

IT AN DER UNIVERSITÄT ZU KÖLN



Thomas Josek / Josek Design

Thema:
Computational Sciences in Cologne

EDITORIAL

plus...

Computational Economics | Seite 2

Die Coupled Cluster Methode in der Quantenchemie | Seite 3

Die „Evolution berechnen“ | Seite 4

Sie finden unsere IT-Beilage auch als PDF im Internet unter www.ukoeln.de/4RR8E



Computational Sciences in Cologne

Gremien, Einrichtungen und Forschungsaktivitäten

Die numerische Simulation theoretischer Modelle hat sich in den Natur- und Ingenieurwissenschaften in den letzten Jahrzehnten neben Theorie und Experiment einen festen Platz erobert. Man spricht auch von einer dritten Säule. In den letzten Jahren ist mit den durch Beobachtung und Experiment sowie durch Simulationen erhaltenen großen Datenmengen eine vierte Säule entstanden, die oft auch als Big Data bezeichnet wird. Die numerische Simulation und das Wissenschaftliche Rechnen zusammen mit der Behandlung und Analyse großer Datenmengen bilden den Bereich der rechnergestützten Wissenschaften (Computational Sciences).

Viele der numerischen Simulationen als auch die Analysen großer Datenmengen erfordern Hoch- und Höchstleistungsparallelrechner sowie Algorithmen und Software, die diese so einsetzen können, dass ein Maximum an Performance erreicht wird. An der Universität zu Köln wird in verschiedenen Fächern hieran gearbeitet. Dabei geht es zum einen um die grundlegenden Aspekte der Algorithmen- und Softwareentwicklung, zum anderen um die Anwendung von Software und Hochleistungsrechnern zur Lösung fachspezifischer Probleme.

Verschiedene, fächerübergreifende Gremien und Einrichtungen arbeiten in diesem Umfeld zusammen. Insbesondere sind hier der wissenschaftliche Beirat für das Hochleistungsrechnen (HPC-Beirat), das Regionale Rechenzentrum der Universität zu Köln (RRZK) und das Kompetenzfeld III der Exzellenzinitiative – Quantitatives

Modellieren komplexer Systeme – zu nennen.

Der HPC-Beirat hat sich Anfang 2012 konstituiert und ist ein ständiges Arbeitsgremium zur Beratung des Rektorats und des Direktors des RRZK in Fragen des High Performance Computing und der HPC-Rechnerausstattung an der Universität zu Köln. Hierbei geht es zum Beispiel auch um die optimale Nutzung des derzeitigen Kölner Hochleistungsrechners CHEOPS, der allen Kölner Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern als leistungsfähiges HPC-System am RRZK zur Verfügung steht. Das RRZK ist seit 2011 assoziiertes Mitglied in der Gauß-Allianz, einem strategischen Verbund der deutschen Hochleistungsrechenzentren.

Das Kompetenzfeld III – Quantitative Modellierung komplexer Systeme – ist aus den Aktivitäten der Universität zu Köln im Rahmen der Exzellenzinitiative entstanden. Diese hat sich sehr erfolgreich an allen Förderlinien beworben, wobei insbesondere auch das Zukunftskonzept für die gesamte Universität gefördert wird. Dieses Zukunftskonzept sieht eine Reihe von Maßnahmen vor, innerhalb derer auch vier Kernprofilbereiche und fünf Kompetenzfelder aufgebaut beziehungsweise gestärkt werden sollen. Die Kernprofilbereiche sind in ihrer Ausrichtung thematisch stark fokussiert, wohingegen die Kompetenzfelder sehr breit ausgerichtet sind und interdisziplinäre Arbeiten und Projekte über die Fakultäten hinweg bündeln und aufbauen sollen. Das Kompetenzfeld III (auch Competence Area (CA) III genannt)

gilt dem quantitativen Modellieren komplexer Systeme und stellt eine natürliche Brücke zwischen vielen Forschungsbereichen der Universität zu Köln dar. Es schließt über das quantitative Modellieren alle mathematisch-naturwissenschaftlichen Disziplinen, die Wirtschaftswissenschaften aber auch die medizinische Fakultät ein. Dazu gehören zum Beispiel die Klimaforschung, turbulente interstellare Wolken, Fluid-Struktur-Interaktion von Blutfluss und Arterien, Forschung zu Online-Auktionen und Finanzmärkten, Simulation von Höchstleistungsstählen wie auch die Optimierung komplexer technischer

Systeme in der Automobilkonstruktion oder Energieversorgung. Das Kompetenzfeld III ist eng mit dem Kernprofilbereich Quantenmaterie und Quantenmaterial QM2 aus der Exzellenzinitiative verwandt.

■ Axel Klawonn, Sprecher des HPC-Beirats (Lehrstuhl für Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen, Mathematisches Institut) www.ukoeln.de/BC35G

■ Joachim Saur, Sprecher CA III (Institut für Geophysik und Meteorologie) www.ukoeln.de/5L29H

Kurse

IT-Kurse an der Universität zu Köln

Das Regionale Rechenzentrum und die WiSo-IT-Services der Universität zu Köln führen regelmäßig in der vorlesungsfreien Zeit Kurse zu verschiedenen Themen rund um IT und Computer durch. Dazu gehören einführende Veranstaltungen zur PC-Benutzung ebenso wie Fortbildungen im Bereich PC-Sicherheit oder Anwendungsentwicklung.

