in Kleinarbeit durchsucht und aufgearbeitet werden. Fragestellungen sind hierbei:

- Welche Stoffe werden darin beschrieben?
- Welche Eigenschaften haben diese Stoffe?
- Wie lassen sich diese Stoffe herstellen?

Das klingt nach einer reinen Fleißarbeit, ist aber in der Praxis sehr schwierig und zeitaufwändig, da Patente wenig strukturiert und Sachverhalte sehr komplex aus Sicht des Patentanwalts und nicht des Chemikers beschrieben sind.

Mit Hilfe der im UIMA-HPC Projekt entwickelten Technologien konnten die Dokumente automatisch OCRed, das heißt mittels Optical Character Recognition digitalisiert und analysiert, und dann in die einzelnen Bausteine wie Patentansprüche, Stand der Technik, chemische Strukturzeichnungen, Syntheseprotokolle, Querverweise und Referenzen zerlegt werden. Mit Hilfe des extra entwickelten Analyse-Werkzeugs »Interfacer« war der chemische Experte in der Lage, in einem Vormittag die gewünschte Synthese in einem Patent von 1984 zu identifizieren und einen genauen Laborauftrag zu spezifizieren. Der Interfacer erlaubt es, die aufbereiteten Patente zu durchsuchen, zu klassifizieren oder quer zu verknüpfen (welches Dokument zitiert welche anderen Dokumente). Chemische Abbildungen lassen sich übersichtlich in einer Tabelle darstellen und durchsuchen, und man kann direkt an die richtige Stelle im Dokument springen.

Das vom Bundesministerium für Bildung und Forschung geförderte Projekt UIMA-HPC ist im Sommer 2014 erfolgreich abgeschlossen worden; Taros und SCAI verfolgen nun eine gemeinsame Verwertung.

1 *In der chemischen Industrie stehen vor der eigentlichen Arbeit im Labor meistens aufwändige Patentrecherchen in zahlreichen Spezialdatenbanken.*

ANSPRECHPARTNER

Dr. Marc Zimmermann

Telefon +49 2241 14-2276

marc.zimmermann@

scai.fraunhofer.de

www.uima-hpc.de/

ueber-uima-hpc.html



GROSSE RECHENLEISTUNG FÜR KLEINE UNTERNEHMEN

Mit »Fortissimo« fördert die Europäische Kommission ein Projekt, das kleinen und mittelständischen Unternehmen (KMU) hilft, ihre Produkte besser und schneller auf den Markt zu bringen. Die Schlüsseltechnologie dafür ist Simulation auf schnellen Rechnern, die bisher aus Kostengründen und wegen fehlender Expertise von den KMU kaum genutzt wird.

In Fortissimo arbeiten KMU, Herstellern von Simulationssoftware, Experten für Hochleistungsrechnen (High Performance Computing, HPC) und Anbieter von High-Performance-Ressourcen in geförderten Experimenten zusammen, um die Produktentwicklung durch die Nutzung von Computersimulationen wettbewerbsfähiger zu machen. Das Ziel dieser Experimente ist es, den KMU durch einen Provider (den sogenannten Independent Software Vendor, ISV) alle erforderlichen Ressourcen für die Simulation aus einer Hand zur Verfügung zu stellen: Simulationsanwendung, Optimierungswerkzeuge, Software-Lizenzen, HPC-Expertise und die erforderliche Rechenleistung aus einer Cloud, zum Beispiel auf einem für die Anwendung geeigneten Hochleistungsrechner. Das besondere an diesem Angebot ist, dass das KMU nur für die tatsächlich genutzten Ressourcen bezahlt, es entstehen keine Kosten durch langfristige Verträge.

Die Hersteller von Simulationssoftware setzen dafür *elasticLM* ein, eine von Fraunhofer SCAI entwickelte flexible Technologie für Software-Lizenzierung in Clouds. Mit *elasticLM* ist es möglich, die Software durch ein sogenanntes Pay-Per-Use-Modell bereitzustellen: Der Nutzer bezahlt nur für die Zeit, während der die Software tatsächlich genutzt wird. Zusammen mit dem entsprechenden Geschäftsmodell des Cloud-Anbieters werden Computersimulationen für das KMU kostengünstig nutzbar. Das führt zum Beispiel in einem der in Fortissimo geförderten Experimente zu einer Reduktion der Zeit für die Berechnung der Verkabelung eines Flugzeugs von zwei Wochen auf einige Stunden.

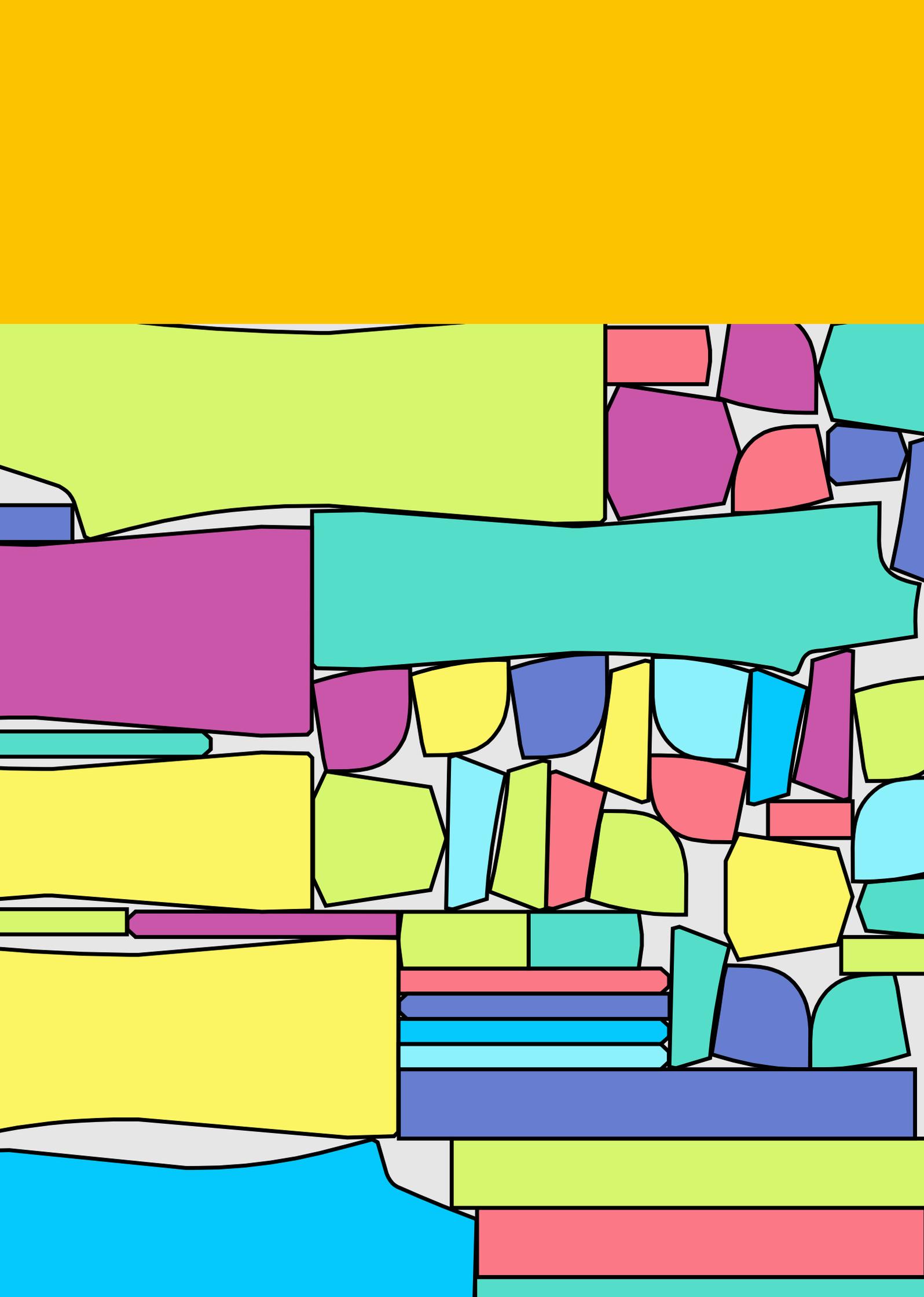
Nach dem Ende des Projekts Fortissimo werden die Partner einen Online-Marktplatz einrichten, in dem die Angebote der Software-Hersteller, Cloud-Anbieter und HPC-Experten dauerhaft verfügbar sein werden. Das KMU kann sich aus den Komponenten im Marktplatz selbst eine funktionsfähige Infrastruktur zusammenstellen, oder es kann einen anderen, zum Beispiel den ISV beauftragen, eine für seine Anforderungen geeignete Lösung zu entwickeln.

1 *Im Flugzeugbau beruhen die Pläne zur Verlegung von Elektroleitungen auf Computersimulationen.*

2 *Mittels Cloud-Computing konnte die Berechnung der Verkabelung eines Flugzeugs enorm beschleunigt werden.*

ANSPRECHPARTNER

*Dipl.-Informatiker
Wolfgang Ziegler
Telefon +49 2241 14-2258
wolfgang.ziegler@
scai.fraunhofer.de*



OPTIMIERUNG

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

Ein Schwerpunkt der Forschungs- und Entwicklungsarbeiten von Fraunhofer SCAI liegt im Gebiet der Material- und Ressourceneffizienz. Hier steht die Entwicklung von Algorithmen für die Lösung von Anordnungs- und Packungsproblemen in ein, zwei und drei Dimensionen im Mittelpunkt. Ziel ist dabei die optimale Nutzung von Ressourcen, das heißt, man möchte entstehenden Verschnitt, freibleibende Flächen oder ungenutzte Räume möglichst minimieren. Maßgeschneiderte Lösungen stellen die höchstmögliche Kosten- und Zeitersparnis für den Kunden in seinem speziellen Produktions- und Arbeitsumfeld sicher. Beispiele hierfür sind die Erstellung von Schnittbildern etwa für Textilien, Bleche, Lederhäute oder Holzplatten, die volumenoptimale Anordnung von Bauteilen in Behältern, Bau- oder Laderäumen, oder die Flächen-, Grundstücks- und Raumplanung.

Das Angebotsspektrum reicht von leistungsfähigen Software-Produkten über industrierelevante Entwicklungsprojekte bis hin zu umfassenden Beratungsdienstleistungen für Fragen in Produktion, Logistik und Planung. Ziel bei allen Entwicklungen ist es, die realisierten Lösungen auf die Anforderungen einer möglichst breiten Kunden- und Anwenderbasis abzustimmen und die Anwender durch ein weitgehendes Support-Angebot zu unterstützen.

Kunden und Partnern bietet Fraunhofer SCAI die gesamte Palette von Leistungen in der Entstehung einer Lösung für praxisrelevante Optimierungsprobleme, beginnend bei Beratung über Problemanalyse, Erstellung und Validierung von Lösungskonzepten, Entwurf von Algorithmen, Realisierung, Implementierung bis hin zu Wartung, Weiterentwicklung und kundenindividuellen Anpassungen.

Typische Anwendungsfelder für die angebotenen Software-Produkte sind:

- **Packungsprobleme:** Bauteileanordnung, Containerbeladung
- **Zuschnittprobleme:** Textilien, Leder, Bleche, Holz, Glas, Composites, Schaumstoff
- **Logistik:** Transportoptimierung, Tourenplanung, Standortwahl
- **Produktion:** Maschinenbelegung, Arbeitspläne, Materialverbrauch
- **Planung:** Flächen- und Raumnutzung, Platzierung von Sicherungsanlagen
- **Kommunikationsnetze:** Auswahl geeigneter Standorte

ABTEILUNGSLEITER

Dr. Ralf Heckmann

Telefon +49 2241 14-2810

ralf.heckmann@

scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/opt

LINKS

Schnittbild für Hosen auf Stoff.



GUILLOTINE-SCHNITTPLÄNE EFFIZIENT OPTIMIEREN

Wie kann man rechteckige Teile möglichst effizient auf rechteckigen Platten platzieren, wenn die verwendete Säge nur vollständige, gerade Schnitte im rechten Winkel ausführen kann? Eine Antwort auf diese Frage liefert die neue SCAI-Software *AutoPanelSizer*.

In der Holz-, aber auch der Glas-, Metall- und Kunststoffindustrie ist die Minimierung von Verschnitt von großer Bedeutung. Für das Ausschneiden rechteckiger Teile aus rechteckigen Platten mit Sägen, die nur gerade Schnitte im rechten Winkel ausführen können, gibt es zwar seit einiger Zeit Software, dennoch wurde dieses Problem lange nicht zur Zufriedenheit der Industrie gelöst. Daher hat die Abteilung für *Optimierung* von Fraunhofer SCAI ein neues Software-Produkt zur Lösung dieses Problems entwickelt, das eine erheblich bessere Materialausnutzung möglich macht.

AutoPanelSizer erstellt in kurzer Zeit hocheffiziente Schnittpläne und trägt dadurch wesentlich zur Reduzierung von Materialverschnitt und somit zur Einsparung von Ressourcen sowie zur Kostensenkung bei. Durch eine genauere Abbildung der Möglichkeiten und Restriktionen der Fertigungsanlage sowie durch bessere Optimierungsalgorithmen konnte mit *AutoPanelSizer* bei ersten Kunden gegenüber der bisher verwendeten Optimierungssoftware die Ausbringung um fast zwei Prozentpunkte gesteigert werden. Dies bedeutet, dass sich der Materialverschnitt um etwa 14 Prozent reduziert.

