



# **RWTH THEMEN**

**Forschungsmagazin**

**Ausgabe SS / 2017**

Profilbereich  
„Computational Science & Engineering“



Blick in die Messstrecke des Unterschall-Windkanals des Aerodynamischen Instituts.  
Foto: Peter Winandy

# Inhalt

- 6 **The Future of Scientific Computing**  
The Profile Area “Computational Science & Engineering”
- 8 **Die Zukunft des wissenschaftlichen Rechnens**  
Der Profildbereich „Computational Science & Engineering“
- 10 **Entwicklung lebendiger Herzklappen**  
Was kann ein mechanisches Modell beitragen?
- 14 **Die Mathematik der Strahlentherapieplanung**  
Mit Modellierung und Simulation zu einer besseren Krebstherapie
- 20 **Strömende Bits und Bytes**  
Zusammenspiel von Höchstleistungsrechnern und Medizin
- 30 **Vom Molekül bis zum Patienten**  
„Big Data“ hilft bei der Vorhersage der Entwicklung chronischer Erkrankungen
- 34 **Wie gut kennen wir die Welt unter unseren Füßen?**  
Geowissenschaftliche Modellierungen und Simulationen sowie die statistische Analyse von Unsicherheiten
- 40 **Faszination Kryosphäre**  
Simulationsmodelle für die Erforschung von Eiswelten
- 50 **Grenzen überwinden**  
Numerische Methoden an Grenzflächen
- 54 **Den Atomen auf der Spur**  
Verbesserung der Bildinformation in der Elektronenmikroskopie mit Hilfe mathematischer Methoden
- 60 **Simulationen in Echtzeit**  
Von der Optimierung bis zur Datenassimilation
- 64 **Molekulardynamik-Simulationen beschleunigen**  
Effizientere Simulationsprogramme für heutige und zukünftige Supercomputer
- 68 **Optimierte Multiphysik-Simulationen auf Höchstleistungsrechnern**  
Hochgenaue Berechnungen von Flugzeugtriebwerken zur Lärmreduktion
- 76 **Zum 3D-Modell und zurück**  
Algorithmen zur Erzeugung von hochwertigen 3D-Darstellungen
- 82 **Namen & Nachrichten**
- 86 **Impressum**



3D-Laserscanner des Visual Computing Instituts im Einsatz.  
Foto: Peter Winandy

# Vorwort



Ziel der 2005 beschlossenen Exzellenzinitiative von Bund und Ländern ist es, die universitäre Spitzenforschung in Deutschland zu fördern und die internationale Reputation der ausgezeichneten Hochschulen zu stärken. Die RWTH Aachen University hat sich mithilfe der Exzellenzinitiative in den vergangenen Jahren als integrierte interdisziplinäre technische Hochschule etabliert: Zur Realisierung entsprechender Forschungsansätze wurden acht Profildbereiche gegründet. Hier arbeiten Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus verschiedenen Disziplinen gemeinsam an Lösungen für die großen gesellschaftlichen Herausforderungen unserer Zeit. Die aktuelle Ausgabe des Forschungsmagazins „RWTH THEMEN“ gibt einen Einblick in das Spektrum der Forschungsleistung des Profildbereichs „Computational Science & Engineering“.

Ich persönlich bin davon überzeugt, dass die in diesem Profildbereich koordinierten Forschungsvorhaben einen wesentlichen Beitrag liefern, wie wir im Zeitalter der Digitalisierung zu neuen Methoden der Forschung kommen und wie wir diese Methoden auf vielfältige Forschungsfragen anwenden können. Diese Ausgabe des RWTH-Magazins möge als Nachweis dienen, dass die Koordinierung von Forschungsaktivitäten zu einer neuen Qualität von Forschungsleistung führt. Und dass in Universitäten, wo die Freiheit des Forschens ein besonders hohes Gut ist, ein Zusammenwirken möglich und fruchtbar ist. Ich hoffe, geehrte Leserinnen und Leser, Sie teilen meinen Eindruck. Dann wäre schon dies ein Beweis für die große Wirkungskraft, welche die Exzellenzinitiative in unserer Universität entfaltet hat.

Ich wünsche Ihnen eine aufschlussreiche Lektüre

Prof. Ernst Schmachtenberg  
Rektor der RWTH Aachen

The Excellence Initiative of the federal and state governments, launched in 2005, seeks to promote top-level university research in Germany and to enhance the international reputation of the winning universities. Over the last years, with the help of the Excellence Initiative, RWTH Aachen University has succeeded in establishing itself as an integrated, interdisciplinary university of technology: in order to develop relevant new research approaches, the University has established eight profile areas. In these key research areas, scientists and scholars from different disciplines collaborate to develop solutions to the great societal challenges of our time. The current issue of the “RWTH THEMEN” science magazine provides insights into the broad range of research activities of the “Computational Science & Engineering” profile area.

I am convinced that the research projects undertaken within this profile area contribute to the development of new methodologies in the age of digitalization, and that these will be applied to manifold research questions. This issue of the RWTH magazine shall serve as evidence that the programmatic coordination of research activities results in a new quality of achievement in research. Moreover, it demonstrates that it is possible for universities, where freedom of research is one of the highest principles, to collaborate fruitfully and successfully. Dear readers, I hope that you will share this impression. This would indeed serve as evidence of the positive impact that the Excellence Initiative has had on our University.

I wish you an insightful read!

Prof. Ernst Schmachtenberg  
Rector of RWTH Aachen University

# The Future of Scientific Computing

## The Profile Area “Computational Science & Engineering”

The application of efficient simulation methods using highly developed computer structures is of vital importance now and in the future to address big social and technical challenges. Germany’s future competitiveness and innovation capability critically depend on them. The improvement of the quality of life as well as the attractiveness of Germany as a location for business is largely determined by research and innovation and their implementation in high-tech products. Germany is in a world leading position in this area, with an increase in employment by more than 30 % between 2005 and 2015. German industry invested significantly less in research and development during the economic crisis 2008/9. The expenditures were increased by 6.4 % annually from 2010 to 2013. The expenses for research and development, in relation to the added value, were 22.6 % in the research intensive industry in 2013 and increased considerably by 2.6 % per year since 2010. The auto and pharmaceutical industries are the market leaders, and the electrical and chemical industries and mechanical engineering are further branches with high research and development intensity.

In its 2020 High-Tech Strategy, the federal government identified five research areas for which the framework conditions for innovation must be improved: climate/energy, health/food, mobility, safety, and communication. – Modern simulation techniques can be used to conduct research on methodology and to develop and design new processes, services, and products. These include highly

developed solution and imaging methods, modeling approaches, and high performance computing (HPC). Considering the research fields identified by the federal government, the profile area “Computational Science & Engineering” (CompSE) combines the competencies of RWTH Aachen University and Forschungszentrum Jülich (FZJ) at the interface between the engineering sciences, natural sciences, mathematics, computational science, and medicine.

### Topics

The approach of the profile area is based on the definition of subject areas that significantly extend the present cooperation between computational science, computational engineering, and computational medicine. The analysis of the scientific state of the art has led to the structure of the profile area presented in Fig. 1 and to the identification of four topics – data, modeling, computing, methods – which are closely linked to this structure. The structure highlights the software orientation of the profile area.