Darüber hinaus werden regelmäßig auch Themen wie Grafik und Multimedia, Statistik und eLearning behandelt. Einige Veranstaltungen, zum Beispiel zu Office-Anwendungen, können im Rahmen des Studium Integrale angerechnet werden.

Ausführliches Verzeichnis der Kurse des RRZK: www.ukoeln.de/4K5BY



Ausführliches Verzeichnis der Kurse der WiSo-IT-Services www.ukoeln.de/818VA



Liebe Universitäts-Angehörige,

die Forschung an der Universität zu Köln in dem Kompetenzfeld III „Quantitative Modellierung komplexer Systeme“ deckt einen großen Bereich wissenschaftlicher Forschungsthemen und Fachbereiche ab – von der Biologie über die Physik bis hin zu den Wirtschaftswissenschaften und der Meteorologie. Die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler greifen dabei auf computergestützte Simulationen und Analysen zurück, die in ihrer Komplexität nur mit Hilfe von Hoch- und Höchstleistungsrechnern wie dem HPC-Cluster CHEOPS am RRZK durchgeführt werden können.

Um die gemeinsamen Interessen zwischen dem Kompetenzfeld III und den Aktivitäten im Bereich der rechnergestützten Wissenschaften an der Universität zu Köln weiter zu fördern, fand am 25. Oktober 2013 der Computational Sciences Day statt.

Die Tagung bot den Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern aus den unterschiedlichen Fachbereichen ein Forum zum Erfahrung- und Ideenaustausch – und das Publikum bekam einen Eindruck von der Vielseitigkeit der Aktivitäten in den Bereichen des Wissenschaftlichen Hochleistungsrechnens und der numerischen Simulation an der Universität zu Köln.

Eine Auswahl der im Rahmen des Computational Sciences Day dargestellten aktuellen Projekte und Fragestellungen möchten wir Ihnen in dieser Ausgabe der IT-Beilage zur Kölner Universitätszeitung vorstellen.

Viel Spaß beim Lesen wünschen

Julia Belke und Leyla Mirzaee

RUBRIKEN

- Kurse | 1
- Technikfutter | 2
- Newsfeed | 3



Computer Aided Traffic Scheduling

Bei der Gestaltung und dem Betrieb von öffentlichen Nahverkehrssystemen müssen eine Reihe von komplexen Planungsproblemen gelöst und eine Vielzahl von Anforderungen berücksichtigt werden: Das Streckennetz sollte den Bedarf potentieller Passagiere bestmöglich abdecken, der Fahrplan sollte neben auftretenden Nachfragespitzen auch die Anbindung an weitere Verkehrssysteme berücksichtigen, die Einsatzplanung von Fahrzeugen und Personal muss Sicherheitsbestimmungen und tarifrechtlichen Regelungen genügen. Die Komplexität dieser Probleme macht ein manuelles Erstellen von einsatzfähigen Lösungen kaum möglich, insbesondere da neue Pläne nicht einfach im täglichen Betrieb getestet werden können (s. Abb. 1).

Im Rahmen des Projekts *Computer Aided Traffic Scheduling (CATS)* beschäftigt sich der Lehrstuhl von Professor Speckenmeyer deswegen mit der Entwicklung von Methoden und Anwendungen zur Modellierung, Optimierung, Simulation und Visualisierung von städtischen Nahverkehrssystemen. Für die Simulation werden vorwiegend diskrete

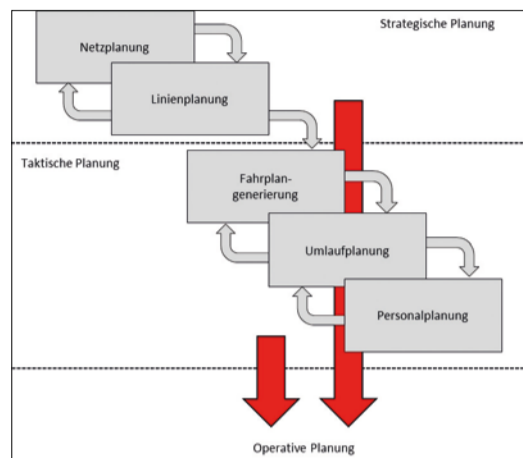


Abbildung 1 Planungsprozess im ÖPNV

Methoden wie ereignisbasierte Simulation, Zellularautomaten und agentenbasierte Simulation verwendet. Zur Optimierung befinden sich sowohl kombinatorische Heuristiken wie genetische Verfahren, Ameisenalgorithmen und künstliche Kristallisation als auch exakte Methoden wie zum Beispiel Lineare Programmierung und „Branch and Bound“ im Einsatz (s. Abb. 2).