Bei gewissen Materialien, insbesondere Holz, werden Rohmaterial-Platten oft nur durch sogenannte Guillotine-Schnitte bearbeitet. Das sind Schnitte, welche eine Platte – oder im späteren Verlauf das, was von der Platte übrig ist – stets mit einem rechtwinkligen Schnitt ganz durchsägen, also in zwei Rechtecke zerteilen.

In der industriellen Produktion werden in der Regel verkettete Sägen verwendet. Beispielsweise werden die Platten durch die erste Säge in Streifen geschnitten, danach werden diese Streifen durch die zweite Säge senkrecht zu der ersten Sägerichtung zerteilt, woraus die Teile entstehen. Durch einen solchen Aufbau ergeben sich weitere Restriktionen an den Schnittplan, da nur so viele sogenannte Ebenen möglich wie Sägen vorhanden sind. Dies berücksichtigt *AutoPanelSizer*.

- 1 *Ein von AutoPanelSizer erzeugter Schnittplan. Bei dem rot gerahmten Teil handelt es sich um den Kopfschnittplan, der linke Teil ist der Hauptplan.*
- 2 *Drehen einer Teilplatte für Kopfschnitt vor der Säge auf Ebene 1.*



AutoPanelSizer unterstützt eine Vielzahl verschiedener praktischer Anforderungen und wird laufend erweitert. Die Software ist in der Lage, auf verschiedenste Maschinen- und Materialeigenschaften wie beispielsweise minimale und maximale Schnittlängen und Sägevorschübe, Schnittbreiten, Trimms an den Plattenrändern oder eine Maserung des Materials einzugehen. Vorhandene Reste können in die Optimierung ebenso einbezogen werden wie Standard-Ausgangsmaterial in verschiedenen Größen. Neben der Berücksichtigung sogenannter Kopf- und Nachschnitte können verschiedene Maschinenanforderungen wie Mindest- und Höchstmaße oder die Seite eines Teils, die von einem eventuellen Nachschnitt verändert werden darf, von *AutoPanelSizer* berücksichtigt werden.

Die Erzeugung von Kopfschnitten sowie die Erzeugung und Verwendung von Materialresten können durch die Angabe von Optimierungsparametern beeinflusst werden. Beispielsweise kann ein prozentualer Wert angegeben werden, so dass Kopfschnittpläne erst dann erzeugt werden, wenn ihre Effizienz die eines Nicht-Kopfschnittplans um mindestens diesen Wert übersteigt. Hierdurch kann die Anzahl der Kopfschnitte und/oder Reste reduziert und damit den zusätzlichen Kosten, die durch solche Prozesse entstehen, Rechnung getragen werden.

In *AutoPanelSizer* können Teile als Muss- bzw. Kann-Teile deklariert werden. Erstere werden zwingend in den Schnittplänen platziert, letztere nur, wenn sie gut passen. Diese Möglichkeit kann beispielsweise genutzt werden, um Teile, die am Folgetag für die Weiterverarbeitung eingeplant sind, als Muss-Teile zu deklarieren und Teile, die erst an einem späteren Tag benötigt werden, als Kann-Teile. Durch diese vorausschauende Produktion kann die Effizienz der Pläne gesteigert und insgesamt der Materialverbrauch weiter reduziert werden.

AutoPanelSizer wird als reiner Rechenkern über eine XML-Schnittstelle in andere Anwendungen eingebunden, etwa Anlagesteuerungen oder Enterprise-Resource-Planning-Systeme. Die Firma myvision hat eine solche Einbindung in ihr Stand-Alone-Produkt Manufacto vorgenommen und bietet damit eine Komplettlösung für den Endanwender an, die Datenhaltung, Web-Oberfläche, Schnittstellen und die Optimierung durch *AutoPanelSizer* umfasst.

3 *Zuschnitt einer Platte mit optimiertem Schnittplan.*

ANSPRECHPARTNER

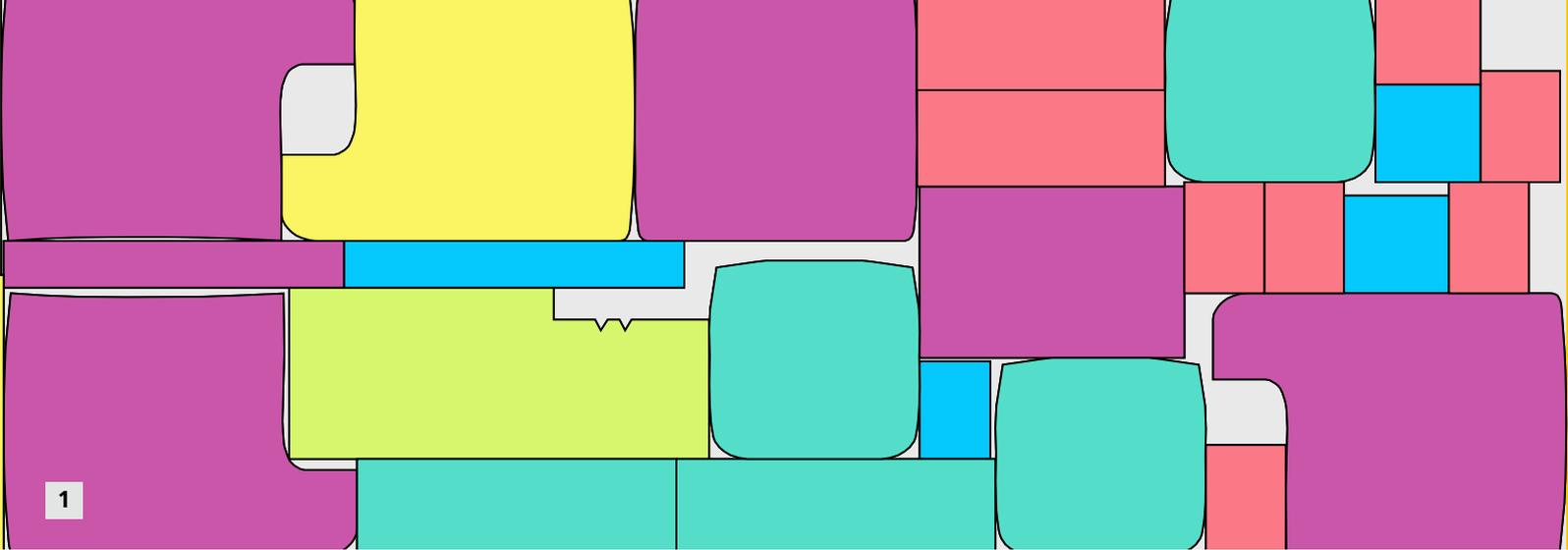
Dr. Onno Garms

Telefon +49 2241 14-2553

onno.garms@scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/

autopanelSizer



RESSOURCENEFFIZIENZ DURCH OPTIMIERUNG

Die zunehmende Verknappung von Rohstoffen, steigende Preise und eine wachsende Nachfrage erfordern aus ökonomischer und ökologischer Sicht einen besonders sparsamen und wirtschaftlichen Umgang mit Ressourcen. Durch eine verbesserte Nutzung von Materialien und Räumen lassen sich in vielen Anwendungsfällen deutliche Materialeinsparungen und Kostensenkungen erzielen.

Mit der *AutoNester*-Produktfamilie stellt Fraunhofer SCAI Software-Lösungen zur Verfügung, die bei zweidimensionalen Verschnitt- und Anordnungsproblemen (oft auch bezeichnet als Nesting-Probleme) in unterschiedlichen Branchen Anwendung finden. Die Haupteinsatzgebiete liegen bei der Verarbeitung von Textilien, Leder, Metallen, Holz, Kunststoffen oder Verbundwerkstoffen (Composites), etwa bei der Herstellung von Bekleidung, Möbeln, Automobilen, Maschinen, Flugzeugen oder Schiffen. *AutoNester* kann wesentlich zur Reduzierung des Materialverbrauchs beitragen, indem es eine Menge von benötigten Teilen auf optimierte Weise und in kurzer Zeit auf verfügbarem Grundmaterial oder auch auf Materialresten verschachtelt.

Die *AutoNester*-Software kann über eine einfache Programmierschnittstelle (API) als Packungswerkzeug in andere Software (z.B. in ein CAD-System) integriert werden. Für Anwender erstellt Fraunhofer SCAI – aufbauend auf der *AutoNester*-Bibliothek – individuelle, genau auf die jeweiligen Anforderungen zugeschnittene Lösungen. Die vorhandenen vielfältigen Funktionen und Optionen für die unterschiedlichen Anwendungsfelder werden fortlaufend für neue technische Anforderungen erweitert und ergänzt.

AutoNester sichert Unternehmen dauerhaft und unabhängig eine hocheffiziente Ausnutzung der eingesetzten Materialien und trägt damit zur Kostensenkung und zur Einsparung von Rohstoffen bei. Durch die automatisierte und sehr schnelle Berechnung von Schnittbildern kann der Nesting-Prozess jederzeit und gegebenenfalls auch mehrfach in der Wertschöpfungskette gestartet werden (zum Beispiel während der Design-, Kalkulations- und Produktionsphase).

Viele Firmen nutzen zudem auf den Kernalgorithmen von *AutoNester* aufbauende Speziallösungen, die für ihre individuellen Anforderungen angefertigt wurden. Da Fraunhofer SCAI über langjährige Erfahrung und tiefgreifendes Know-how auf diesem Gebiet verfügt und zudem die gesamte Entwicklung im Hause stattfindet, können für Kunden in der Regel schnell kosteneffiziente Lösungen nach Maß angeboten werden.

1 *Schnittbild für Polstermöbel auf Stoff.*

ANSPRECHPARTNER

Dr. Ralf Heckmann

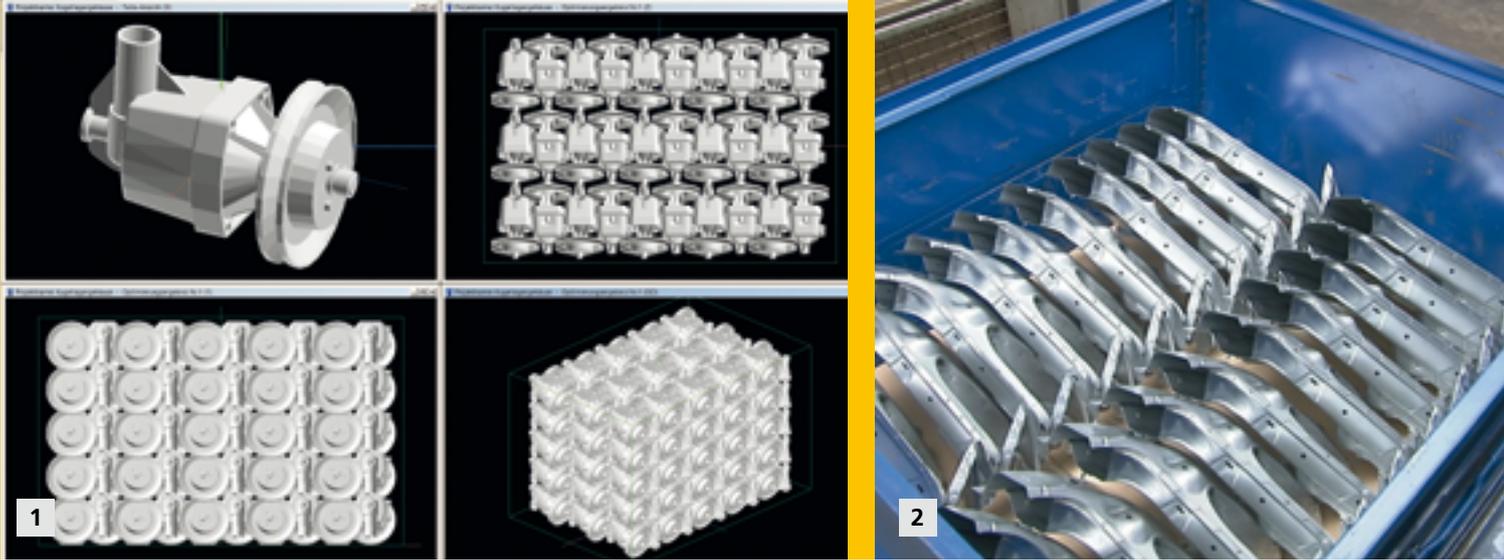
Telefon +49 2241 14-2810

ralf.heckmann@

scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de /

autonester



OPTIMIERTE 3D-VERPACKUNGSPLANUNG

Ideale Behälterauslastungen ohne zeitaufwändige Packversuche, bessere Planungsmöglichkeiten und eine vorausschauende Angebotserstellung – die Software *PackAssistant* erleichtert die Behälterplanung in der Industrie enorm. Weltweit setzen zahlreiche Hersteller und Zulieferer, darunter besonders viele aus der Automobilindustrie, auf *PackAssistant* und erzielen damit um bis zu 25 Prozent höhere Behälterauslastungen als bisher. Dies erhöht Lagerkapazitäten, reduziert Transportkosten und ist gleichzeitig gut für die Umwelt.