### Data

In Computational Science, data is usually defined as the digital representation of information. The structure of the data range from simple strings or numerical series to high-dimensional, unstructured, or complex concatenated data sets. In simulation, data primarily are the result of a computation. Those data must be analyzed and post-processed to convey their information to the user. However, data, i.e., measured data in

general, can determine the initial state in a simulation, for instance in inverse problems in which a model is reconstructed from measured data. Generally, the amount of data within the scope of discretely described problems increases the accuracy of the results. On the other hand, the increase of the amount of the data requires new approaches regarding postprocessing to finally get meaningful physical findings. Hence, there is an urgent need for new, highly efficient approaches to extract a-priori unknown structures and finally relevant information from the vast amount of data and to prepare them for the user.

### Modeling

Modeling consists of the abstract description of a static or dynamic system. Usually, models are expressed by mathematical descriptions. Data driven modeling has become of interest over the last years. Models are used to analyze or to predict natural or imaginary processes and are supposed to describe the essential parameters of natural phenomena and their functional relations. The formal description makes the underlying system accessible for computations. Basically one can distinguish between the modeling of the geometry, the material properties, and the phenomenon to be simulated. A simulation of large-scale problems which is efficient in terms of computing time and generated data requires highly specialized physically based modeling techniques that can be adapted flexibly to the requirements of the respective application. By the intelligent reduction of the



The Visual Computing Institute (VCI) contributes to Scientific Computing through the development of advanced methods for the generation and visualization of 3D models. From left to right Prof. Dr. David Bommes, Prof. Dr. Leif Kobbelt, Prof. Dr. Torsten Kuhlén, Prof. Dr. Bastian Leibe and Prof. Dr. Jan Bender.  
Foto: Peter Winandy

complexity of a model or the multidisciplinary coupling of several models the duration, the costs, and hence the feasibility of a computation can be crucially affected and the high quality of the results can be ensured.

### Computing

The processing of data on the computer can be symbolical or numerical. Both concepts are based on fundamentally different methodical approaches, even though symbolical (pre-) computations are used in some cases to guarantee an accelerated numerical computation. The term computing is generally related to numerical computations or to pre- and postprocessing approaches such as mesh generation or visualization methods. Besides advanced solution methods, computing, i.e., the efficient numerical implementation using software and hardware, is of central importance to future research efforts in the other topics mentioned in this section, such as data and modeling. High Performance Computing (HPC), which makes it possible to address large-scale problems in numerous scientific and socially relevant areas by connecting intelligent computer architecture and numerics, is only one, but a very demanding, component in the field of scientific computing.

### Methods

The term methods refers to a systematic procedure or a mathematically based approach leading to useful solutions for a large number of problems or a formalized approach that turned out to be appropriate and successful. There are universal concepts in the area of numerical simulations that can be applied to a variety of problems such as finite-element or finite-volume methods, iterative solvers for sparse matrices, and methods to couple scale-based phenomena. These approaches differ from those which have been defined in topics like data, modeling, and computing, that are associated with physical theories in terms of more fundamental research. They are primarily used as a universal mathematical tool in numerical simulations.

In the following chapters, the abstract terms of the aforementioned topics defining the profile area are applied to different problems of various scientific fields. The detailed discussion of the results will help to understand the general terminology given above. Medical questions such as the design of heart valves, the development of mathematical methods in radiotherapy planning, the analysis of the flow in the human upper airways, or the

modeling of the course of chronic diseases are presented. In further studies, geological modeling, the numerical simulation of geothermal systems as well as a holistic robotic melting simulation model are considered. Following the description of interfaces using differential geometry, mathematical models in image processing and the reduction of complex models, optimized methods for modern supercomputers for the simulation of molecular dynamics and the noise reduction in jet engines are presented.

---

### Author

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Schröder is Head of Institute of Aerodynamics and Chair of Fluid Mechanics Chair of Profile Area Computational Science and Engineering.

---

# Die Zukunft des wissenschaftlichen Rechnens

## Der Profildbereich „Computational Science & Engineering“

Bei der Auseinandersetzung mit großen gesellschaftlichen und technischen Herausforderungen, von deren erfolgreicher Bearbeitung die Wettbewerbs- und Innovationsfähigkeit Deutschlands abhängt, ist bereits heute und in Zukunft der Einsatz effizienter Simulationsverfahren unter Verwendung hochentwickelter Rechnerstrukturen von entscheidender Bedeutung. Die Verbesserung der Lebensqualität sowie der Chancen für den Wirtschaftsstandort Deutschland werden maßgeblich durch die Forschung und Innovation und deren Umsetzung in Hightech-Produkte bestimmt. In diesem Bereich, in dem die Zahl der Beschäftigten zwischen 2005 und 2015 um mehr als 30 Prozent gestiegen ist, liegt Deutschland auf einem der vorderen Plätze in der Welt. Während der Wirtschaftskrise 2008/2009 haben die Unternehmen der deutschen Industrie erheblich weniger in Forschung und Entwicklung investiert. Die Ausgaben sind in den Jahren 2010 bis 2013 wieder gestiegen, im Jahresdurchschnitt um etwa 6,4 Prozent. Die Aufwendungen für Forschung und Entwicklung bezogen auf die Wertschöpfung betragen 2013 in den forschungsintensiven Branchen 22,6 Prozent und haben seit 2010 deutlich um 2,6 Prozentpunkte zugenommen. Die Spitzenplätze bekleiden der Fahrzeugbau und die Pharmazie. Weitere Branchen mit hoher Intensität bei Forschung und Entwicklung sind Elektroindustrie, Chemie und Maschinenbau. Fünf Forschungsfelder, für die eine Verbesserung der Rahmenbedingungen für Innovationen vorgesehen ist, wurden im Zuge der Hightech Strategie 2020 seitens der Bundesregierung identifiziert: Klima/Energie,

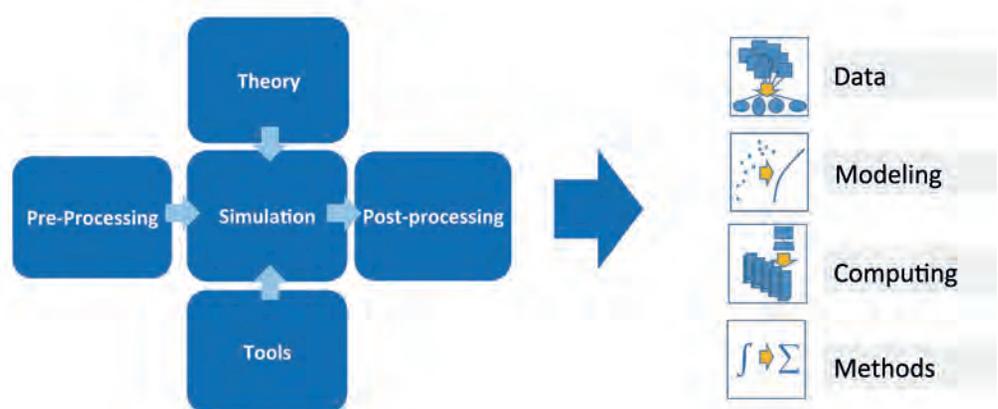


Bild 1: Fachliche Struktur des Profildereiches „Computational Science & Engineering“, kurz CompSE.