Diese Methoden werden verwendet um der Frage nachzugehen wie Stadtbahnfahrpläne zu gestalten

sind, damit sie möglichst unempfindlich gegen kleine, im täglichen Betrieb unvermeidlich auftretende Störungen sind und so ein möglichst reibungsloser Betrieb sichergestellt werden kann. Nach der Generierung solcher robuster Fahrpläne in der Optimierung wird eine diskrete ereignisbasierte Simulation benutzt, um zu testen wie sich unvorhergesehene Störungen (zum Beispiel ein kurzzeitig wegen eines Falschparkerers blockiertes Gleis) auf den Betrieb auswirken. Die bisher durchgeführten Laborexperimente auf Grundlage der Stadtbahnnetze von Köln und Montpellier zeigen, dass die entwickelten Methoden dabei helfen können die Pünktlichkeit in Stadtbahnnetzen zu erhöhen.

Weitere Teilbereiche des CATS-Projekts sind die Modellierung, Optimierung und Simulation von multimodalen Verkehrssystemen und die Entwicklung von Resche-

duling-Verfahren. In multimodalen Verkehrssystemen kommen mehrere Typen von Transportmitteln zum Einsatz, wodurch sich die ohnehin schon hohe Komplexität weiter erhöht. Rescheduling wiederum beschäftigt sich mit Methoden zur schnellen und reibungsarmen Wiederherstellung des Regelbetriebs nach Auftreten einer größeren, langfristigen Störung, beispielsweise durch kurzfristige Änderungen an den (Ab-)Fahrzeiten und/oder der Linienführung von Fahrzeugen.

Weitere Informationen zum CATS-Projekt, insbesondere auch zu möglichen Abschlussarbeiten, erhalten Sie auf der Webseite des Lehrstuhls von Professor Speckenmeyer.

■ Daniel Lückerrath
www.ukoeln.de/3UBU6

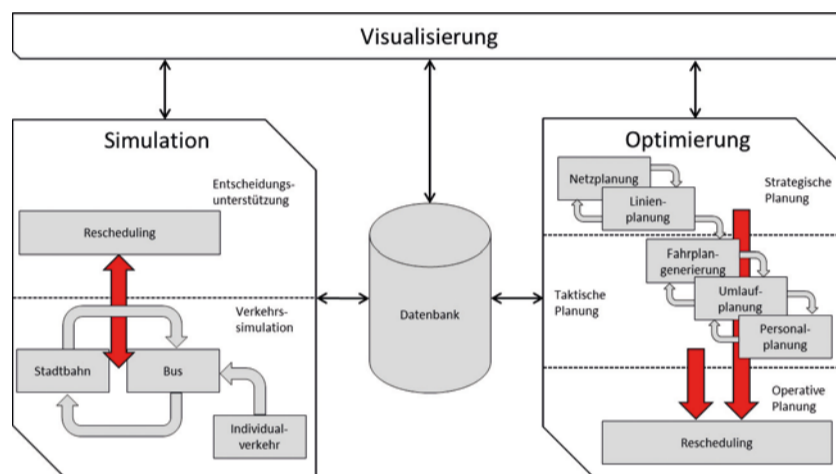


Abbildung 2 Die Komponenten des CATS-Projekts

Technikfutter

SoFS-Nutzung von Android Tablets

Mit SoFS stehen Studierenden und Beschäftigten der Universität zu Köln online und kostenlos 10 GB Speicherplatz zur Verfügung. Der Zugriff ist nicht nur unter Windows und Mac OS X, sondern auch unter Android möglich: Man benötigt dazu aus dem Google Playstore zunächst den „Total Commander“. Darin muss dann noch das Webdav Plugin installiert werden. Dieses dann mit https checken, sofsdav.uni-koeln.de/private/<username> als Pfad, Benutzername und Passwort konfigurieren und fertig! Nun können Dateien auch zwischen Android-Device und SoFS verschoben werden. www.ukoeln.de/JRXJM



Handbücher des Regionalen Rechenzentrums Niedersachsen (RRZN)

Das Regionale Rechenzentrum für Niedersachsen (RRZN) gibt Handbücher zu vielen Themen der IT wie Programmiersprachen, Betriebssysteme und Anwendersoftware heraus. Die Autorinnen und Autoren achten darauf, dass die Dokumentation gut verständlich und nicht allzu technisch ist. Viele Titel der RRZN-Handbuch-Reihe werden am RRZK Helpdesk im Weyertal 121 zum Selbstkostenpreis verkauft. Beachten Sie bitte, dass die RRZN Handbücher nur an Studierende und Beschäftigte der Universität zu Köln, der FH Köln, der Deutschen Sporthochschule sowie der Musikhochschule Köln zu deren eigenem Gebrauch abgegeben werden dürfen. www.ukoeln.de/ZASAF



Computational Economics

Empirische Studien zur Analyse und Evaluation wirtschaftspolitischer Maßnahmen beruhen darauf, dass vergleichbare wirtschaftliche Rahmenbedingungen und ökonomische Schocks schon in der Vergangenheit beobachtbar waren. Die „Große Rezession“ stellte daher die wirtschaftspolitische Beratung vor eine besondere Herausforderung und festigte die Rolle quantitativer makroökonomischer Modelle als komplementäre Methode der wirtschaftspolitischen Analyse und Beratung.