PackAssistant wird in der Logistik- und Produktionsplanung zur Berechnung optimierter Befüllungen von Behältern eingesetzt und ermöglicht eine schnelle, platz sparende und kostengünstige Behälterplanung. Das Gewicht der Teile und die Gewichtsbeschränkungen der Behälter werden immer berücksichtigt. *PackAssistant* kann mit beliebig komplexen dreidimensionalen Modellen rechnen – und nicht nur mit einer starken Vereinfachung davon – und damit den vorhandenen Platz optimal ausnutzen. Aufwändige manuelle Packversuche gehören somit der Vergangenheit an.

PackAssistant verfügt über eine Vielzahl von Optionen, die zum Beispiel die Stabilität der Packung, Mindestabstände zwischen den Teilen oder eine Packung in Gefache berücksichtigen. Eine weitere Option schätzt, wie viele Teile geschüttet in einen Behälter passen, wenn die Teile nicht geordnet in den Behälter gelegt werden, sondern direkt vom Band in den Behälter fallen.

PackAssistant kann für einen Behälter mehrere Packungsvorschläge liefern: einfache Anordnungen mit weniger Teilen oder komplexe Anordnungen mit mehr Teilen. Zudem ist es mit *PackAssistant* einfach möglich, mehrere unterschiedliche Behälter zu vergleichen und so auch optimale Behältergrößen für die zu verpackenden Teile zu ermitteln.

In der Regel dauert eine Berechnung auf einem Standard-PC nur wenige Minuten – selbst wenn das Modell sehr groß ist. Die Modelle können in den Formaten JT, STEP, STL und VRML eingelesen werden. Viele CAD-Programme können ihre Modelle in eines dieser Formate exportieren. Die Software stellt die Anordnungen dreidimensional dar. Daraus lassen sich einfach Verpackungsreports mit anschaulichen Grafiken erstellen. Für die Weiterverarbeitung in anderen CAD-Programmen gibt es einen Export nach VRML, STEP und JT.

1 Ausschnitt der Benutzeroberfläche von *PackAssistant*.

2 Ergebnis einer Packung mit *PackAssistant* in der industriellen Praxis.

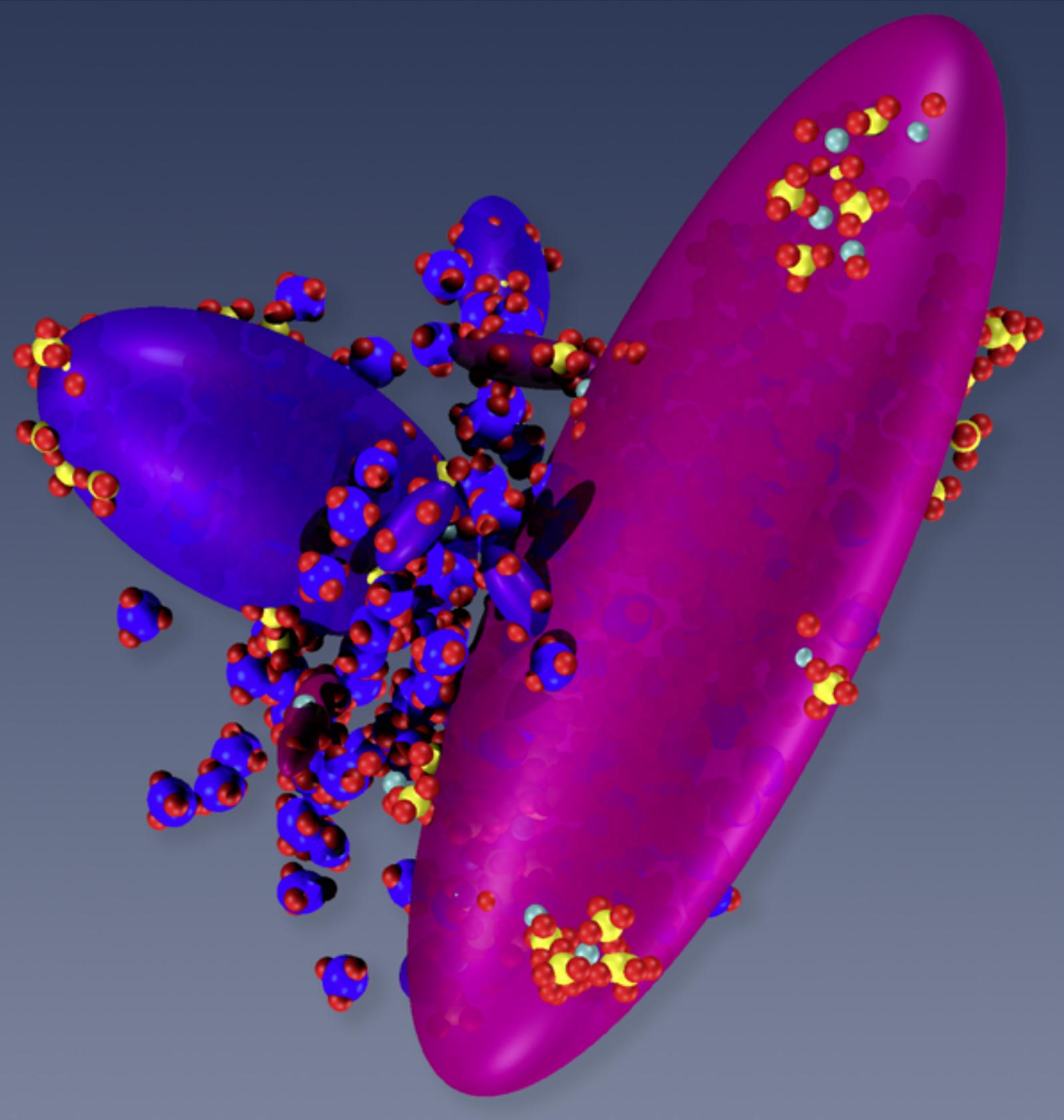
ANSPRECHPARTNER

Dipl.-Informatiker Stefan Rank

Telefon +49 2241 14-1503

stefan.rank@scai.fraunhofer.de

www.packassistant.de



VIRTUAL MATERIAL DESIGN

Die Entwicklung neuer Materialien und innovativer Werkstoffe ist für eine Vielzahl von Herausforderungen des 21. Jahrhunderts in den Feldern Energie, Umwelt, Gesundheit, Mobilität, Sicherheit und Kommunikation von entscheidender Bedeutung. Somit sind Materialwissenschaft und Nanotechnologie Schlüsseltechnologien für die Zukunft. Als interdisziplinäre Querschnittsthemen fließen hier grundlegende Naturwissenschaften sowie anwendungsorientierte Ingenieurwissenschaften zusammen.

Im Geschäftsfeld *Virtual Material Design* (VMD) werden die Eigenschaften neuer Materialien auf der Nano-, Mikro- und Makro-Skala mit modernen numerischen Multiskalen-Methoden aus Quantenmechanik, Moleküldynamik und Kontinuumsmechanik auf großen Parallelrechnern berechnet. Ziel ist es, innovative Werkstoffe mit interessanten Eigenschaften im Rechner zu kreieren und zu untersuchen, um so Struktur- sowie Designvorschläge zu machen, noch bevor solche Stoffe real im Labor synthetisiert werden. Dieser Zugang verspricht, Experimente im Labor durch virtuelle Experimente im Rechner zu ersetzen. Damit lassen sich mit Hilfe der numerischen Simulation die Entwicklungskosten substantiell reduzieren. Zudem können auch vollkommen neuartige Materialien gefunden oder Verfahren im Herstellungsprozess optimiert werden.

In diesem Rahmen ist angesichts des erforderlichen hohen Rechenaufwandes neben Multiskalen-Modellierung insbesondere die Entwicklung und Implementation von schneller paralleler Simulationssoftware für die Materialwissenschaft und Nanotechnologie ein zentrales Thema.

Die Forschungsgebiete von VMD liegen im Bereich von Multiskalen-Modellierung und numerischer Simulation in Materialwissenschaft und in Nanotechnologie. Dabei bildet das Hochleistungsrechnen in Quantenmechanik, Moleküldynamik und Kontinuumsmechanik einen besonderen Schwerpunkt. Die konkreten Themen des Geschäftsfelds reichen von der Entwicklung und Implementierung effizienter Software bis hin zur computergestützten Vorhersage und Optimierung von Materialeigenschaften.

Kernprodukt von VMD ist das hochparallele Software-Produkt *Tremolo-X* zur numerischen Simulation in der Molekulardynamik. Bei seiner Entwicklung wurde der parallelen Effizienz auf Hochleistungsrechnern besondere Beachtung geschenkt und zusätzlich eine benutzerfreundliche graphische Bedienoberfläche implementiert. *Tremolo-X* wird erfolgreich in vielen Projekten aus unterschiedlichen Anwendungsbereichen wie etwa Nanotechnologie, Materialwissenschaften, Biochemie und Biophysik eingesetzt.

ABTEILUNGSLEITER

Dr. Jan Hamaekers

Telefon +49 2241 14-2463

jan.hamaekers@

scai.fraunhofer.de

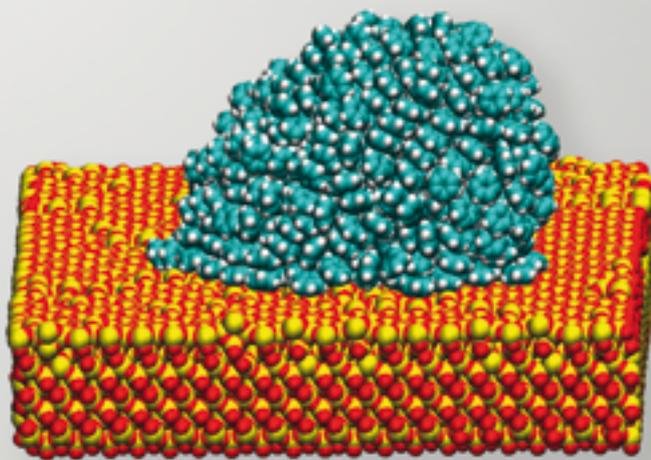
www.scai.fraunhofer.de /

vmd

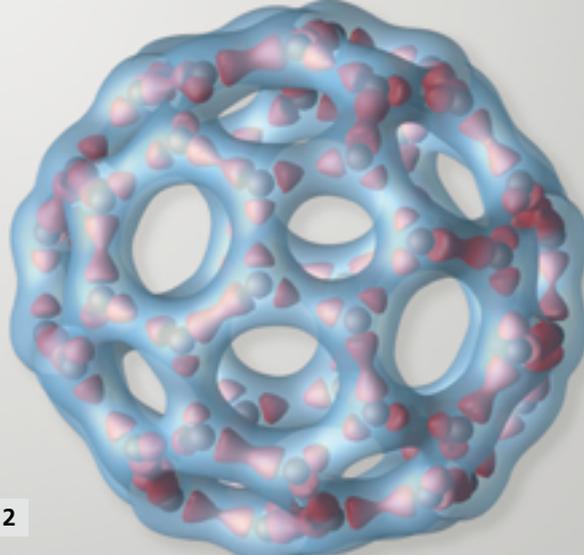
www.tremolo-x.de

LINKS

Grobskaliges Modell eines zementartigen C-S-H Gels.



1



2

COMPUTERCHEMIE UND MATERIALFORSCHUNG

Zur Optimierung der effektiven Eigenschaften eines Wirkstoffes oder Materials oder dessen Herstellungsprozesses ist das detaillierte Verständnis vieler physikalischer und chemischer Prozesse notwendig. Das Geschäftsfeld *Virtual Material Design* (VMD) bietet hierzu Simulationswerkzeuge und simulationsbasierte Projekt- und Auftragsforschung an.

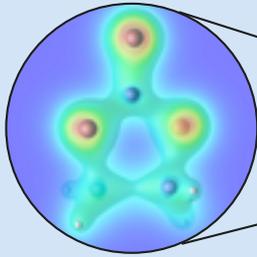
In vielen Fällen können bestimmte spezifische Eigenschaften oder Größen nicht oder nur mit sehr hohem Kosten- und Zeitaufwand experimentell untersucht und/oder bestimmt werden, aber eine atomistische oder grobskaligere Modellierung ist möglich. Daher haben sich Multiskalenmodellierungsansätze und numerische Simulationsmethoden zur Analyse physikalischer und chemischer Prozesse und zur Vorhersage der Eigenschaften von Materialien und Molekülen in den letzten Jahren zu einem effizienten und notwendigen Werkzeug in den Natur- und Ingenieurwissenschaften entwickelt. So wurde der Chemie-Nobelpreis 2013 für Forschungsarbeiten im Bereich der Entwicklung mehrskaliger Modelle für komplexe chemische Systeme in der Biophysik und -chemie vergeben. Sowohl in der rechnergestützten Chemie als auch in den Materialwissenschaften spielt die Entwicklung mesoskopischer und makroskopischer Modelle eine ständig wachsende Rolle. Dabei werden wichtige Eingabeparameter für diese Modelle oft mittels atomistischer Simulationsmethoden bestimmt.