Gesundheit/Ernährung, Mobilität, Sicherheit und Kommunikation. Moderne Simulationstechniken können zur grundlegenden Erforschung von Methoden, zur Entwicklung und zum Design neuer Verfahren, Dienstleistungen und Produkte verwendet werden. Dazu gehören neben hochentwickelten Lösungs- und Bildgebungsverfahren Modellansätze und das Hochleistungsrechnen beziehungsweise High Performance Computing (HPC). Mit Blick auf die von der Bundesregierung identifizierten Forschungsfelder bündelt der Profildbereich „Computational Science & Engineering“ (CompSE) die Kompetenzen der RWTH Aachen und des Forschungszentrums Jülich an der Schnittstelle zwischen den Ingenieurwissenschaften, den Naturwissenschaften, der Mathematik, der Informatik und der Medizin. Der Ansatz des Profildereiches basiert auf der Definition von Themengebieten, die die

bisherige Kooperation bezüglich Computational Science, Computational Engineering und Computational Medicine deutlich erweitert. Die Analyse des wissenschaftlichen Status quo hat einerseits zur Struktur des Profildereiches geführt, andererseits wurden die vier Themengebiete – Data, Modeling, Computing, Methods – herausgearbeitet, die in enger Verbindung mit der Struktur stehen. Sie betonen die Softwareausrichtung des Profildereiches.

### Data

In der Informatik versteht man unter Data beziehungsweise Daten in der Regel die digitale Repräsentation von Information. Die Struktur von Daten reicht von einfachen Zeichenketten oder Zahlenreihen bis zu hochdimensionalen, unstrukturierten oder komplex verknüpften Datensätzen. Im Zusammenhang mit der Simulation entstehen Daten in erster Linie als

Resultat einer Berechnung. Diese Daten müssen aufbereitet, analysiert und interaktiv dargestellt werden, um dem Benutzer die in ihnen enthaltene Information zu vermitteln. Umgekehrt können auch Daten, das heißt im Allgemeinen Messdaten, die Anfangsverteilung einer Simulation bestimmen, beispielsweise bei inversen Problemen, bei denen ein Modell aus Messergebnissen rekonstruiert wird. Im Allgemeinen erhöht die Menge der Daten im Rahmen von diskret beschriebenen Problemstellungen die Genauigkeit der Ergebnisse. Auf der anderen Seite erfordert die Steigerung der Datenmenge neue Ansätze hinsichtlich der Bearbeitung, um schlussendlich aussagekräftige physikalische Erkenntnisse zu gewinnen. Es besteht also ein dringender Bedarf an neuen hocheffizienten Ansätzen, mit denen die a priori unbekannt Strukturen und letztendlich auch die relevanten Informationen aus den riesigen Datenmengen extrahiert und für den Nutzer aufbereitet werden können.

### **Modeling**

Modellierung besteht in der abstrakten Beschreibung eines statischen oder dynamischen Systems. Modelle werden in der Regel durch mathematische Beziehungen formuliert, wobei in den letzten Jahren auch die datengetriebene Modellierung immer stärker in den Vordergrund tritt. Modelle werden zur Analyse oder zur Vorhersage eines natürlichen oder imaginären Vorgangs verwendet und sollen die wesentlichen Parameter eines natürlichen Phänomens und deren funktionale Zusammenhänge abbilden. Die formale Beschreibung macht das zugrunde liegende System für Berechnungen zugänglich. Grundsätzlich unterscheidet man die Modellierung der Geometrie, der Materialeigenschaften und des zu simulierenden Phänomens. Die effiziente Simulation hinsichtlich Rechenzeit und erzeugter Datenmengen großskaliger Problemstellungen erfordert im höchsten Maße spezialisierte, auf physikalische Theorien basierte Modellierungstechniken, die sich flexibel den Anforderungen der jeweiligen Anwendung anpassen lassen. Durch die intelligente Reduktion der Kom-

plexität eines Modells oder die multidisziplinäre Kopplung verschiedener Modelle können die Dauer, die Kosten und damit letztendlich die Realisierbarkeit einer Berechnung entscheidend beeinflusst werden. Gleichzeitig gewährleisten die erzielten Resultate eine hohe Qualität.

### **Computing**

Die Verarbeitung von Daten mit dem Computer kann symbolisch oder numerisch erfolgen. Beide Konzepte basieren auf grundverschiedenen methodischen Ansätzen, obwohl in manchen Fällen symbolische (Vor-)Berechnungen eingesetzt werden, um nachfolgende numerische Berechnungen zu beschleunigen. Der Begriff Computing bezieht sich allgemein auf numerische Berechnungen beziehungsweise innerhalb dieses Themengebiets im weiteren Sinne auf die damit verbundenen Pre- und Post-Processing-Ansätze wie Gittergenerierungs- oder Visualisierungsmethoden. Neben hochentwickelten Lösungsverfahren ist das Computing – also die effiziente numerische Umsetzung seitens der dazu benötigten Software und Hardware – für die Bearbeitung der anderen in diesem Kapitel aufgeführten Themengebiete wie Data oder Modeling in zukünftigen Forschungsanstrengungen von zentraler Bedeutung. Das High Performance Computing (HPC), das durch die Verbindung intelligenter Rechnerarchitektur und Numerik in der Lage ist, großskalige Problemstellungen aus einer Vielzahl von wissenschaftlichen und gesellschaftlich relevanten Bereichen anzugehen, stellt im wissenschaftlichen Umfeld des Computing lediglich eine Facette auf einem sehr anspruchsvollen Niveau dar.

### **Methods**

Der Begriff Methods beziehungsweise Methoden beinhaltet eine systematische zielgerichtete Vorgehensweise oder ein mathematisch basiertes Verfahren, das für eine Vielzahl von Problemen zu einer sinnvollen Lösung führt. Ebenso können formalisierte Abläufe, die sich als zweckmäßig und erfolgreich erwiesen haben, gemeint sein. Im Bereich der numerischen Simulation gibt es

universelle Konzepte, die für viele Problemklassen eingesetzt werden können, zum Beispiel finite Elemente oder finite Volumen, Diskretisierungsmethoden, iterative Löser für große dünnbesetzte Matrizen, Verfahren zur Kopplung von skalenbasierten Phänomenen. Diese Ansätze unterscheiden sich von denen, die in den mit physikalischen Theorien assoziierten Themengebieten Data, Computing und Modeling definiert wurden, hinsichtlich des mehr grundlagenorientierten Charakters. Sie fungieren primär als universelles, mathematisches Werkzeug, also als Lösungstool, in numerischen Simulationsumgebungen.

Die abstrakten Begriffe der Themengebiete, die den Profildbereich definieren, finden Anwendung in für viele Menschen relevanten Bereichen, zum Beispiel in der Medizin: der Entwurf von Herzklappen, die Entwicklung mathematischer Methoden bei der Planung von Strahlentherapien, die Analyse der Durchströmung der menschlichen Atemwege oder die Modellierung des Verlaufs chronischer Erkrankungen. Hier werden Ansätze aus einzelnen Themengebieten vereint verwendet und die ergebnisorientierte Analyse steht im Vordergrund. In weiteren Artikeln werden die geologische Modellierung, die numerische Simulation geothermischer Systeme sowie Methoden zur Simulation von Schmelzrobotern im Eis betrachtet. Neben der Darstellung von Grenzflächen mit Hilfe der Differenzialgeometrie, Optimierung von 3D-Darstellungen, mathematischer Methoden in der Bildverarbeitung und bei der Reduktion von komplexen Modellen werden optimierte Methoden für moderne Supercomputer zur Simulation der Dynamik von Molekülen und der Lärmreduktion in Flugzeugtriebwerken präsentiert.