Wirtschaftspolitische Maßnahmen haben in der Regel – ob nun beabsichtigt oder nicht – einen redistributiven Charakter, sei es in Bezug auf pekuniäre Größen wie

Einkommen und Vermögen oder auf nichtpekuniäre Größen wie der Wert an Freizeit. Um Reformvorschläge und ihre unterschiedliche Wirkung auf Haushalte beurteilen zu können, müssen die Modelle daher die relevante Heterogenität in der Bevölkerung, wie beispielsweise die endogene Einkommens- und Vermögensverteilung, abbilden. Allerdings stellen Modelle mit heterogenen Agenten die numerischen Lösungsverfahren vor fundamentale Probleme, die im Folgenden anhand des „workhorse model of quantitative macroeconomics“ verdeutlicht werden.

Betrachten wir einen Haushalt mit spezifischem Vermögen und Arbeitseinkommen, der gegeben des

Marktzinssatzes eine Konsum- und Sparentscheidung trifft. Der Marktzins reflektiert das komplexe Zusammenspiel des gesamtwirtschaftlichen Kapitalangebots morgen, das heißt der Sparentscheidung aller Haushalte heute, und der gesamtwirtschaftlichen Kapitalnachfrage morgen, das heißt der Investitionsentscheidung aller Haushalte morgen. Um den Marktzins zu bestimmen, benötigen die Haushalte demzufolge Wissen über die gesamtwirtschaftliche Vermögensverteilung heute (und damit über das Kapitalangebot morgen) und wie sich hieraus die gesamtwirtschaftliche Vermögensverteilung morgen (und damit die Kapitalnachfrage morgen) entwickelt. Jeder Haus-

halt steht folglich vor einem dynamischen Optimierungsproblem, in dem sowohl die Zustandsvariable als auch deren Bewegungsgleichung ein extrem hochdimensionales Objekt ist und daher hohe Anforderung an die numerischen Lösungsverfahren stellt.

Zwar stehen für dieses kanonische Modell zuverlässige Lösungsverfahren zur Verfügung, die eine Berechnung auf gewöhnlichen Workstations ermöglichen, zur Verfügung, jedoch reichen schon einfache Erweiterungen – beispielsweise Humankapitalakkumulation oder Sucharbeitslosigkeit – die Rechenzeit auf mehrere Tage und Wochen zu erhöhen. Modellerweiterungen, die je nach Fragestellung unab-

dinglich sind, erfordern es daher unter anderem, die gemeinsame Verteilung der Zustandsvariablen und deren Bewegungsgleichung mittels Monte Carlo Methoden auf Hochleistungsrechnern mit starker Parallelisierung zu simulieren. Angesichts dieser Herausforderungen verwundert es nicht, dass die Entwicklung effizienter Lösungsverfahren mittlerweile ein sehr aktives Forschungsgebiet quantitativer Makroökonomien geworden ist und in Zukunft weiter an Bedeutung gewinnen wird.

■ Martin Scheffel
www.ukoeln.de/BJU78



Biologische Netzwerke mit dem Computer entschlüsseln

Moderne Hochdurchsatzverfahren erlauben es uns, molekularbiologische Daten in einem Ausmaß zu erheben, das vor 15 Jahren noch kaum vorstellbar war. Zum Beispiel kann heute die Aktivität aller circa 20.000 menschlichen Gene in einem einzigen Experiment gemessen werden. Auch die Konzentrationen von tausenden Proteinen (Eiweißen) können heute gleichzeitig quantifiziert werden.

In der Regel werden diese Daten in Zeitreihen oder unter verschiedenen Bedingungen gemessen, wodurch sich die Datenmenge nochmals vervielfacht. Eine der fundamentalsten Herausforderungen der modernen Molekularbiologie, Genetik und Molekularmedizin ist daher, diese enormen Datenberge in echte wissenschaftliche Erkenntnisse und nutzbares Wissen zu übersetzen. Offensichtlich ist dies ohne den Einsatz von Computern nicht möglich. Computer spielen dabei in allen Phasen, von der Erhebung der Rohdaten bis hin zur integrierten Analyse heterogener Daten aus unterschiedlichen Studien, eine essentielle Rolle.