Einerseits entwickelt VMD neue effiziente Multiskalenmethoden und Simulationswerkzeuge. Hier liegt ein Schwerpunkt insbesondere auf numerischen Methoden für hochdimensionale Probleme. Diese werden zum Beispiel für Parameterstudien, Modellparameterfitting und Quantifizierung der Modell- und Ergebnisunsicherheiten eingesetzt. Andererseits setzt VMD geeignete numerische Simulationsmethoden in Forschungs- und Entwicklungsprojekten in Chemie und Materialwissenschaften ein. Die Schwerpunkte des Portfolios liegen hier insbesondere in folgenden Bereichen: Bestimmung mechanischer und thermodynamischer Eigenschaften, Strukturanalyse, Nanokomposit-Materialien, ionische Liquide, zementartige Materialien, Halbleiter, Metalloxide und Legierungen.

Weitere Anwendungsfelder sind unter anderen die Optimierung von Material und Prozessparametern, die Vorhersage und Analyse möglicher Strukturen und Reaktionsprodukte sowie des Langzeitverhaltens eines Materials.

- 1 *Benzen-Nanotröpfchen auf Siliziumoxidoberfläche.*
- 2 *Fulleren-Molekül C_{60} mit Isofläche der Elektronendichte.*

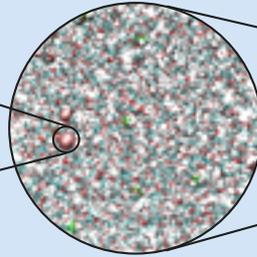
Quantenmechanik



Chemische Struktur
eines Elektrolyten

1 Å – 1 nm

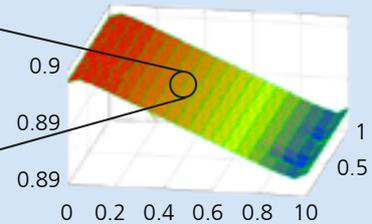
Molekularmechanik



Diffusion und chemisches
Potential in Elektrolyt

1 nm - 100 nm

Kontinuumsmechanik



Ionenmigration
in Elektrolyt

1 mm – 1 m

1

MULTISKALENMODELLE IN DER MATERIALFORSCHUNG

In einem Multiskalenansatz werden verschiedene mathematische Modelle für die verschiedenen Skalen typischerweise in einem horizontalen oder vertikalen Sinne gekoppelt. Das Ziel einer horizontalen Kopplung ist, die lokal benötigte Genauigkeit und die Kosten innerhalb einer Simulation zu balancieren, zum Beispiel mittels der sogenannten QM/MM Methode, in der quantenmechanische und molekularmechanische Ansätze kombiniert werden.

Im Rahmen sogenannter vertikaler Kopplungsansätze werden charakteristische Modellparameter eines grobskaligen Modells mittels eines feinskaligen Modells berechnet. Beide Kopplungsansätze sind Gegenstand der Forschung und Entwicklung des Geschäftsfelds VMD.

Bild 1 zeigt am Beispiel des Elektrolyten einer Lithium-Ionen-Batterie, wie Quantenmechanik, Molekularmechanik und Kontinuumsmechanik ineinandergreifen, um die Eigenschaften des Elektrolyten zu analysieren:

- Die chemische Struktur des Elektrolyten wird durch die Quantenmechanik beschrieben. Typisch ist hier eine Größenordnung von 1 Å bis 1 nm.
- Mit molekularmechanischen Methoden können das Diffusionsverhalten und das chemische Potential des Elektrolyten bestimmt werden. Charakteristisch für derartige Betrachtungen sind Größenordnungen von 1 nm bis 100 nm.
- Die Kontinuumsmechanik kann eingesetzt werden, um die Ionenmigration im Elektrolyten zu untersuchen. Typische Größenordnungen hierfür liegen im Bereich von 1 mm bis 1 m.

1 *Multiskalenmodellierung des Elektrolyten einer Lithium-Ionen-Batterie.*

ANSPRECHPARTNER

Dr. Jan Hamaekers

Telefon +49 2241 14-2463

jan.hamaekers@

scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/vmd

www.tremolo-x.de



HIGH PERFORMANCE ANALYTICS

Die Forschungsgebiete des Geschäftsfelds *High Performance Analytics* (HPA) sind die Netzwerkanalyse, -simulation und -optimierung und das Graph Mining, beispielsweise für Schaltungen, Gas-, Wasser-, Öl- und Energietransport. Hinzu kommt das robuste Design zur statistischen Analyse und Optimierung parameterabhängiger Aufgaben, und zwar vorwiegend aus den Bereichen Netzwerke, Produktionsprozesse und industrielle Produkte. Kooperationspartner und Kunden stammen insbesondere aus den Bereichen Öl und Gas, Mikroelektronik, Automobilbau und Engineering.

Der Begriff »High Performance Analytics« meint die hochperformante Gewinnung, Speicherung und Analyse großer Datenbestände mit dem Ziel, über die zugrunde liegenden Prozesse neue, nichttriviale Einsichten zu erlangen, die Prozesse zu steuern bzw. zu verbessern.

ABTEILUNGSLEITERIN

Dr. Tanja Clees

Telefon +49 2241 14-2983

tanja.clees@

scai.fraunhofer.de

Die Arbeiten des Geschäftsfeldes HPA konzentrieren sich auf zwei Anwendungsfelder:

1. Netzwerke: Netzwerkanalyse, -simulation und -optimierung und Graph Mining, zum Beispiel für Schaltungen, Gastransport, Kühlkreisläufe, Ölreservoirs und Energiemanagement

www.scai.fraunhofer.de/

hpa

2. Robust Design: statistische Analyse und Optimierung parameterabhängiger Aufgabenstellungen, und zwar vorwiegend aus den Bereichen Netzwerke, Produktionsprozesse und industrielle Produkte

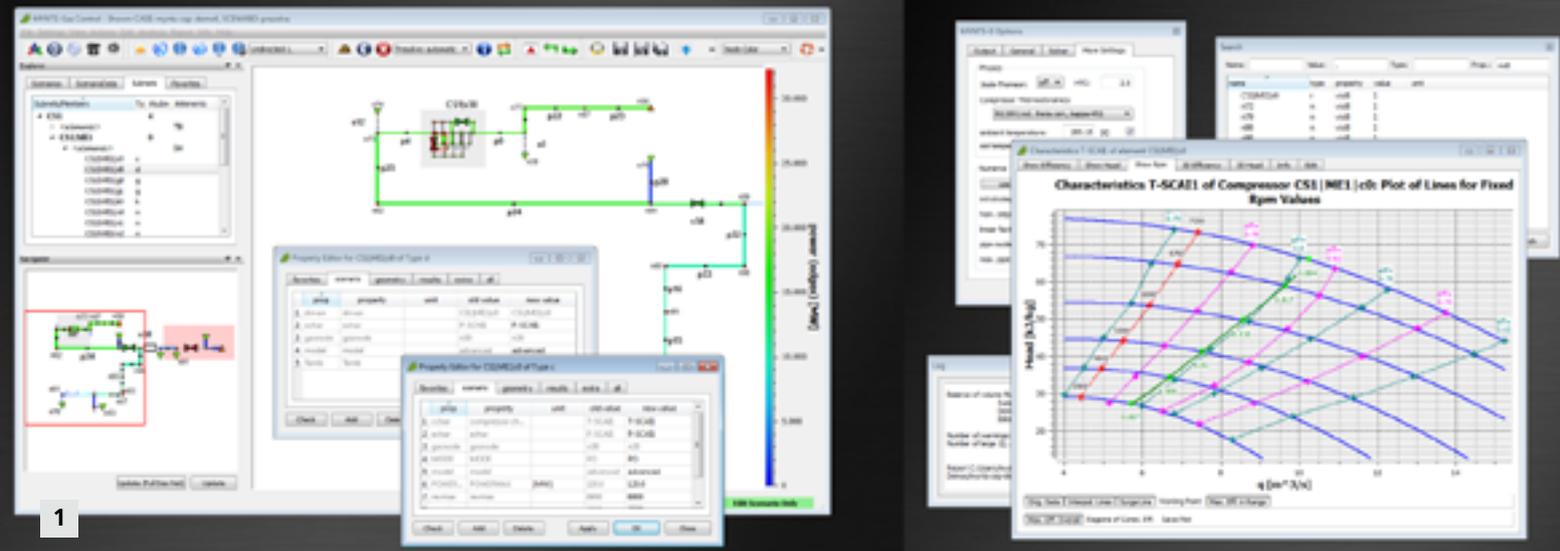
In beiden Anwendungsfeldern erforscht und entwickelt HPA eigene mathematische Methoden und setzt diese in Software-Produkte um:

- **MYNTS** (multiphysical network simulator) ist ein Software-Paket zur Simulation, Analyse und Optimierung multiphysikalischer Netzwerke, das zum Beispiel für elektrische Schaltungen sowie den Gas-, Wasser- oder Energietransport genutzt werden kann.
- **net`O`graph** dient der Analyse und Optimierung von Netzwerken sowie dem Graph Mining.
- **DesParO** (Design Parameter Optimization) ist eine Software-Toolbox zur interaktiven Exploration und automatisierten Analyse und Optimierung parametrisierter Anwendungen. Sie kann dabei sowohl für Simulationsanwendungen als auch für physikalische Experimente genutzt werden.

Das Leistungsangebot umfasst dabei jeweils Studien, Lizenzen der genannten Produkte, Spezial-Software-Lösungen sowie den Einbau neuer Module in Software anderer Anbieter.

LINKS

Fraunhofer SCAI analysiert und optimiert industrielle Prozesse.



1

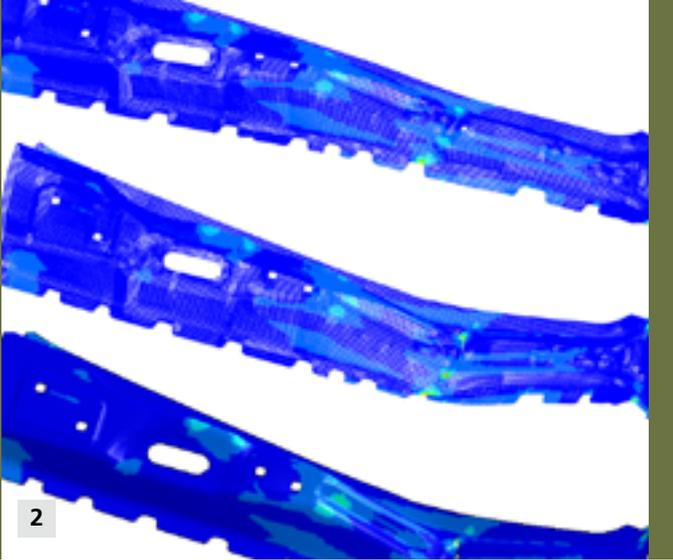
OPTIMIERUNG UND STATISTISCHE ANALYSE

Fraunhofer SCAI arbeitet im Geschäftsfeld *High Performance Analytics* an mehreren Entwicklungen in den Bereichen Energienetze, Energieverbrauchsoptimierung und Robust Design. Neben der Erweiterung des Software-Pakets *MYNTS* und der Entwicklung der *PRO-CHAIN*-Technologie, die die Einflüsse von Parameterunsicherheiten für komplette Prozessketten analysiert, arbeitet SCAI im Projekt *EnCoMOS* an der Erkennung und der Erschließung von Energieeinsparmöglichkeiten.

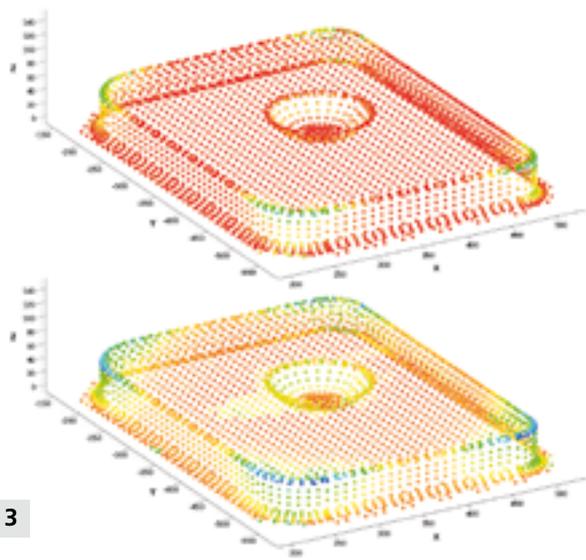
Energienetze zu simulieren und Energieverbräuche zu optimieren hat eine steigende volkswirtschaftliche Relevanz. Das von Fraunhofer SCAI entwickelte Software-Paket *MYNTS* adressiert zum einen die Energieversorgung, beispielsweise komplexe Fernleitungsgasnetze mit vielen Verdichterstationen, aber auch Energiekreisläufe in Produktionsprozessen, sowie Rechenzentren. Die gerade erschienene Version 2.6 von *MYNTS* bietet mehrere Module zur (kontinuierlichen nichtlinearen) Optimierung, beispielsweise mit dem Ziel der Reduktion der gesamt aufgewendeten Energie, der Maximierung der Effizienz eingesetzter Maschinen oder der bestmöglichen Einhaltung geplanter Einspeise- und Abnahmebedingungen. *MYNTS* bietet nun auch umfangreiche Möglichkeiten zur automatisierten Ensemble-Analyse. Hierbei geht es um die statistische Analyse parametrisierter Simulationsmodelle. Alle der Simulation zugänglichen kontinuierlichen (beispielsweise Höhen, Rohrrauigkeiten, Temperaturen, Druck- bzw. Flussbedingungen) und auch diskreten Parameter (zum Beispiel Ventilstellungen) können dabei variiert und Einflüsse insbesondere visuell analysiert werden.