---

### **Autor**

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Schröder ist Leiter des Aerodynamischen Instituts und Sprecher des Profildereichs „Computational Science & Engineering“.

---

# Entwicklung lebendiger Herzklappen

## Was kann ein mechanisches Modell beitragen?

Valvular heart disease is a steadily increasing socioeconomic burden worldwide. The proportion of valvular surgeries has increased over the past decades and these procedures now account for more than 20 % of all cardiac surgeries with the number of replacement per year expected to triple by 2050. Tissue engineering heart valves (TEHV) might overcome the well-known complications of contemporary devices implanted in paediatric and elderly patients, such as the need for a life-long anticoagulation therapy in the case of mechanical prostheses, the degeneration and therefore limited durability of the biological heart valves and the limited availability of homografts. Also, TEHV can be implanted using percutaneous approaches, making it accessible to high risk patients. But, to achieve this it is important to understand and improve the structural integrity of reinforcing scaffolds and its effect on tissue growth, hence the simulation-based approach being developed in this work. The ultimate goal is to provide the patient with an implant produced with and by the patient's own cells that is capable of remodeling and self-repair, achieves physiological hemocompatibility, and is biologically and mechanically equivalent to the native tissue.

Funktionsstörungen von Herzklappen nehmen mit steigendem Lebensalter erheblich zu. In der Altersgruppe der 65- bis 74-Jährigen sind fast zehn Prozent aller Menschen hiermit konfrontiert. Typische Probleme sind unerwünschte Veränderungen im biologischen Material der Herzklappensegel, woraus sich fehlerhafte Öffnungs- und Schließmechanismen ergeben. In besonders schweren Fällen kann es notwendig werden, die Herzklappe zu ersetzen. Bereits heute liegt der Anteil von Operationen im Herzklappenbereich bei etwa 20 Prozent aller kardiologischen Eingriffe. Es wird erwartet, dass sich dieser Anteil bis 2050 verdreifacht.

Die heute verwendeten mechanischen Herzklappen bedürfen einer lebenslangen „Blutverdünnung“, während die so genannten Biologischen Herzklappen – mit Gewebe vom Schwein oder Rind – zu einer Degeneration mit Verkalkung neigen. Eine neue „biohybride“ Variante wurde in der NRW-Schwerpunktprofessur Biohybrid & Medical Textiles (BioTex) entwickelt. Aus patienteneigenen Zellen werden hierbei vitale, so genannte tissue-engineerte Implantate gezüchtet. Ohne weitere Verstärkung besitzen diese jedoch nicht die notwendige mechanische Steifigkeit. Um letz-

tere zu erzeugen, werden textile oder andere „Bewehrungen“ eingesetzt. Die sich so ergebende Struktur wird in einem Bioreaktor „trainiert“, damit sich die von den Zellen synthetisierte biologische Matrix entsprechend der späteren Beanspruchung ausrichten kann. Das gewünschte Resultat ist eine patienteneigene Herzklappe mit funktionierenden Öffnungs- und Schließmechanismen, die die pro Minute stattfindenden 60 bis 100 Lastwechsel über viele Jahre hinweg aushalten kann.

### Mechanische Modellierung

Was kann eine mechanische Modellierung dazu beitragen? Die erfolgreiche Züchtung und Konditionierung einer solchen tissue-engineerten Herzklappe hängt von komplexen Zusammenhängen ab, die ohne Unterstützung des Computers kaum zu überschauen sind. Beispiele für konkrete Fragestellungen sind die folgenden: Welche Materialien eignen sich als Bewehrungsmaterial, und wie sollte die Bewehrung geometrisch ausgestaltet werden? Wie interagiert die Bewehrung mit dem sich stetig verändernden biologischen Material? Welche Stimuli können verwendet werden, um das biologische Gewebe sich

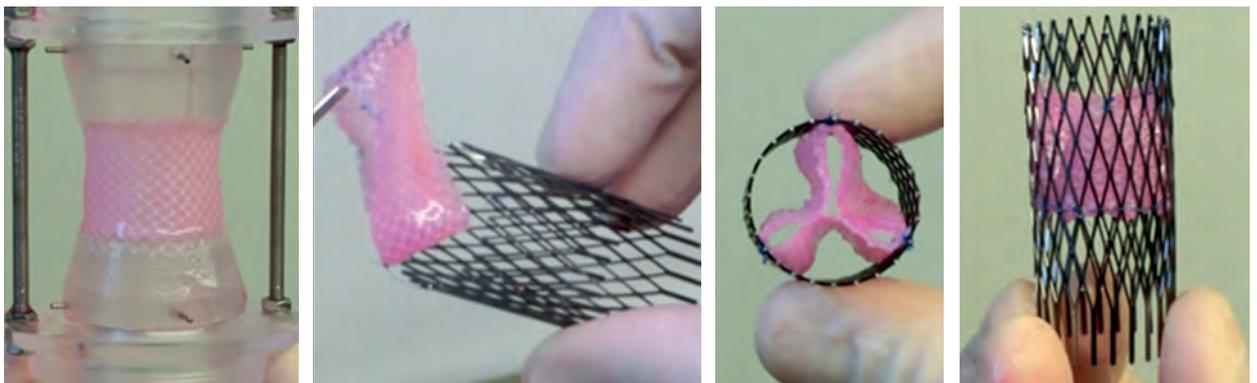


Bild 1: Einbau des tissue-engineerten Materials in einen Nitinolstent.