Die Abteilung Zelluläre Netzwerke setzt vor allem Methoden aus der Netzwerktheorie ein, um Daten unterschiedlichen Ursprungs

miteinander zu verschneiden und zu integrieren. Die Repräsentation der Zelle als ein Netzwerk aus interagierenden Molekülen oder Genen hat sich als besonders mächtig herausgestellt, da hierdurch vor allem Veränderungen auf der Systemebene, das heißt im Zusammenspiel verschiedener Gene, Proteine, etc., dargestellt werden können. Oft sind es nämlich Veränderun-

gen in den Interaktionen zwischen Proteinen oder anderen Biomolekülen, die für entscheidende zelluläre Veränderungen verantwortlich sind und zum Beispiel Krankheiten verursachen. Ein sehr gutes Beispiel sind Mutationen in Tumoren (wie sie in der Abteilung Translationale Genomik um Roman Thomas untersucht werden), die Regulationsnetzwerke so verändern, dass es

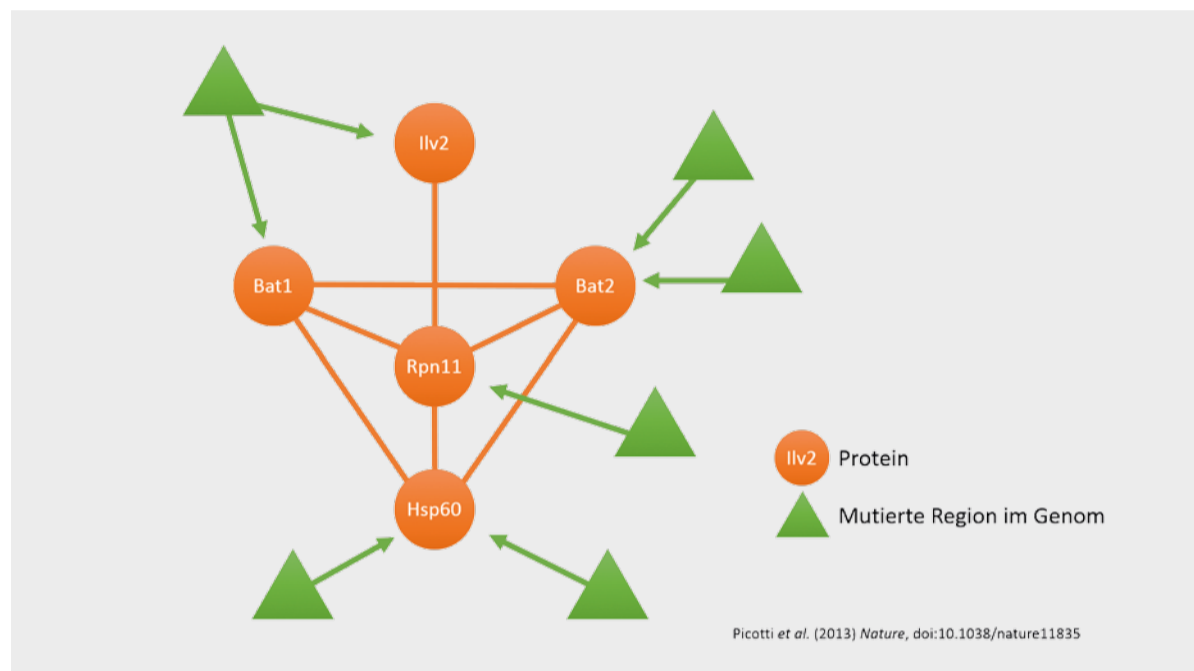
zu unkontrolliertem Zellwachstum kommt.

Die in der Abteilung von Andreas Beyer entwickelten Methoden werden eingesetzt, um die molekularen Mechanismen von Krankheiten, das Zusammenspiel verschiedener zellulärer Prozesse, oder die Auswirkungen evolutionärer Selektion zu erhellen. Zum Beispiel können mit Hilfe der Regulationsnetzwerke

aus der Arbeitsgruppe Beyer die Konsequenzen von Mutationen auf Genaktivitäten quantifiziert werden; was genutzt werden kann, um molekulare Evolution nachzuvollziehen oder, um Mutationen in Tumoren zu simulieren.

Diese Ansätze sind für die Nutzbarmachung der in Köln generierten biologischen Hochdurchsatzdaten unerlässlich. Erst mit ihrer Hilfe lassen sich Erkenntnisse gewinnen, die unser biologisches Verständnis erweitern und zu klinisch relevantem Wissen führen. Dies wiederum gelingt nur durch die enge Vernetzung mit anderen Arbeitsgruppen in der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät, der Medizinischen Fakultät und den Kölner Max Planck Instituten. Dieses Forscher-Netzwerk ist die essentielle Voraussetzung, um biomolekulare Netzwerke entschlüsseln zu können.