Der Energie- und Ressourcenverbrauch macht bei vielen Unternehmen – etwa aus den Bereichen Chemie, Metall oder Pharma – über 60 Prozent der Produktionskosten aus. Effiziente Energienutzung ist daher für solche Unternehmen von besonders großer Bedeutung. Zur Optimierung der Energienutzung wurde von der Internationalen Organisation für Normung (ISO) die Norm DIN EN ISO 50001 »Energiemanagementsysteme« (EnMS) erarbeitet. Die praktische Umsetzung eines EnMS ist jedoch aufgrund der Vielzahl abhängiger Steuerparameter in komplexen Produktionsprozessen eine nennenswerte Herausforderung.

Ziel des Projekts *EnCoMOS*, in dem Fraunhofer SCAI mit der Kölner Firma *werusys* zusammenarbeitet, ist es deshalb, ein Software-Werkzeug zu entwickeln, das als Assistenzsystem den Aufbau eines normgerechten EnMS ermöglicht und mit dem sich Einsparpotenziale erkennen und erschließen lassen. Der neuartige Ansatz sieht vor, optimale Betriebsfahrweisen von Produktionsprozessen im laufenden Betrieb und unter Einbeziehung aller relevanten Einflusskriterien zu ermitteln. Hierzu generiert das System aus aktuellen Betriebsdaten zeitabhängige Prozessmodelle, aus denen bereits für zwei erste einschlägige Beispiele aus der chemischen Industrie erfolgreich Trends abgeleitet und bewertet werden können. Zu diesem Zweck wurden Erweiterungen von *DesParO* entwickelt. Das System soll zudem dynamische Energiefluss-Simulationen mittels *MYNTS* für Szenario-Analysen generieren. In die darauf aufbauende Optimierung gehen neben den in den Produktionsprozessen eingesetzten verschiedenen Energiemedien (zum Beispiel Strom, aber auch Gas, Öl, Dampf, Druckluft und Stickstoff) auch flexibel



2



3

über den Tag verteilte Energiepreise und weitere Aspekte wie Durchsatz- und Qualitätsziele ein. Das Projekt wird vom Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF) gefördert.

Die effiziente statistische Analyse mehrerer aufeinanderfolgender Prozesse («Prozesskette») ist in vielen Industriezweigen von großer Relevanz. Unsicherheiten der Design-Parameter in jedem einzelnen Prozessschritt können teils erhebliche Auswirkungen auf die nachfolgenden Schritte haben. Dies gilt beispielsweise für B-Säulen, die eine besondere Bedeutung in der Crash-Sicherheit von Fahrzeugen haben.

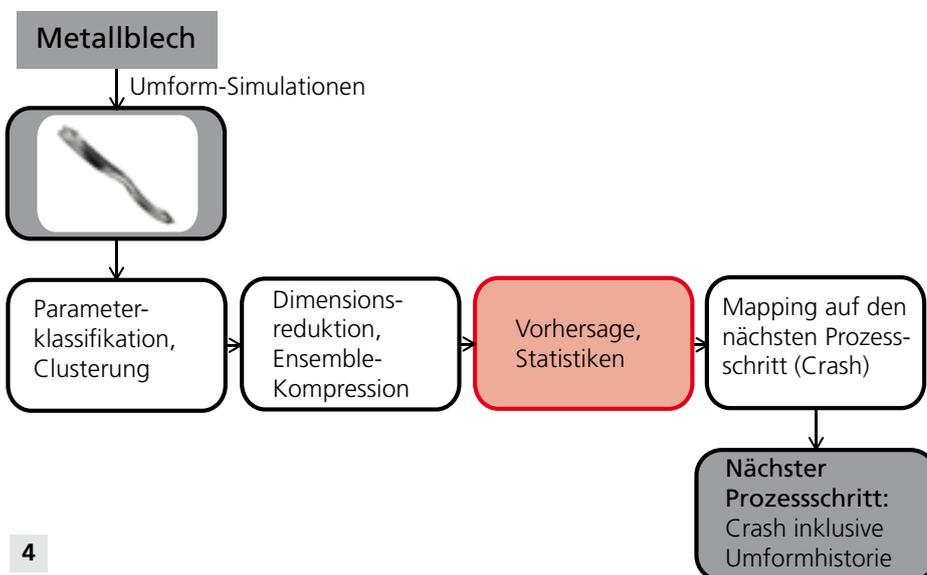
Aufgrund des hohen Zeitaufwandes für hoch aufgelöste Simulationen und eines enormen Datenaufkommens ist die ganzheitliche Betrachtung von Unsicherheiten in Prozessketten bisher nicht Stand der Technik. Daher hat SCAI die Methodik PRO-CHAIN entwickelt. Diese erlaubt eine hinsichtlich Rechenzeit und Speicherverbrauch effiziente Analyse, Quantifizierung und Übertragung der Einflüsse von Parameterunsicherheiten für komplette Prozessketten. Die patentierte PRO-CHAIN-Technologie bietet dabei lokal und global hohe Vorhersagegenauigkeit. PRO-CHAIN wurde beispielsweise erfolgreich auf eine komplexe Prozesskette von der Blechumformung hin zur Unfallsimulation (Crash) in der Entwicklung von B-Säulen angewandt. Die Effizienz sowie die Vorteile der Methodik im Vergleich zu typischen Quasi-Monte-Carlo-Verfahren konnte gezeigt werden. Insbesondere wurde demonstriert, wie wichtige Einflüsse der Unsicherheiten identifiziert, lokale Riss-Knick-Effekte charakterisiert und ein mögliches Bauteilversagen korrekt vorhergesagt werden können.

1 Grafische Benutzeroberflächen für MYNTS (Version 2.6, 64bit, Windows).

2 Mittels PRO-CHAIN berechnete Vorhersage der Deformationen und Verteilung der effektiven plastischen Dehnung und Vergleich mit zugehörigem Simulationsergebnis (unten) bei unrealistisch überladener B-Säule.

3 Lokale statistische Analyse mittels PRO-CHAIN zur effizienten Nutzung von Quantilen in robuster Optimierung. Unten: Median, Oben: 95%-Quantil der Blechdickenverteilung des Bauteils.

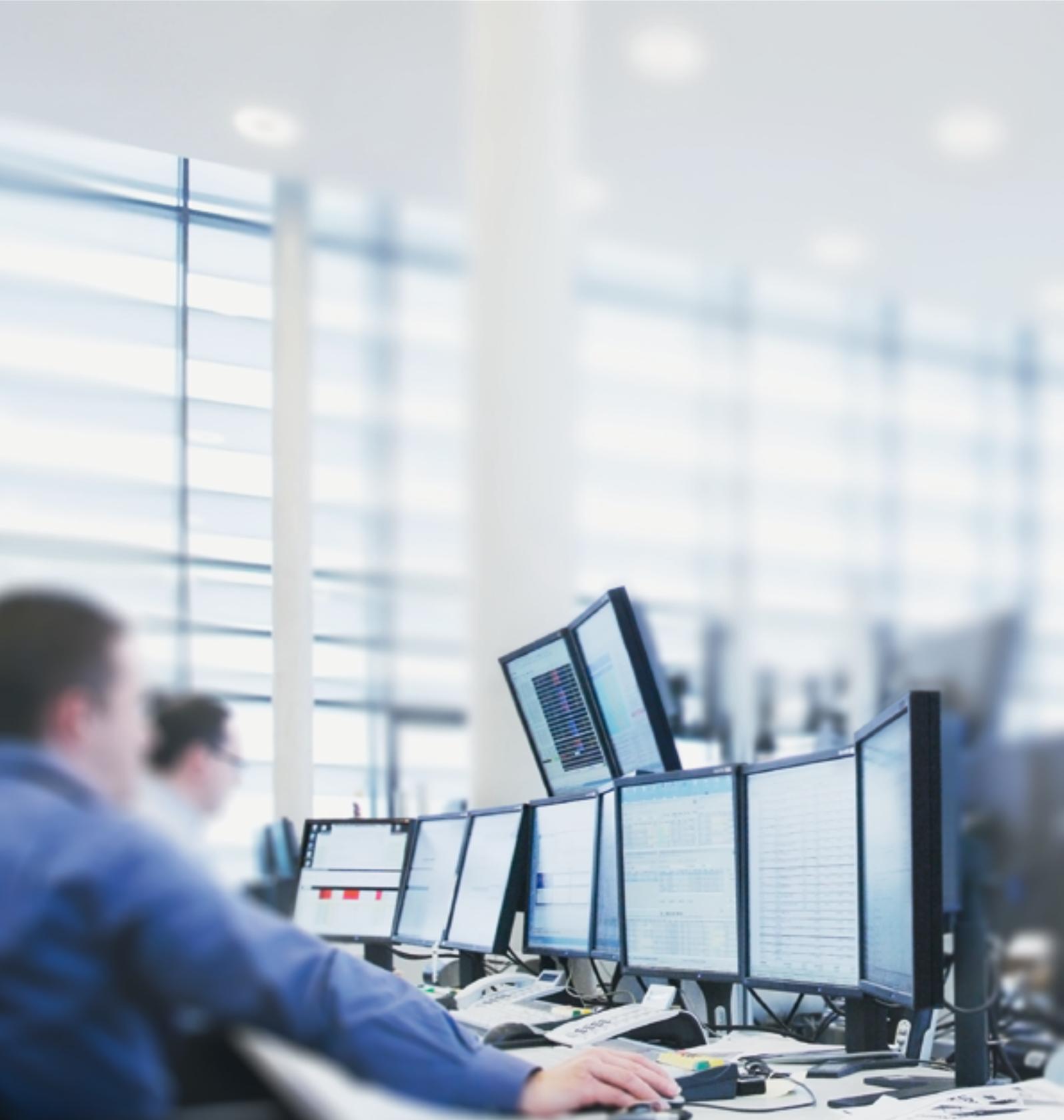
4 Methodik PRO-CHAIN am Beispiel der Prozesskette Umformen zu Crash.



4

ANSPRECHPARTNERIN

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



COMPUTATIONAL FINANCE

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

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

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

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

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

- Bei der effizienten und genauen Bewertung von Finanzderivaten wird der faire Preis eines Derivates ermittelt. Aktuelle Herausforderungen hierbei sind immer komplexer werdende Finanzprodukte sowie immer ausgefeiltere Finanzmarktmodelle, die zu sehr hohen Rechenzeiten führen.
- Asset-Liability-Management (ALM)-Modelle werden eingesetzt, um die mittel- und langfristige Entwicklung aller Aktiva und Passiva eines Versicherungsprodukts zu simulieren. Auf diese Weise kann die Exposition des Versicherungsunternehmens auf Finanz-, Sterblichkeits- und Kündigungsrisiken analysiert werden. Die hierzu bislang eingesetzten Monte-Carlo-Verfahren benötigen aber ebenfalls oft sehr lange Rechenzeiten, um Ergebnisse mit akzeptabler Genauigkeit zu erhalten. Als Konsequenz sind ein häufiges und umfassendes Risikomanagement, ausführliche Sensitivitätsstudien oder die Optimierung von Produktparametern und Managementregeln bisher oft nicht möglich.

Für beide Anwendungsszenarien entwickelt Fraunhofer SCAI neue robuste numerische Verfahren, die Berechnungen mit hoher Genauigkeit bei gleichzeitiger substanzieller Reduktion der Rechenzeiten erlauben, und realisiert diese auf parallelen Hochleistungs-Rechensystemen.

ABTEILUNGSLEITER

Prof. Dr. Thomas Gerstner

Telefon +49 2241 14-2374

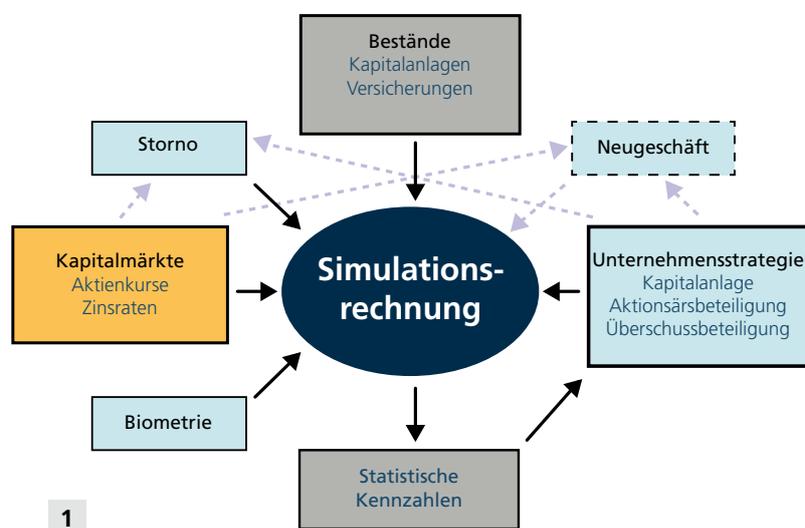
thomas.gerstner@

scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de / cf

LINKS

Handelsraum der Börse in München.