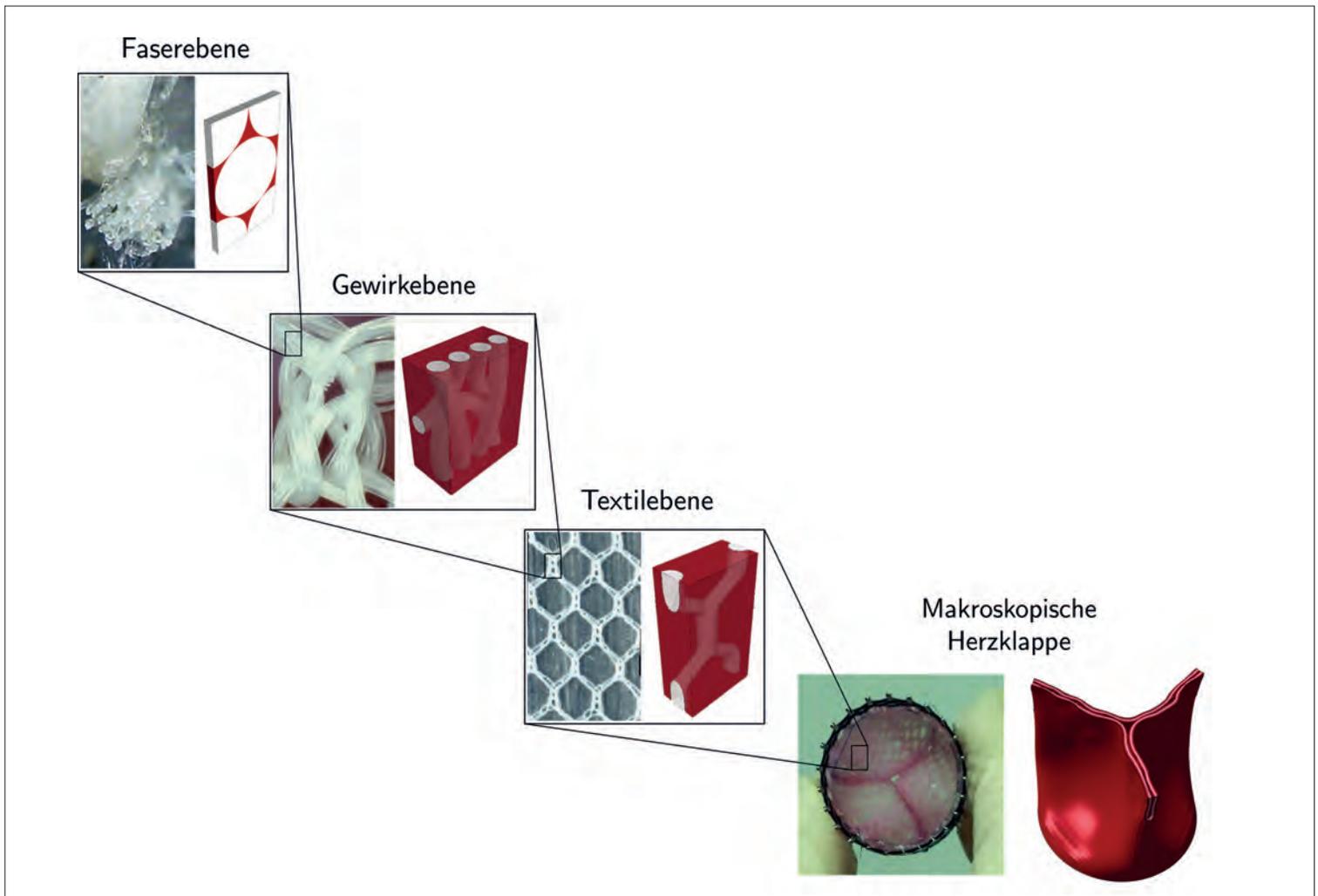


Bild 2: Vier Modellierungsebenen für die computerbasierte Berechnung der Herzklappe.

Quelle: Sodhani, D., Reese, S., Moreira, R. et al. *Meccanica* (2017) 52: 677. doi:10.1007/s11012-016-0479-y

in der gewünschten Weise ausrichten zu lassen? Wie beeinflussen Wachstums- und Degradationsprozesse die mechanischen Eigenschaften des Materials? Wie ist der Konditionierungsprozess zu gestalten, damit sich das bewehrte Material optimal entwickelt? Wie ist die Geometrie der Herzklappe zu wählen, damit effizientes Öffnen und Schließen der Herzklappe über viele Zyklen hinweg gewährleistet werden? Wie ist der Einfluss des Blutflusses?

Leider lassen sich diese Fragen nicht mit nur einem Modell beantworten. Vielmehr geht es darum, mehrere auf verschiedene Teilaspekte abzielende Modelle intelligent miteinander zu verknüpfen, um eine möglichst gute Vorhersage für das Verhalten der tissue-engineerten Herzklappe zu erzielen. Diese Verschachtelung geschieht hier derart, dass unterschiedliche Modellierungsebenen definiert werden. Wir beginnen auf der kleinsten Ebene, der Faserebene. Die Fasern sind eingebettet in das Gewirk (Englisch: warp-knitted). Dies

führt uns auf die Gewirkebene. Das Gewirk ist Teil des Textils. Schließlich ist das Textil in die Herzklappe integriert, die die so genannte makroskopische Modellierungsebene darstellt. Es ist wichtig zu betonen, dass auf allen Ebenen natürlich auch Weichmaterial – die sich entwickelnde extrazelluläre Matrix (ECM) – zu berücksichtigen ist, allerdings in unterschiedlichen Volumenanteilen.

#### Faserebene

Zu den üblicherweise verwendeten Fasermaterialien liegen in der Regel ausreichend Informationen über die mechanischen Eigenschaften vor. Ein wichtiger Aspekt ist der Volumenanteil des Fasermaterials, der bei etwa 90 Prozent liegt. Das die Faser umgebende biologische Gewebe ist um mehrere Größenordnungen weicher und zeigt demzufolge deutlich größere Verformungen. Mit Hilfe eigener experimenteller Untersuchungen des Matrixmaterials und Daten für die Faser ergibt sich auf dieser Modellierungsebene

ein transversal isotropes nichtlinear-elastisches Modell. Dies ist ein Modell, das die durch die Faser bedingte Anisotropie (Richtungsabhängigkeit des mechanischen Verhaltens) berücksichtigt.

#### Gewirkebene

Die besondere Herausforderung der Modellierung auf der Gewirkebene ist die realistische Darstellung der komplizierten Geometrie. Wie aus Experimenten hervorgeht, haben die Unterschiede zwischen einem so genannten „warp knit“, dem Kettfaden, oder „weft knit“, dem Schussfaden, einen großen Einfluss auf das mechanische Verhalten. Entsprechend sind auf der Gewirkebene unterschiedliche Geometrien zu untersuchen. Aufgrund der miteinander verschlungenen Fasern ergibt sich aus der Homogenisierung auf dieser Ebene ein allgemein anisotropes Modell mit deutlich geringerem Volumenanteil für die Fasern.

## Fasern im Garn

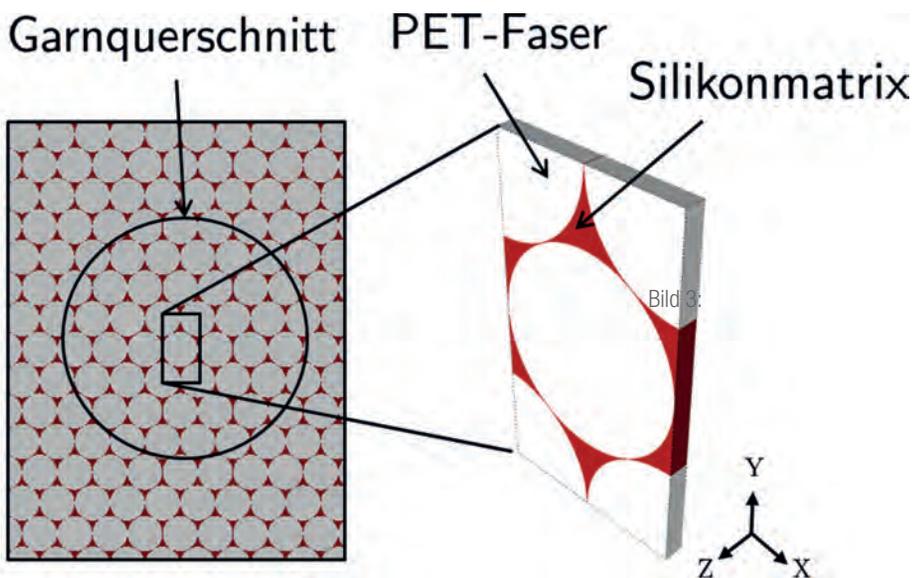


Bild 3: Details der Faserebene

Bild 4: Gewirk



### Textilebene

Auch auf der Textilebene besteht die Herausforderung der geometrischen Modellierung. Zusätzlich ist der dreilagige Aufbau zu beachten, der aus der Mittellage mit dem Textil und zwei Außenlagen ohne Textil besteht. Auf dieser Ebene liegen reale experimentelle Daten vor, die zur Kalibrierung des resultierenden Modells verwendet werden. Die im Vergleich zur Gewirkebene veränderte Geometrie mit einem modifizierten Volumenanteil der Fasern führt zu veränderten anisotropen Eigenschaften.