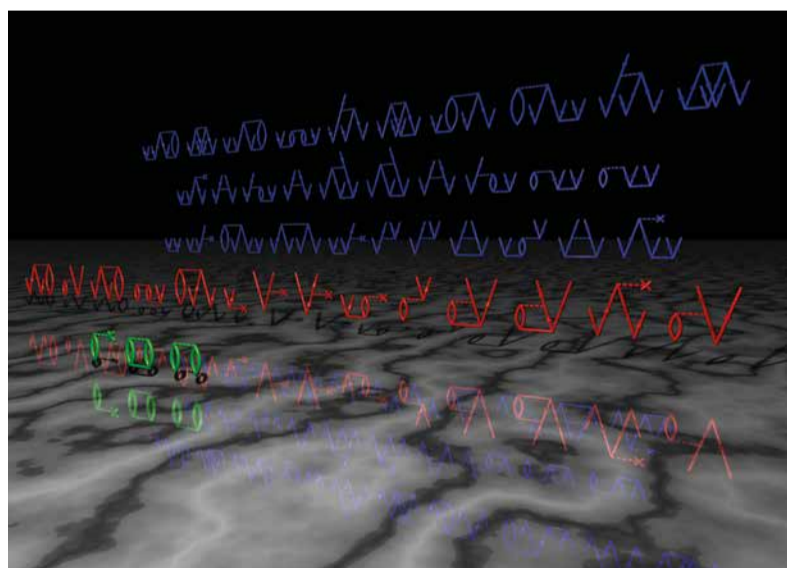
■ Andreas Beyer
www.ukoeln.de/F8559



Durch die Kombination von genetischen Daten, Proteinkonzentrationen und deren Interaktionen lassen sich die Auswirkungen von Mutationen (hier in Hefe) auf Proteinnetzwerke ermitteln.

Die Coupled Cluster Methode in der Quantenchemie

Die (nicht-relativistische) Quantenchemie wird durch die Schrödinger-Gleichung beschrieben. Das in dieser Gleichung auftretende quantenmechanische Vielteilchenproblem gehört zu den anspruchsvollsten mathematisch/numerischen Problemen, da jedes Elektron mit jedem anderen über die Coulomb-Abstoßung wechselwirkt. Obwohl diese Kraft immer nur paarweise auftritt, entsteht durch Verkettungen der Wechselwirkungen ein Problem hoher Komplexität. Es lässt sich zeigen, dass die exakte Lösung dieses Problems eine unendliche Reihenentwicklung erfordert. Dies bedingt die Notwendigkeit zur Einführung von Näherungsverfahren. Ein solches ist die Coupled-Cluster-Methode (CCM).



Antisymmetrisierte Goldstone Diagramme für CCSD, grün: Energiegleichung, rot und blau: Einfach- und Zweifachprojektionen

Die CCM ist ein wellenfunktionsbasiertes ab initio Verfahren, das potenziell (das heißt bei unendlichem Rechenaufwand) exakte Lösungen der Schrödinger-Gleichung liefert. Obwohl diese potenzielle Exaktheit zunächst akademisch erscheinen mag, ist sie von großer theoretischer und praktischer Bedeutung. Sie erlaubt (i) eine Abschätzung der Konvergenz zum exakten Ergebnis und (ii) die Angabe von Fehler-schranken für Näherungsrechnungen.

Darüber hinaus konvergiert die CCM vergleichsweise schnell, da

der ihr zu Grunde liegende Wellenfunktionsansatz im Gegensatz zu anderen Ansätzen (zum Beispiel CI) die richtige Struktur aufweist. Erkauft werden diese positiven Eigenschaften mit den vergleichsweise hohen Kosten der Methode.

Aus diesem Grund müssen die Gleichungen möglichst effizient (i) vereinfacht, (ii) faktorisiert und (iii) durch Matrix-Matrix Multiplikationen implementiert werden. Letzteres ist nicht ohne Umsortierungsschritt (Shuffling) zu erreichen. Dabei ist zu beachten, dass das Shuffling ($\sim O(N^2)$) gegenüber

der Matrix-Matrix Multiplikation ($\sim O(N^3)$) auf Grund von Cache-Misses nicht zu vernachlässigen ist. Die geschickte Implementation des Shufflings und der Faktorisierung ist für die effiziente Implementation ausschlaggebend.

■ Michael Hanrath
www.ukoeln.de/KIZBN

Newsfeed



Neue Räumlichkeiten für das KLIPS-Team

Seit dem 16. Dezember 2013 hat das KLIPS-Team seine neuen Räume im Studierenden-Service-Center, Gebäude 102, Universitätsstraße 22a, 50937 Köln, bezogen. Sie finden uns im ersten Obergeschoss, schräg rechts gegenüber den Fahrstühlen. Eine provisorische Beschilderung ist angebracht. Die Support-Öffnungszeiten von 10:00 – 15:00 Uhr von Montag bis Freitag bleiben bestehen, genau wie die Telefonnummern. Die Büros sind nun auch barrierefrei zugänglich. www.ukoeln.de/BHM3B

Kunst im Regionalen Rechenzentrum

Ein Ausstellungsprojekt des Instituts für Kunst und Kunsttheorie der Humanwissenschaftlichen Fakultät der Universität zu Köln.

LEBEN.unberechenbar – ein glückliches Zusammentreffen: Hier ein kürzlich bezogener Neubau, weiße Wände, leere Vitrinen und dort 20 talentierte junge Kunststudierende, die sich über die Gelegenheit freuen, ihre Prüfungsergebnisse und Abschlussarbeiten einer interessierten Öffentlichkeit vorzustellen. Spannend ist die Interaktion zwischen Resultaten künstlerischer Prozesse, die nie definitiv voraussehen sind, und dem Rechenzentrum als einem Ort, an dem alles auf Berechenbarkeit basiert.