RISIKO-MANAGEMENT FÜR LEBENSVERSICHERUNGEN

Im Projekt »Stochastische Modellierung und Numerische Simulation für das Risikomanagement von Versicherungsunternehmen« wird ein Software-Paket zum umfassenden Asset-Liability-Management eines Lebensversicherungsunternehmens entwickelt, das die neuesten Entwicklungen in der stochastischen Modellierung und der numerischen Simulation berücksichtigt.

Die Bestimmung der optimalen Strategie zur Anlage eingekommener Prämien bei gleichzeitiger Sicherstellung der teils erheblich später an die Versicherten zu leistenden Auszahlungen stellen die Hauptaufgaben des Asset-Liability-Managements (kurz: ALM) einer Lebensversicherung dar.

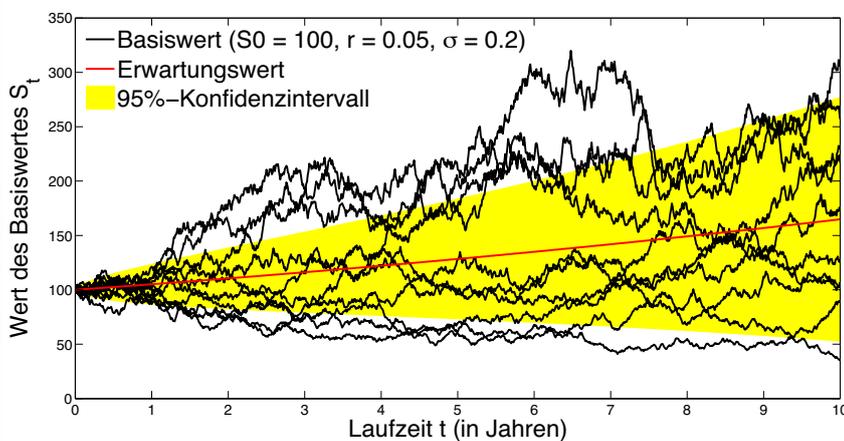
Durch dramatische Veränderungen auf der Anlageseite (zum Beispiel die Niedrigzinsphase), die Erhöhung der Lebensdauer der Versicherten auf der Verpflichtungsseite sowie neue rechtliche Rahmenbedingungen (Solvency II, Altersvorsorgeverbesserungsgesetz) sind auch kleine und mittlere Versicherer zu einem verbesserten ALM gezwungen, nicht zuletzt deshalb, weil durch die schlechte Marktlage eine vorsichtige, grobe Kalkulation von Prämien durch großzügige Abschätzung zukünftiger Erträge ohne ein detailliertes ALM nicht mehr möglich ist.

In diesem Projekt werden daher neue Ansätze zur Modellierung und Simulation von Versicherungsprodukten und -unternehmen entwickelt und implementiert. Durch ein innovatives modulares Konzept ist diese Entwicklung sowohl für kleine, mittlere als auch große Versicherer geeignet, da sein Funktionsumfang sowohl im Hinblick auf die zu erledigenden Aufgaben als auch auf die zur Verfügung stehende Modellauswahl angepasst werden kann.

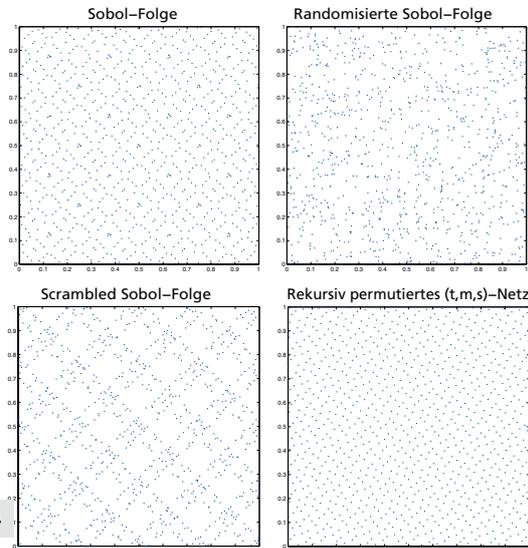
Gleichzeitig sollen mit der Software alle aktuellen regulatorischen Anforderungen erfüllt werden. Auf der informationstechnischen Seite werden dabei modernes algorithmisches Design, modulare Strukturierung, webbasierte Schnittstellen und Cloud-Techniken für verteiltes Rechnen zum Einsatz kommen, die gerade auch kleineren Unternehmen gestatten, ihre zeitaufwändigen Simulationsrechnungen außer Haus (zum Beispiel bei Fraunhofer ITWM oder Fraunhofer SCAI) durchführen zu lassen.

Das Projekt wird im Rahmen der Fraunhofer-Vorlauftforschung gefördert und gemeinsam von den Fraunhofer-Instituten ITWM und SCAI durchgeführt.

- 1 *Modellierungs- und Simulationsaufgaben.*
- 2 *Ansicht der Software SG-ALM im Web-Browser.*



3



4

In der Software SG-ALM (Bild 2) werden bereits stochastische ALM-Modelle eingesetzt, um die mittel- und langfristige Entwicklung aller Aktiva und Passiva eines Versicherungsunternehmens zu simulieren. Hier ist eine Kopplung verschiedener Modellierungs- und Simulationaufgaben zu behandeln (Bild 1). Auf diese Weise kann die Exposition des Unternehmens auf Finanz-, Sterblichkeits- und Kündigungsrisiken analysiert werden. Die Simulationsergebnisse werden dann verwendet, um Managemententscheidungen hinsichtlich der Anlagestrategie, der Bonusdeklaration, des zeitlichen Abgleichs von Aktiva und Passiva oder der Entwicklung neuer profitabler und kompetitiver Versicherungsprodukte optimal zu treffen.

Die Modelle werden ebenfalls genutzt, um faire, marktbasierende Buchführungsstandards umzusetzen, wie sie durch Solvency II und den International Financial Reporting Standard (IFRS) gefordert werden. Ein Hauptziel ist dabei die Berechnung statistischer Zielgrößen (Erwartungswerte, Varianzen, Risikomaße), um Risiko-Ertrags-Profile des Unternehmens und Embedded Values zu bestimmen.

Zur numerischen Simulation von Finanzprodukten werden in der Praxis üblicherweise Monte-Carlo-Verfahren eingesetzt, die auf der Mittelung einer großen Anzahl simulierter Szenarien basieren. Diese Verfahren sind zwar robust und leicht implementierbar, leiden aber an sehr langsamen Konvergenzraten. Da die Simulation jedes Szenarios den Durchlauf über alle relevanten Zeitpunkte und über alle Verträge im Portfolio des Unternehmens benötigt, sind oft sehr lange Rechenzeiten nötig, um Approximationen mit akzeptabler Genauigkeit zu erhalten.

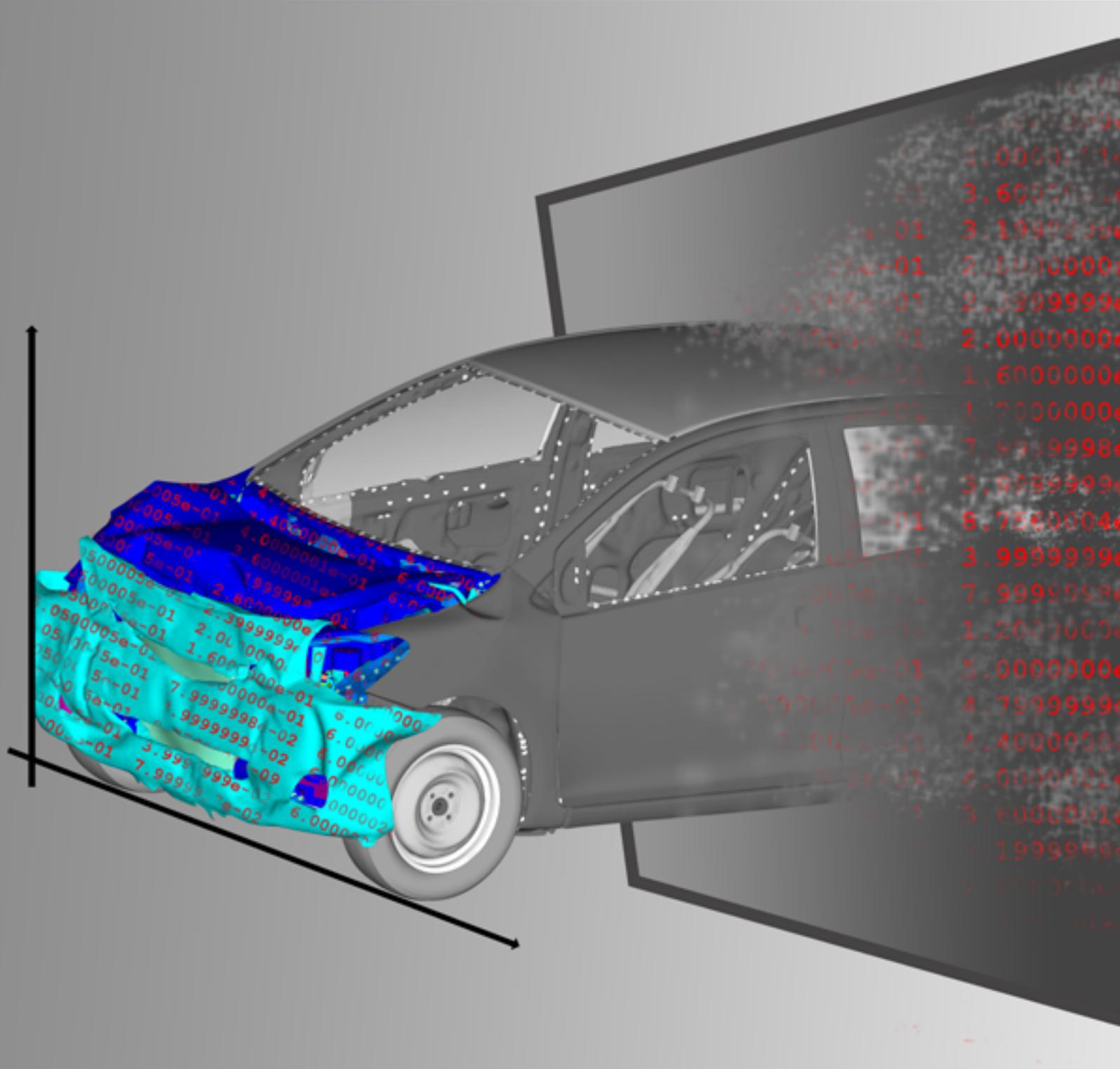
Moderne numerische Ansätze betrachten das Simulationsproblem als mehrdimensionales Integrationsproblem und setzen Quasi- und Multilevel-Monte-Carlo-Methoden in Kombination mit Adaptivität und Dimensionsreduktion zur Berechnung ein (Bild 3). Diese Alternativen zur klassischen Monte-Carlo-Simulation basieren ebenfalls auf einer geeigneten Mittelung verschiedener Szenarien, verwenden aber deterministische statt zufälliger Sample-Punkte (Bild 4) und betrachten dabei mehrere Verfeinerungslevel. Sie können schnellere Konvergenzraten als Monte-Carlo-Verfahren erreichen, indem sie die Glattheit des Problems ausnutzen, und besitzen deterministische obere Fehlerschranken. Auf diese Weise reduzieren diese Methoden die erforderliche Zahl an Szenarien und damit die benötigte Rechenzeit signifikant und ermöglichen so erst die Optimierung von Produktparametern und Anlagestrategien.

3 Quasi-Monte-Carlo-Simulation (Sobol-Folgen) von zehn Basiswerten mit einer Laufzeit von zehn Jahren.

4 Sobol-Folge, randomisierte Sobol-Folge, scrambled Sobol-Folge sowie rekursiv permutiertes (t, m, s) -Netz, jeweils für $n = 1000$ Punkte.

ANSPRECHPARTNER

Prof. Dr. Thomas Gerstner
 Telefon +49 2241 14-2374
 thomas.gerstner@
 scai.fraunhofer.de



NUMERISCHE DATENBASIERTE VORHERSAGE

Das Geschäftsfeld *Numerische datenbasierte Vorhersage* (NDV) entwickelt Methoden und Software, um aus automatisch gesammelten Datenbeständen zeitnahe Analysen und Prognosen über zukünftiges Verhalten zu generieren. Dies umfasst sämtliche Fragen im Zusammenhang mit der Analyse, der Optimierung, der Wiederverwertung und der Speicherung von Daten.

Datenbasierte Vorhersagen treten in vielen Anwendungsgebieten auf. Beispiele dafür sind

- die Analyse von Scharen von numerischen Simulationsdaten,
- die Untersuchung von Sensordaten aus Monitoring-Systemen,
- die technische Trendvorhersage von Wechselkursen und anderen Finanzprodukten,
- Empfehlungsmaschinen für Produktvorschläge im Online-Handel.