### Herzklappenebene

Das sich aus der Homogenisierung auf der Textilebene ergebende Modell ist nun dasjenige, das in der Finite-Elemente-Modellierung der Herzklappe eingesetzt werden kann. Vermutlich drängt sich die Frage auf, warum so viele Modellierungsebenen benötigt

werden. Es ist jedoch nur so möglich, die auf der Gewirk- und Textilebene vorliegende komplexe Geometrie konsistent in das final für die Herzklappe zu verwendende Modell einfließen zu lassen. Des Weiteren können so die auf Faser- und Textilebene verfügbaren Datensätze für die Kalibrierung des Modells genutzt werden.

### Wachstums- und Degradationseffekte in der Matrix

Bisher war in Bezug auf das Weichmaterial nur von isotrop elastischem Verhalten die Rede. Eine solche Modellierung ist in keiner Weise ausreichend, da auch das biologische Gewebe eine fibröse Komponente enthält. Es sei betont, dass diese so genannte biologische Faserstruktur von der zuvor diskutierten technischen zu unterscheiden ist. Aus Sicht der Strukturmechanik kann die von den Zellen synthetisierte extrazelluläre Matrix (ECM) als

Komposit aus zufällig orientierten Kurz- und Langfasern, aufgelöst in eine biologische Matrix, angesehen werden. Diese Kurz- und Langfasern beinhalten hoch zugefeste (Kollagen) und elastische Anteile (Elastin), wobei sich die Dichte des Kollagenanteils in Abhängigkeit von den gegebenen Stimuli verändert. Wie dieser Prozess genau vonstattengeht, ist aktueller Forschungsgegenstand. Daher werden für die Modellierung experimentelle Daten herangezogen, die die Aufstellung einer mathematischen Gleichung für die zeitliche Entwicklung der Kollagendichte erlauben.

### Remodeling

Ein weiterer wichtiger Aspekt ist die Ausrichtung der Fasern, die sowohl im Wachstumsprozess des biologischen Gewebes als auch im Konditionierungsprozess abläuft. Dieser Effekt wird in der Fachsprache als „Remodeling“ bezeichnet. Wie lässt sich dieses Phä-

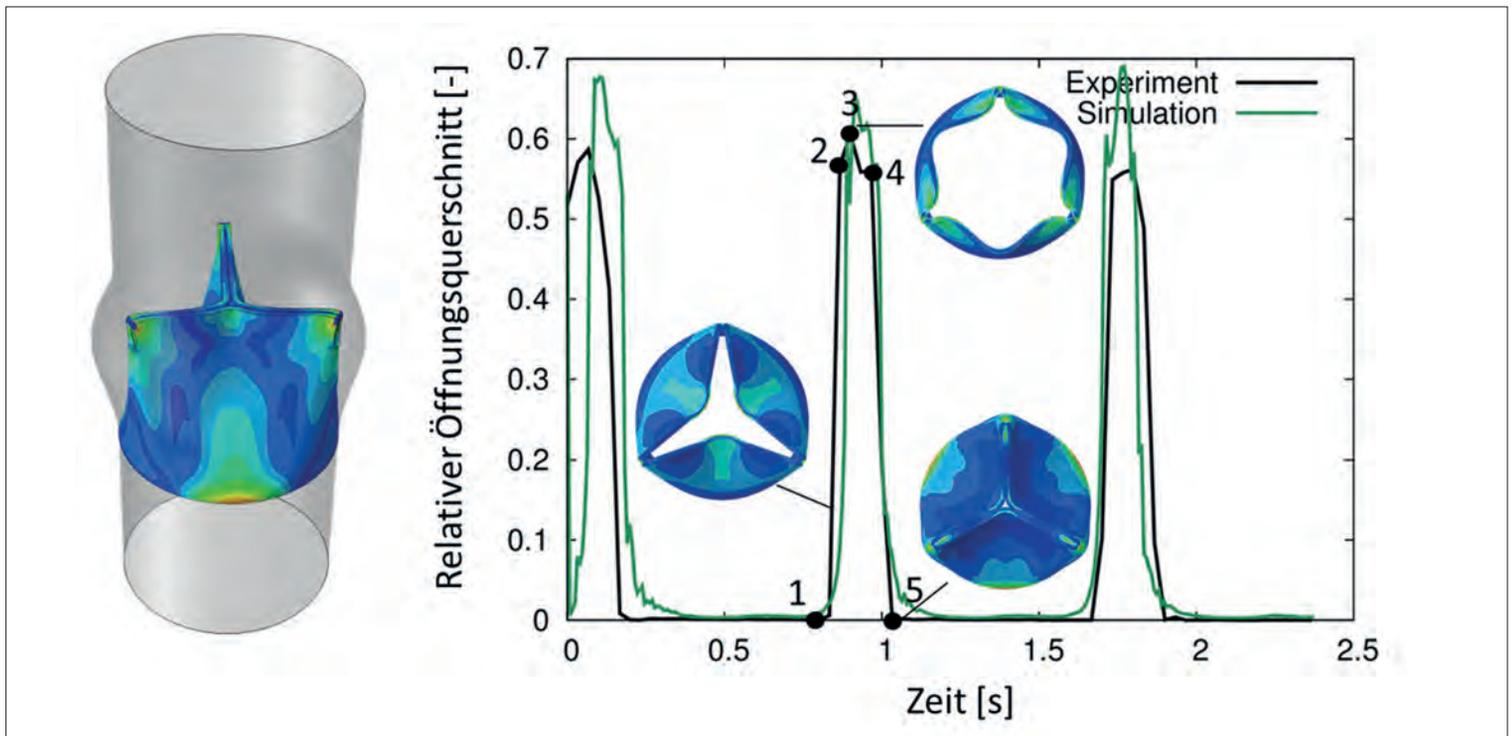


Bild 5: Gute Übereinstimmung des Herzklappenmodells mit dem realen Öffnungs- und Schließungsverhalten.

nomen im mechanischen Modell berücksichtigen? Tatsächlich wird anisotropes Verhalten in der Kontinuumsmechanik mit so genannten Strukturtenoren in einem Vektorensystem beschrieben. Im einfachsten Fall sind die Richtungsvektoren konstant. Man kann sie jedoch auch als innere Variablen interpretieren und die damit ins Spiel kommende zeitliche Veränderung mit Hilfe geeigneter Evolutionsgleichungen berechnen. Inwieweit beeinflussen die thematisierten Wachstums- und Degradationseffekte sowie das Remodeling die mehrskalige Modellierung? Glücklicherweise kann die grundsätzliche Vorgehensweise erhalten bleiben. Nur die Modelle werden komplizierter. Dies betrifft in besonderem Ausmaß die Modellierung des Matrixmaterials, in die nun die unterschiedlichen Faseranteile einschließlich deren Wachstums- und Degradationsprozesse eingehen müssen. Hinzu kommt aber auch das Remodeling sowohl in der biologischen als auch in der technischen Faserstruktur, das einen starken wechselseitigen Einfluss auf das anisotrope Verhalten des gesamten Komposites ausübt.