Zu sehen sind ausgewählte Arbeiten, die mehr oder weniger das menschliche Dasein thematisieren: Lebenssituationen, Porträts, Gesten, Heimliches und Unheimliches in den Medien Malerei, Plastik, Grafik, Textil und Fotografie.

Am 30. Januar wurde die Ausstellung **LEBEN.unberechenbar** im RRZK im Weyertal 121 eröffnet. Sie ist bis zum 6. Juni 2014 Mo – Fr von 10 – 16 Uhr zu besichtigen.



Mi. Vissia / Full Moon Rising



Die „Evolution berechnen“

Den evolutionären Zusammenhang alles Lebendigen aufzuklären ist ein zentrales Thema in der Biologie – mindestens seit der Veröffentlichung von Charles Darwins Buch über den Ursprung der Arten im Jahre 1859. Dass Evolutionsbiologie aber nur in Zusammenhang mit Erkenntnissen der Genetik zu verstehen ist, ist eine Einsicht, die über ein halbes Jahrhundert jünger ist und im Rahmen der heute sogenannten „neodarwinschen Synthese“ gewonnen wurde.

Gemeint ist damit die Integration von Mendels Erkenntnissen der Vererbungslehre und Darwins Theorie der natürlichen Selektion. Das zu Beginn des letzten Jahrhunderts neu entstehende Forschungsfeld der Evolutionstheorie war von Beginn an geprägt durch den Impetus, (evolutions-)biologische

Phänomene durch mathematische Modellierung und – nach dem Vorbild der Physik – durch quantitative Analyse experimenteller Daten zu beschreiben und – vor allem – zu erklären.

Dieses Ziel ist auch heute noch die Triebfeder vieler Forschungsprojekte in der theoretischen Evolutionsbiologie. Allerdings haben sich mit der molekularen Revolution der Biologie Mitte des letzten Jahrhunderts die Art und die schiere Masse der zur Verfügung stehenden Daten grundlegend geändert. Evolution kann verstanden werden aufgrund systematischer und zufälliger Änderungen des genetischen, das heißt molekularen Materials, das von Generation zu Generation weitergegeben wird. Offenbar handelt es sich dabei um Weitergabe von „Information“,

und somit liegt eine „informatische“ Interpretation evolutionsbiologischer Prozesse auf der Hand.

Neben der Mathematisierung und der Datenanalyse mit Hilfe statistischer Verfahren gehört deshalb die Anwendung informatischer Methoden heute zum Standard in der Evolutionsbiologie. Tausende von komplett „sequenzierten“ Genomen von Modellorganismen, die von einfachen Bakterien bis zu hoch komplexen Säugetieren den gesamten Baum des Lebens abdecken, können daraufhin untersucht werden, welche molekularen Ursachen den vielen verschiedenen Phänotypen, in Form verschiedener Spezies aber auch in Form individueller Unterschiede, zu Grunde liegen.

Gegenwärtige Kölner Forschungsprojekte beschäftigen sich

etwa mit der Frage, welche „Neuerfindungen“ auf molekularer Ebene mit großen evolutionären Umbrüchen, zum Beispiel der Entstehung der Vielzelligkeit oder der Entstehung bilateral-symmetrischer Körperbaupläne, einhergehen oder diese erst ermöglicht haben.

In anderen Projekten, auf der Suche nach der Ursache von Erbkrankheiten im Menschen, spielt die Identifikation von individuellen Unterschieden in den Genomen von Patienten und Gesunden eine wichtige Rolle. Grundlegende Erkenntnisse über die Regulation und Expression von Genen wurden mit Hilfe bioinformatischer Methoden und durch den Vergleich molekularer Daten aus nah verwandten Arten gewonnen. Höchst spannend ist zur Zeit die Frage, inwieweit evolutionsbiologische Prinzipien

zu Rate gezogen werden können, um nicht nur in die Vergangenheit, sondern auch in die Zukunft des Lebens sehen zu können. Erfolge gibt es hier bereits bei der Vorhersage von virulenten, das heißt evolutionär besonders erfolgreichen, Stämmen von Influenzaviren, des Grippeerregers. Um solche Untersuchungen vielleicht eines Tages auch auf Bakterien, oder gar auf höhere Lebewesen ausweiten zu können, bedarf es, vergleichbar mit den Modellen der Klimatologie, immenser Rechenleistungen.

■ Thomas Wiehe
www.ukoeln.de/FPZH7

HPC-Simulationen in der Numerischen Mathematik – Anwendungen in Medizin und Materialwissenschaften

Algorithmen für parallele Höchstleistungsrechner sind ein zentrales Forschungsgebiet am Lehrstuhl für Numerische Mathematik und Wissenschaftliches Rechnen (Prof. A. Klawonn) des Mathematischen Instituts. Diese werden für verschiedene Anwendungsprobleme aus der Medizin und den Ingenieurwissenschaften entwickelt.