Kern unserer Forschungsarbeiten ist es, effiziente numerische Methoden zur Lösung hochdimensionaler Probleme zu entwickeln. Wir entwickeln beispielsweise Verfahren, die es ermöglichen, bei großen Datenmengen in relativ kurzer Zeit eine vorteilbringende Prognosegüte zu erzielen. Damit empfehlen sie sich für Kunden mit Anwendungsfällen, bei denen es auf eine schnelle Analyse umfangreichen Datenmaterials ankommt und in denen herkömmliche nichtlineare Verfahren der Datenanalyse zu langsam sind. Auf Basis von Dimensionsreduktionsverfahren entwickeln wir Software-Lösungen, die es Ingenieuren erlauben, einfach und interaktiv große Datenmengen aus der virtuellen Produktentwicklung oder dem Monitoring zu untersuchen. Dabei machen diese Analysemethoden es für die Ingenieure möglich, auf Grund der Datenbasis schneller Entscheidungen zu treffen.

Ein Beispiel hierfür bilden Simulationsanwendungen aus der Automobilindustrie. Durch vergleichende Analysen können die Zuverlässigkeit von Simulationen (zum Beispiel Crash-Simulationen) bewertet, Produkteigenschaften optimiert und die Weiterentwicklung neuer Modellvarianten auf viel versprechende Ansätze konzentriert werden. Der Entwicklungsingenieur spart Zeit und gewinnt Sicherheit in der Zuverlässigkeit der Vorhersage.

Konkret entwickelt Fraunhofer SCAI Data-Mining-Methoden zur Analyse von Simulationsergebnissen und konzipiert diese als Zusatzfunktionalität für bestehende kommerzielle Software-Produkte im Simulationsumfeld. Die Funktionalität bestehender Postprocessing-Tools wird mit diesen Methoden erweitert und gegebenenfalls zu eigenständigen neuartigen Software-Tools weiterentwickelt mit dem Ziel, den Erkenntnisgewinn aus Simulationsdaten zu erhöhen.

ABTEILUNGSLEITER

Prof. Dr. Jochen Garcke

Telefon +49 2241 14-2286

jochen.garcke@

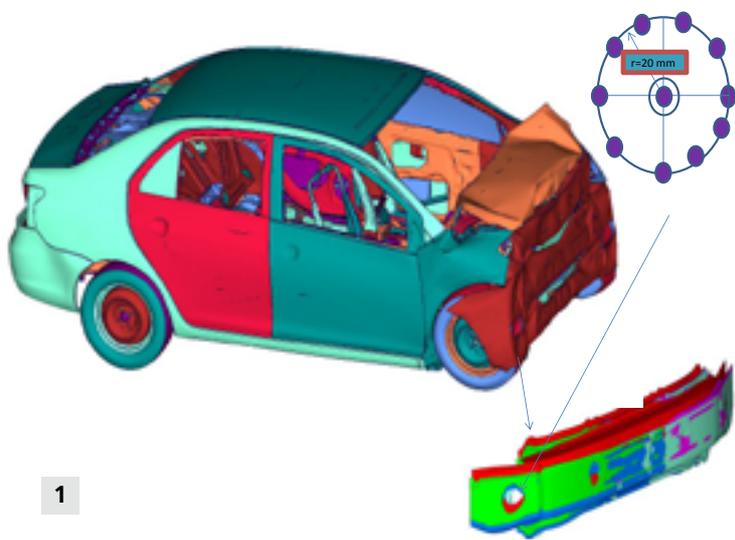
scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/ndv

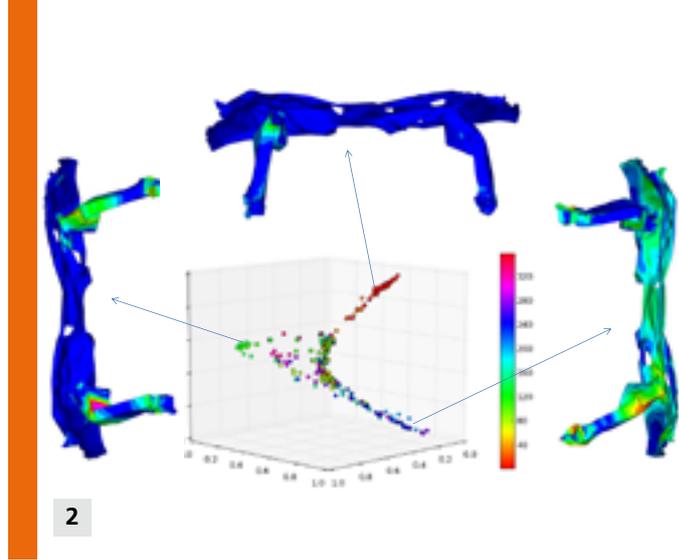
LINKS

Simulation eines

Crash-Versuchs.



1



2

EFFIZIENTE DATENANALYSE IN DER PRODUKTENTWICKLUNG

Numerische Simulationen werden heute in nahezu allen Bereichen der virtuellen Produktentwicklung eingesetzt. Im Automobilbau dienen sie beispielsweise dazu, Eigenschaften neuer Fahrzeuge vorherzusagen. Eine Herausforderung dabei ist es, eine Vielzahl hochdimensionaler Datensätze zu analysieren. Fraunhofer SCAI entwickelt neuartige Verfahren zur Dimensionsreduktion, die es ermöglichen, Zusammenhänge in derartigen großen numerischen Datenbeständen schnell und mit geringem Aufwand zu identifizieren.

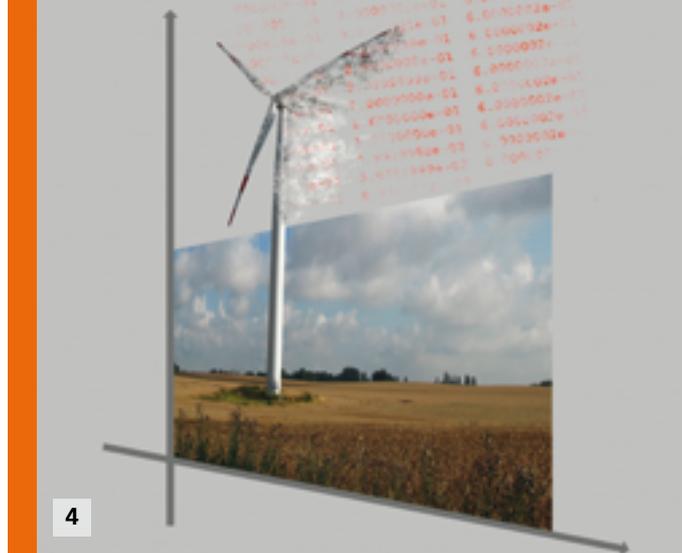
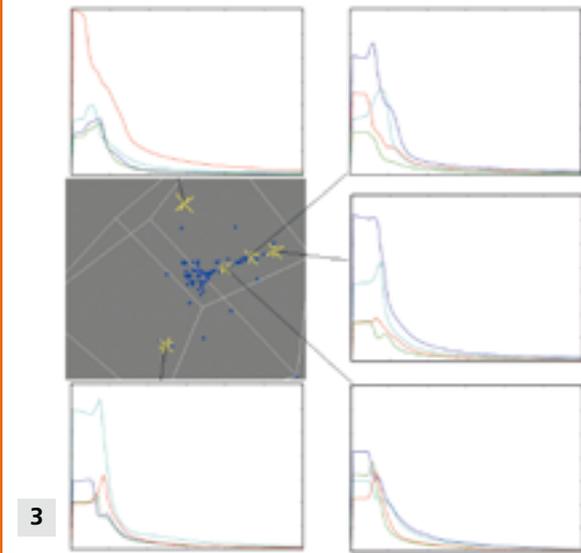
Ziel der Forschungsarbeiten ist die Entwicklung einfacher und interaktiver Verfahren, die den Entwicklungsingenieur im Post-Processing unterstützen und es ermöglichen, viele Modellvarianten zu untersuchen. Bisher wird jede Variante mit 3D-Visualisierungssoftware analysiert und mit allen anderen Varianten händisch verglichen. Dies ist notwendig, um eine Entscheidung über die besten Produkteigenschaften unter Einbeziehung der Kosten zu treffen. Diese Auswertung verlangt bislang eine sehr zeitintensive Evaluierung aller Varianten. Während konventionelle Post-Processing-Methoden Simulationszeiten von mehreren Tagen benötigen, ermöglichen es unsere neu entwickelten Verfahren durch die Dimensionsreduktion, eine sehr schnelle und intuitive Analyse Hunderter von Simulationen in wenigen Stunden durchzuführen.

1 Untersuchungen zur Positionierung der Stoßstange im Frontalaufprall.
2 Verformungsmodi in Abhängigkeit von der Position der Stoßstange: Dargestellt sind die Verformungen der Längsträger und der Stirnwand.

Das Verfahren findet konkrete Anwendung bei der Auswertung numerischer Simulationen in der Automobilindustrie, wo Computer-Aided Engineering (CAE)-Modelle und Simulationsergebnisse in Archiven von enormer Größe gespeichert werden.

Die praktische Anwendbarkeit des Verfahrens verdeutlicht die Untersuchung des Effekts der Positionierung der Stoßfänger zur Montage der Stoßstange bei einem Toyota Yaris. In diesem Beispiel wird die Position der Stoßfänger um einen Kreis mit Radius 20 mm variiert (siehe Bild 1). Um die Wirkung dieser Positionierung auf das Crash-Verhalten zu evaluieren, wurden insgesamt 300 Simulationen mit LS-DYNA durchgeführt. Jeder Simulation entspricht dabei eine bestimmte Winkelposition. Diese Winkelpositionen sind im Bereich von 0 bis 360 Grad gleichmäßig verteilt.

Durch die Nutzung der entwickelten modernen Verfahren zur nichtlinearen Dimensionsreduktion konnten in kurzer Zeit drei dominante Verformungsmodi und drei dafür ursächliche Winkelbereiche identifiziert werden. In Bild 2 sind die Verformungen der Längsträger und der Stirnwand dargestellt, wobei die auf den Bauteilen dargestellte Farbe die Differenz zu einer



Referenzsimulation wiedergibt. Im eigentlichen 3D-Plot entspricht jeder Punkt einer Simulation und ist in Abhängigkeit zur Winkelposition gefärbt.

Ein weiteres Beispiel ist die Analyse von Produktionskurven im Energiebereich. So werden numerische Simulationen bei Ölreservoirs genutzt, um Ölproduktionsraten vorherzusagen. Bei Windenergieanlagen wird das Leistungsverhalten bei verschiedensten Windbedingungen numerisch simuliert. In der Analyse sind in beiden Fällen mehrere Zeitreihen verschiedener Ölfeldkonfigurationen beziehungsweise Windtubinenkonfigurationen zu untersuchen. Hier erlaubt die Methode der nichtlinearen Dimensionsreduktion wiederum die einfache Identifizierung unterschiedlichen Verhaltens. In Bild 3 sehen wir drei ausgeprägte Gruppierungen der Zeitreihen mit unterschiedlichem Verhalten und repräsentative Kurven jeder Gruppierung.

Diese neue Möglichkeit zur Datenanalyse von Ingenieurdaten ist einzigartig. Mit ihr ist es nun erstmalig möglich, einen automatisierten Überblick über Varianten einfach zu erstellen sowie Einzelkomponenten interaktiv zu extrahieren und darzustellen. Der Ansatz ermöglicht eine deutliche Reduktion der Post-Processing-Zeit zur Bearbeitung vieler Simulationen, je nach konkretem Anwendungsfall von bis zu mehreren Tagen auf wenige Stunden.

Das Software-Tool wird aktuell zum Produkt weiterentwickelt, insbesondere als Plug-In für existierende Software-Lösungen kooperierender Unternehmen. Es wird der Industrie sowohl in Form von Lizenzen als auch als Dienstleistung im Rahmen von Analysestudien zur Verfügung gestellt.