### Simulation von Öffnungs- und Schließmechanismen der Herzklappe

Zusätzlich zu der diskutierten anspruchsvollen mehrskaligen Modellierung des faserverstärkten Komposites des Herzklappenmaterials stellt die Finite-Elemente-Simulation der sich öffnenden und schließenden Herzklappe

eine besondere Herausforderung dar. Bei der Herzklappe handelt es sich um eine dünne membranartige Struktur mit diffiziler Geometrie, die komplizierten Beanspruchungsszenarien unterliegt. Die Belastung resultiert aus dem Zusammenspiel zwischen dem Druck in der Herzkammer und der Hauptschlagader, das sich über Diastole und Systole stark verändert und das Öffnen (Systole) und Schließen (Diastole) der Herzklappe bewirkt. Die bisherigen Ergebnisse zeigen bereits eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten für den Öffnungsquerschnitt, wobei jedoch die Interaktion zwischen Blutfluss und Herzklappe nur näherungsweise berücksichtigt wurde.

Aufgrund ihrer sehr geringen Dicke verhält sich die Herzklappe sehr sensitiv bezüglich ihrer Lagerung und ihrer Geometrie. Bei einer zu geringen Anzahl an finiten Elementen oder der Verwendung ungeeigneter Finite-Elemente-Formulierungen werden sehr schnell unrealistische Ergebnisse erzeugt, die Öffnungs- und Schließmechanismen verfälscht darstellen. Aus diesem Grund wird hier eine spezielle Finite-Elemente-Technologie eingesetzt, die mit relativ groben Vernetzungen eine zuverlässige Vorhersage des Verformungsverhaltens dünner Strukturen erlaubt.

Die Modellierung der Herzklappe ist Gegenstand hochaktueller Forschung. In der wissenschaftlichen Literatur finden sich weder ausreichend experimentell validierte Modelle für

die unterschiedlichen Modellierungsebenen noch numerisch überzeugende Simulationen der Herzklappenzyklen. Eine mehrskalige Betrachtungsweise wurde bisher noch nie umgesetzt. Ziel der Forschungsarbeit ist es, den Wachstums- und Konditionierungsprozess der biohybriden Herzklappe so realistisch computerbasiert darzustellen, dass das Modell das Design der tissue-engineerten Herzklappe und den Konditionierungsprozess nachhaltig unterstützt. Letztendlich soll auch das Verhalten der Herzklappe im Patienten vorhergesagt werden.

### Autoren

Univ.-Prof. Dr.-Ing. Stefanie Reese ist Leiterin des Instituts für Angewandte Mechanik.

Deepanshu Sodhani, M. Sc., war wissenschaftlicher Mitarbeiter ebenda.

Prof. Scott Stapleton, Ph.D., ist Professor an der University of Massachusetts, Lowell, USA.

Univ.-Prof. Dr. med. Stefan Jockenhövel ist Inhaber des Lehrstuhls für Angewandte Medizintechnik und Inhaber der NRW-Schwerpunktprofessur Biohybrid & Medical Textiles (BioTex).

Dr. Petra Mela arbeitet als Privatdozentin am Institut für Angewandte Medizintechnik und ist Leiterin der Arbeitsgruppe Cardiovascular Tissue Engineering im Rahmen der BioTex-Professur.

# Die Mathematik der Strahlentherapieplanung

Mit Modellierung und Simulation zu einer besseren Krebstherapie

According to recent WHO data, cancer is the main cause of death worldwide. Radiation therapy is used in more than half of the cases that are treated.

In this article, we not only show that radiation therapy a field that already heavily relies on simulations, but furthermore that future improvements of this technology will rely even more on computational science and mathematical methods.

Laut aktuellem Bericht der Weltgesundheitsorganisation (WHO)<sup>1</sup> sind Krebserkrankungen die hauptsächliche Todesursache weltweit, mit mit mehr als 14 Millionen betroffenen Patienten jährlich. In mehr als 75 Prozent der Fälle werden Strahlentherapiemaßnahmen eingesetzt und damit eine nicht invasive Behandlung. Die grundlegende Idee beruht auf Beobachtungen von Emil Grubbe aus dem 19. Jahrhundert, nur wenige Tage nach der Entdeckung der Röntgenstrahlung durch Wilhelm Röntgen. Heute ist bekannt, dass hochenergetische Strahlung zu einer Beeinträchtigung des Zellwachstums führt und zur Zerstörung kanzerogener, also krebs erzeugender Zellen, eingesetzt werden kann. Die medizinisch-technische Umsetzung eines kontrollierten Einsatzes der Strahlung hat bis in die 1950er Jahre gedauert und befindet sich weiterhin in der Entwicklung. Geräte der neuesten Generation verwenden bildgebende

Verfahren, so dass Aufnahmen des Patienten idealerweise noch während der Bestrahlung zur Steuerung des Therapieplans benutzt werden.

Die Entwicklung technischer Geräte wurde mit Hilfe entsprechender mathematisch-physikalischer Methoden der Vorhersage und Simulation des Strahlungseinflusses auf Gewebe begleitet. Typischerweise werden die Simulationen im Vorfeld der Behandlung benutzt, um Risiken und Wirkungsweise angelegter Strahlung unterschiedlicher Energie und unterschiedlicher Strahlformen abzuschätzen und dem behandelnden Arzt damit eine Hilfestellung zur Auswahl des bestmöglichen Therapieplans bereitzustellen. Fortschritte in der mathematischen und numerischen Untersuchung der zugrunde liegenden Strahlentransportvorgänge können den Arzt bei der Entscheidungsfindung unterstützen. Die Wirkungsweise der Strahlentherapie kann