Erkrankungen des Herz-Kreislaufsystems sind schon seit Jahren die Todesursache Nummer Eins in Deutschland. Atherosklerose und die Entstehung von Plaque in Arterien sind dabei wichtige Aspekte. Insbesondere kann eine mögliche Plaqueruptur zu einem thrombotischen Gefäßverschluss, Herzinfarkt oder Schlaganfall führen. Die Vorhersage der Arterienwandspannung, insbesondere im Plaquebereich, ist daher von besonderem Interesse.

Dabei spielt zum einen die Modellierung des mechanischen Materialverhaltens der atherosklerotischen Arterienwand und zum

anderen die effiziente Lösung der zugehörigen nichtlinearen anisotropen und fast inkompressiblen Elastizitätsprobleme auf parallelen Hochleistungsrechnern eine wichtige Rolle. Derzeit stehen effiziente parallele Algorithmen zur Berechnung der Fluid-Struktur-Interaktion der Blutströmung mit der Arterienwand im Forschungsmittelpunkt. Diesen Problemen widmen sich in einem gemeinsamen Forschungsprojekt Arbeitsgruppen aus der Numerischen Mathematik und dem Wissenschaftlichen Rechnen (A. Klawonn, Universität zu Köln, O. Rheinbach, TU Bergakademie Freiberg, A. Quarteroni, S. Deparis, École Polytechnique Fédérale de Lausanne), der Mechanik (J. Schröder, D. Balzani, Universität Duisburg-Essen) und der Medizin (R. Erbel, Westdeutsches Herzzentrum, Universitätsklinik Essen). Diese Aktivitäten werden derzeit von der DFG und dem Schweizerischen Nationalfonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (SNF) gemeinsam gefördert.

Ein weiteres Anwendungsgebiet kommt aus den Materialwissenschaften. Im Automobilbau spielt die Reduktion der CO²-Emissionen und damit verbunden des Treibstoffverbrauchs eines Fahrzeugs eine immer wichtigere Rolle. Um dies zu erreichen, sollen die Fahrzeuge ein möglichst geringes Gewicht haben. Gleichzeitig darf aber die Crash-Sicherheit nicht darunter leiden. Moderne Hochleistungsstähle sind ein mögliches Material, um diese Ziele zu erreichen. Diese haben eine höhere Festigkeit und eine bessere Duktilität bei einem gleichzeitig geringeren Gewicht gegenüber herkömmlichen Stählen. Sie erreichen diese Eigenschaften durch das Zusammenspiel einzelner Komponenten auf der Mikroskala. Um das Verhalten solcher Hochleistungsstähle bei Umformprozessen auf mehreren Skalen in 3D zu simulieren, sind leistungsstarke Parallelrechner unabdingbar. Ohne geeignete numerische Algorithmen und deren Umsetzung in Software sind die benötigten Simulationen

auf den modernen „Super-Computern“ allerdings nicht möglich. Im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms 1648 (Software for Exascale Computing) arbeitet das Konsortium EXASTEEL bestehend aus Arbeitsgruppen der Numerischen Mathematik und dem Wissenschaftlichen Rechnen (A. Klawonn, Universität zu Köln; O. Rheinbach, TU Bergakademie Freiberg), der Mechanik (J. Schröder, D. Balzani; Universität Duisburg-Essen) und der Informatik (G. Wellein, Universität Erlangen-Nürnberg) gemeinsam und interdisziplinär an der Lösung dieser Aufgabe. Hierbei soll ein direkter Multiskalenansatz (FE²) in Kombination mit neuen parallelen Lösungsverfahren (Gebietszerlegung, Mehrgitter) verwendet und weiter entwickelt werden. Zentraler Punkt ist dabei auch ein hardwareorientiertes Co-Design der Algorithmen und ein Performance-Engineering-Ansatz, der eine systematische Optimierung und Parallelisierung über alle Softwareebenen unterstützen soll.

Die Algorithmen werden bereits auf verschiedenen Parallelrechnern mit mehreren zehntausend Kernen erfolgreich getestet, darunter sowohl CHEOPS (Köln) als auch Rechner wie SuperMUC (München) und MIRA (Argonne, USA), die derzeit beide in der Liste der 500 weltweit schnellsten Supercomputer unter den ersten zehn zu finden sind.

■ Axel Klawonn
www.ukoeln.de/TRZ21

Impressum

Herausgeber:
Der Rektor der Universität zu Köln

Redaktion:
Regionales Rechenzentrum
Prof. Dr. Ulrich Lang (Leitung)
Julia Belke
Leyla Mirzaee

Anschrift:
Weyertal 121 · 50931 Köln
Telefon: 0221 470-89612

E-Mail: rrzk-pr@uni-koeln.de
Auflage: 13.000 Exemplare

Gestaltungskonzept:
Dipl. Des. Rona Duwe
zefo | Zentrum für Forschungskommunikation | www.zefo.de

Satz und Layout dieser Ausgabe:
mehrwert intermediale
kommunikation GmbH
www.mehrwert.de

Anzeigenverwaltung / Druck:
Köllen Druck + Verlag GmbH
Ernst-Robert-Curtius-Straße 14
53117 Bonn-Buschdorf