3 *Gruppierungen von Zeitreihen bei Windenergieanlagen.*

4 *Windenergieanlage.*

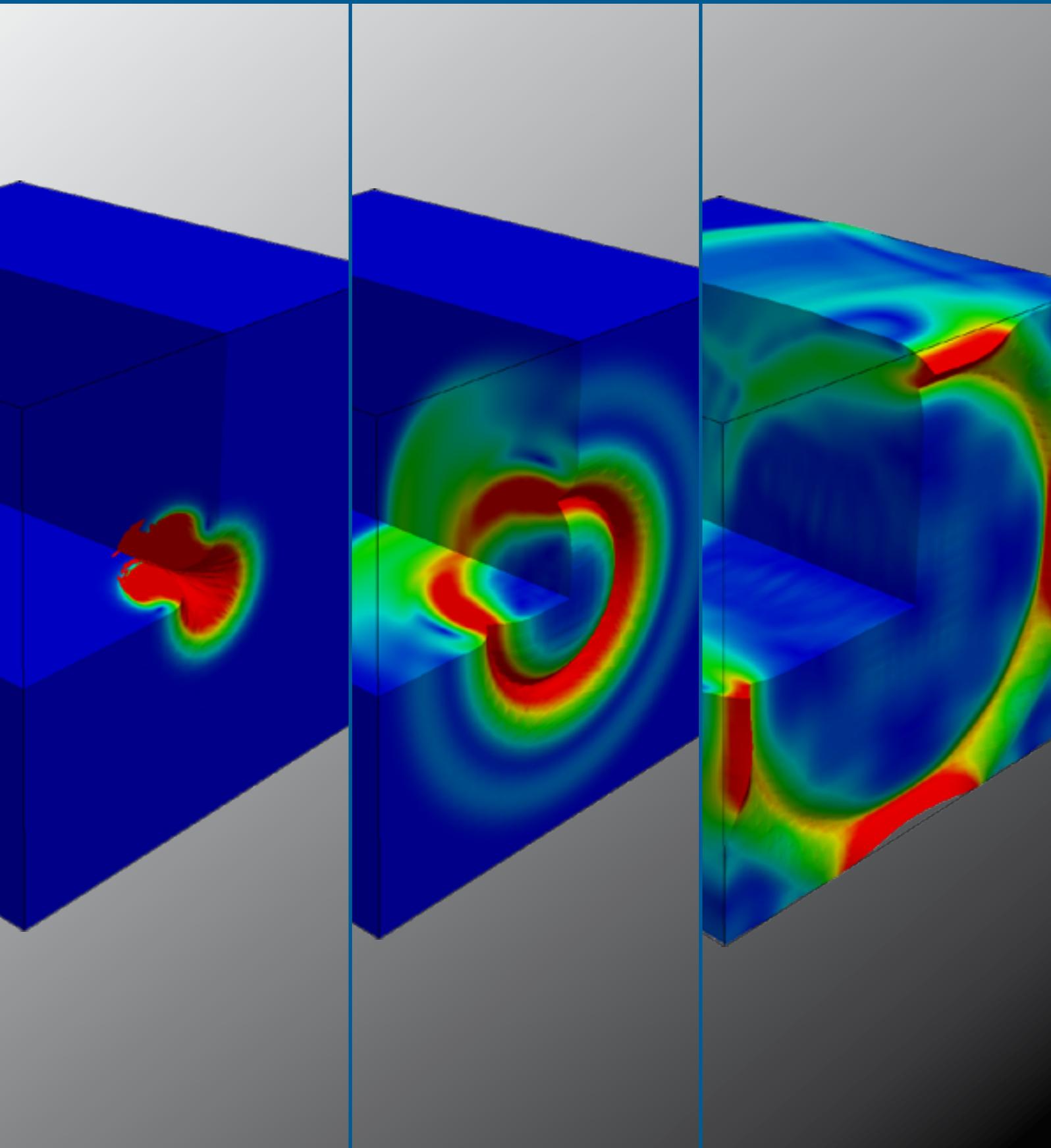
ANSPRECHPARTNER

Prof. Dr. Jochen Garcke

Telefon +49 2241 14-2286

jochen.garcke@

scai.fraunhofer.de



MESHFREE MULTISCALE METHODS

Die Vorhersage des Materialversagens und des Bruchverhaltens großer Bauteile spielt in vielen industriellen Bereichen eine entscheidende Rolle. Ein Beispiel ist die Lebenszeitprognose von Radreifen bei Schienenfahrzeugen, von Flugzeugen oder von Staudämmen.

Im neuen Geschäftsfeld *Meshfree Multiscale Methods*, mit dessen Aufbau SCAI im Jahr 2013 begonnen hat, werden effiziente Mehrskalmethoden entwickelt, die es ermöglichen, Materialversagen und Bruchverhalten großer Bauteile zu analysieren. Dazu gehören gitterfreie Methoden wie Partikel-basierte Mehrskalverfahren und die Verallgemeinerung von Finite-Element-Methoden.

Gerade in Anwendungsbereichen, die bei der Simulation an die Grenzen der klassischen Finite-Element-Technik stoßen, zeigt sich der Bedarf an solchen neuen Simulationstechniken. So konnte im Jahr 2014 eine Kooperation mit dem Flugzeughersteller Boeing im Bereich gitterfreier Methoden initiiert werden.

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

Ein Schwerpunkt der Arbeiten der Abteilung liegt auf der Entwicklung der Partition-of-Unity-Methode – einer gitterfreien Verallgemeinerung der Finiten-Element-Methode, in der auf einfache Art und Weise problemabhängige Basisfunktionen direkt verwendet werden können. Diese anwendungsspezifischen Basisfunktionen können hier analytisch oder auch nur als numerische oder experimentelle Daten gegeben sein. Insgesamt ermöglicht dieser Ansatz eine deutlich bessere Approximation mit weniger Freiheitsgraden. Insbesondere bei Problemen mit singulären oder oszillierenden Lösungen zeigt dieser Ansatz deutliche Rechenzeitvorteile gegenüber klassischen Finite-Elemente-Methoden. Auch bei der Simulation dynamischer Prozesse lassen sich mit diesen verallgemeinerten Methoden enorme Effizienzsteigerung erzielen.

ABTEILUNGSLEITER

Prof. Dr. Marc Alexander

Schweitzer

Telefon +49 2241 14-2037

marc.alexander.schweitzer@

scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de/

mmm

LINKS

Simulation elastischer

Wellen mittels einer

Partition-of-Unity-Methode

höherer Ordnung.



IT-LÖSUNGEN FÜR KUNDEN UND FÜR SCAI

IT-S ist eine interdisziplinäre Gruppe bei Fraunhofer SCAI, die IT-Dienstleistungen für das Institut bereitstellt sowie in nationalen und europäischen Förderprojekten der Informations- und Kommunikationstechnik engagiert ist.

SCAI verfügt über eine hochmoderne Rechnerausstattung und Infrastruktur. Die Gruppe IT-S betreibt HPC- und Cloud-Infrastrukturen, dazu gehört ein HPC-System mit nahezu 5000 Rechenkernen, benannt nach dem nahe gelegenen Berg Drachenfels am Rhein. Hinzu kommen spezielle kleine Cluster mit neuen Xeon-Phi-Coprozessoren und Nvidia GPUs, sowie ein auf Microsoft Windows HPC basierendes Cluster. Umgebungen für Cloud-Computing mit unterschiedlicher Cloud-Middleware werden ebenfalls angeboten und können evaluiert werden. Zusätzlich zu den vielfältigen Angeboten für das Institut, bietet IT-S externen Kunden Rechenressourcen als Software as a Service (SaaS) an.

IT-S ist am Projekt cloud4health beteiligt, das vom Bundesministerium für Wirtschaft und Energie gefördert wird. Dort leitet IT-S den Betrieb der sicheren Cloud-Infrastruktur, die im Projekt für die Sekundäranalyse medizinischer Routinedaten genutzt wird. Ein übergreifendes Datenschutz- und Datensicherheitskonzept stellt dabei Vertraulichkeit und Integrität der Datenverarbeitung sicher. IT-S gehört mit der Abteilung *High Performance Analytics* zu den Partnern im Projekt SIMOPEK, einem Projekt zur Optimierung der Wasser- und Kühlkreisläufe in Supercomputer-Rechenzentren.

Im von der Europäischen Kommission geförderten Projekt VERCE steuert IT-S seine Erfahrungen im Grid- und Cluster-Computing sowie Kompetenzen in der Service-Entwicklung und Service-Integration in verteilten Infrastrukturen bei. VERCE entwickelt effiziente, datenintensive Lösungen für die seismologische Forschung. IT-S erarbeitet in diesem Kontext einen skalierbaren Cloud-Dienst, der nicht nur den einfachen Zugriff auf seismologische Daten als Webservice bereitstellt, sondern auch die Möglichkeit bietet, in einer abgesicherten Umgebung interaktiv den Programmcode zu ändern und automatisch Cloud-Ressourcen anzupassen.

Auch die Unterstützung von Anwendern aus den Geowissenschaften bei der Nutzung von Europäischen Grid- und Cloud-Infrastrukturen in EU-Projekten wie EGI-Inspire oder in Zukunft EGI-Engage gehört seit vielen Jahren zu den Aktivitäten der Gruppe. IT-S ist dazu in den Betrieb dieser europäischen Infrastruktur integriert.

ANSPRECHPARTNER
Dipl.-Mathematiker
Horst Schwichtenberg
Telefon +49 2241 14-2577
horst.schwichtenberg@
scai.fraunhofer.de

LINKS

*Drachenfels-Cluster von
Fraunhofer SCAI im
Green-IT-Rechenzentrum.*



WEITERFÜHRENDE INFORMATIONEN

ONLINE-RUBRIKEN DES JAHRESBERICHTS:

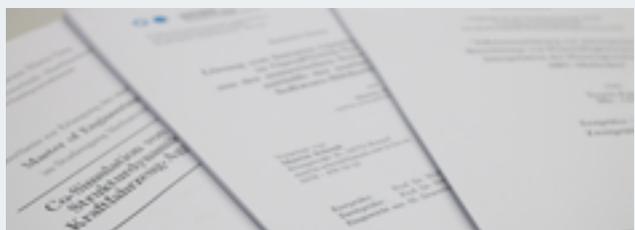
Publikationen

www.scai.fraunhofer.de/publikationen.html



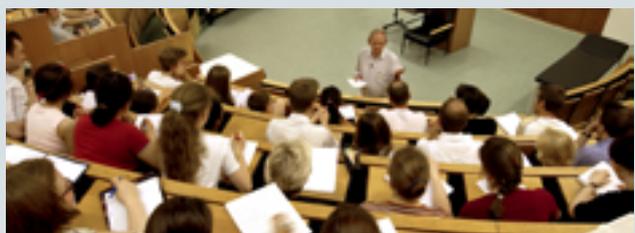
Graduierungsarbeiten

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



Lehrtätigkeiten

www.scai.fraunhofer.de/lehre.html



Veranstaltungen

www.scai.fraunhofer.de/veranstaltungen.html



ANFAHRT

Anreise mit dem Auto

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

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

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

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

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

Anreise mit dem Zug, Bus oder Taxi

Vom Hauptbahnhof Bonn

Mit der Straßenbahn Linie 66 Richtung Siegburg Bahnhof bis »Hangelar Ost«. Anschließend mit dem Bus 636 Richtung »Bonn-Beuel, Konrad-Adenauer-Platz« bis Station »Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin« (in der Hauptverkehrszeit alle 30 Minuten).

Mit dem Bus vom ZOB Abschnitt B3, Linie 608, Richtung »Gielgen«. Dort umsteigen in die Linie 636 Richtung »Bonn-Beuel, Konrad-Adenauer-Platz« bis zur Haltestelle »Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin«.

Mit einem Taxi zum Schloss Birlinghoven. Die Fahrt dauert etwa 20 Minuten.

Vom Bahnhof Siegburg/Bonn

(Haltepunkt der rechtsrheinischen ICE-Strecke Köln – Frankfurt)

Mit der Straßenbahn Linie 66 Richtung »Bad Honnef« oder »Ramersdorf« bis »Hangelar Ost«. Dort mit dem Bus 636 Richtung »Bonn-Beuel, Konrad-Adenauer-Platz« bis zur Station »Schloss Birlinghoven, Sankt Augustin« (in der Hauptverkehrszeit alle 30 Minuten).

Mit einem Taxi zum Schloss Birlinghoven. Die Fahrt dauert etwa 15 Minuten.

Anreise mit dem Flugzeug

Vom Flughafen Köln/Bonn

Regionalexpress über Troisdorf zum Bahnhof Siegburg/Bonn

Bus SB60 nach Bonn Hbf (meist alle 20 Minuten, planmäßige Fahrzeit 35 Minuten)

Taxi zum Schloss Birlinghoven. Die Fahrt dauert etwa 25 Minuten.

Vom Flughafen Düsseldorf oder Flughafen Frankfurt

IC/ICE nach Bonn Hauptbahnhof oder zum Bahnhof Siegburg/Bonn.

IMPRESSUM

HERAUSGEBER

Fraunhofer-Institut für Algorithmen
und Wissenschaftliches Rechnen SCAI

Institutsleiter

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

Anschrift

Schloss Birlinghoven
53757 Sankt Augustin

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

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

Redaktion

Diplom-Journalist Michael Krapp, Dr. Anton Schüller

Gestaltung und Produktion

Swetlana Schilinski, Sabrina Frede

Fachtexte

Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter von Fraunhofer SCAI

© 2015

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

Alle Rechte vorbehalten.

Vervielfältigung und Verbreitung nur mit Genehmigung der
Redaktion.

Bildquellen

- S. 8: Fraunhofer-Gesellschaft München
S. 9: MEV Verlag GmbH (1), Fraunhofer IAIS (2)
S. 10: Frank Luerweg, Universität Bonn
S. 13: Fraunhofer IPA
S. 23: KLEO Halbleitertechnik GmbH (2, 3)
S. 24: Volkswagen AG
S. 26: Society of Petroleum Engineers (1),
Divulgação Petrobras, Wikipedia (2)
S. 27: DHI Wasy GmbH, Köln (1),
MAGMA GmbH, Aachen (2)
S. 31: MEV Verlag GmbH (1)
S. 33: MEV Verlag GmbH (1, 2)
S. 36: Möbelfabrik Peters GmbH, Schlangen (2)
S. 37: myvision IT-management, Vettelschoß-Kalenborn (3)
S. 44: MEV Verlag GmbH
S. 47: Daimler AG (2), BMBF-Projekt VIPROFORM (3)
S. 48: MEV Verlag GmbH
S. 60: Barbara Frommann, Universität Bonn
S. 61: Johann Saba, Universität Bonn

Alle anderen Abbildungen: © Fraunhofer SCAI