<sup>1</sup><http://www.who.int/cancer/cancer-snapshot-2015/en/>

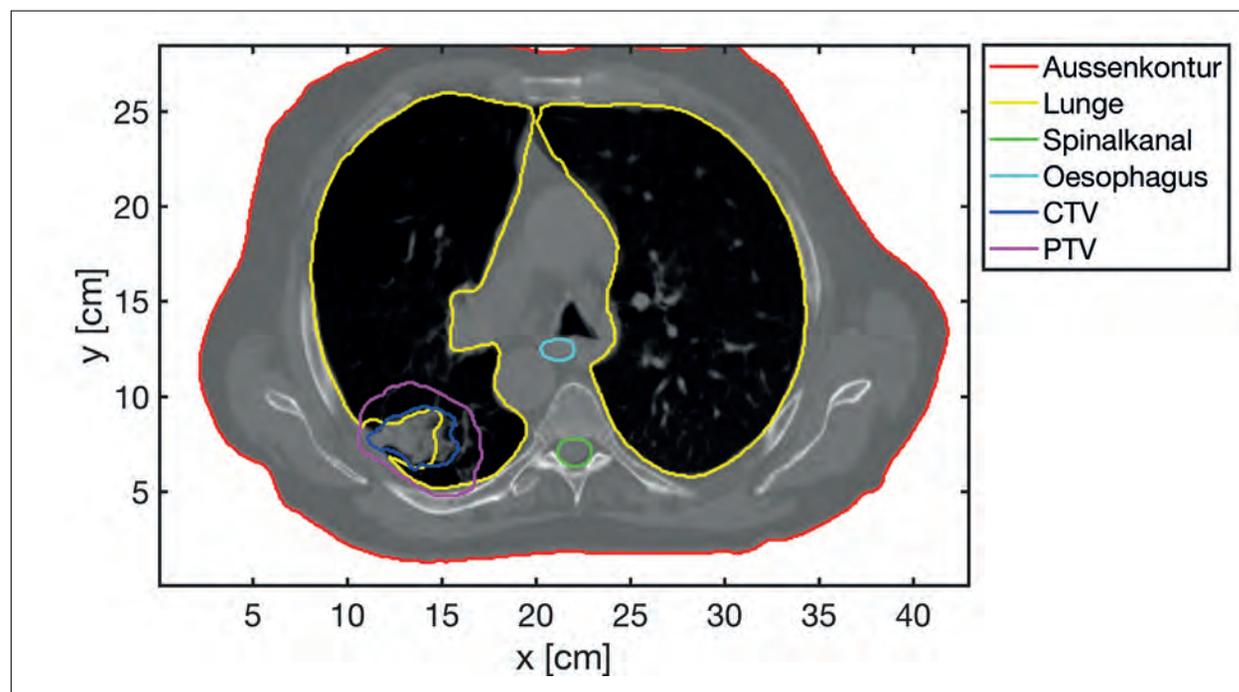


Bild 1: Computertomographie mit Markierungen von Tumor und Organen.

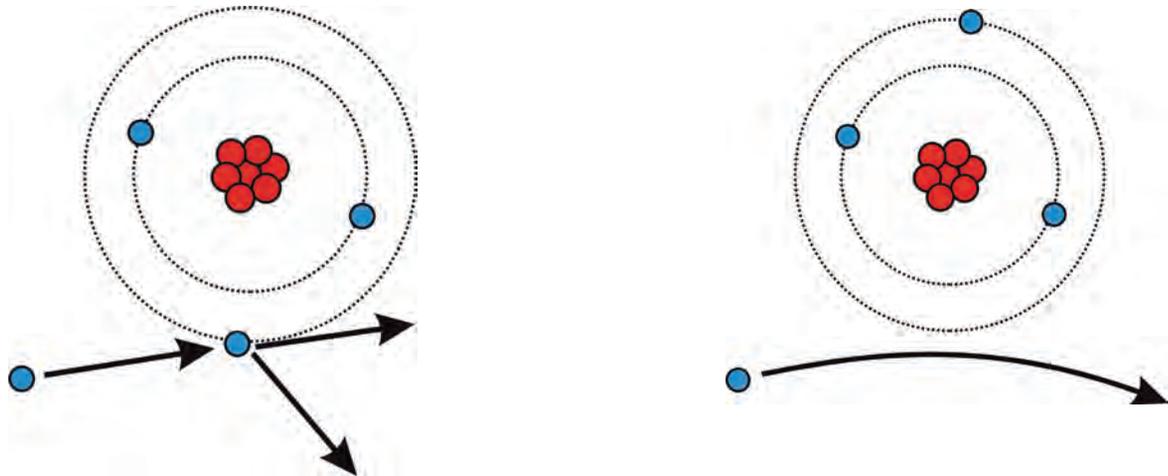


Bild 2: Streuung von Elektronen in Körpergewebe (links inelastisch, rechts elastisch).

wie folgt beschrieben werden: In modernen Anlagen wird sowohl die räumliche Position, das Energiespektrum, als auch das quer verlaufende Profil der an den Patienten angelegten Strahlung eingestellt. Die emittierte hochenergetische Strahlung penetriert das äußere Gewebe des Patienten und bewegt sich in der ursprünglichen Richtung fort. Zusätzlich interagieren die hochenergetischen Teilchen mit dem Gewebe durch Streuung und Absorption. Streuung verändert die Ausbreitungsrichtung eines Teils der Strahlung und Absorption deponiert die Energie, die prinzipiell die kanzerogenen Zellen zerstören kann, im Gewebe. Die deponierte Energie wird Dosis genannt.

Typischerweise liegen vor der Behandlung des Patienten Computertomographiedaten (CT) vor, in denen sowohl die Lage der kanzerogenen Zellen als auch die verschiedenen Gewebearten markiert sind. Außerdem ist die in den kanzerogenen Zellen zu deponierende Dosis bekannt, die eine Zerstörung bewirken soll. Mathematisch gesehen handelt es sich bei der Strahlentherapieplanung um ein um-

gekehrtes, mathematisch inverses Problem: Die gewünschte Verteilung der Dosis im Gewebe ist vorgegeben und die Quelle, das heißt die Einstrahlposition und das Strahlprofil, sind unbekannt. Die Simulation eines Strahlenverlaufs verläuft in umgekehrter Richtung. Die Komplexität des Prozesses erfordert mathematische Methoden, die eine effiziente und robuste Lösung des inversen Problems garantieren können. Hierbei spiegeln sich Fortschritte im mathematischen Verständnis in der Behandlung inverser Probleme wider. Historisch wurde das Therapieplanungsproblem zunächst für vereinfachte Ausbreitungsmodelle der Strahlung gelöst. Diese so genannten Pencil-Beam-Berechnungen erlaubten, ausgehend von einer Strahlenquelle explizit die zu deponierende Dosis auszurechnen. Diese Formel konnte dann invertiert werden, um das inverse Problem zu lösen. Allerdings weisen diese expliziten Formeln Nachteile in Bezug auf die Genauigkeit der Simulation auf, da verschiedene Effekte vernachlässigt wurden, um eine explizite Formel erhalten zu können. Die detaillierten Modelle

beruhen heute auf so genannten Monte-Carlo-Simulationen, das heißt Simulationen einzelner Partikel auf ihrem Weg durch das Gewebe unter Berücksichtigung der physikalischen Streu- und Absorptionsprozesse. Der Begriff ist eine Anspielung auf die Spielbank Monte Carlo und basiert auf der Beschreibung des Prozesses durch eine Vielzahl zufällig ausgewählter Teilchen (Photonen), deren energetische Änderung und räumliche Bewegung simuliert werden. Die Konvergenzgeschwindigkeit der Methode ist gegeben durch die Wurzel aus der Anzahl der simulierten Photonen. Damit konvergiert das Verfahren nur langsam und benötigt einen relativ hohen Rechenaufwand. Dieses Verfahren lässt sich nur schwer für das inverse Problem nutzen, da in der Simulation, ausgehend von einer Quelle, die Teilchenbewegungen nachvollzogen werden. Die Quelle ist aber hier unbekannt.

In den letzten Jahren sind Modelle entwickelt worden, die den gleichen Prozess mit anderen mathematischen Gleichungen beschreiben, die eine für das inverse Problem geeig-



Bild 3: Bestrahlung des oben gezeigten Tumors (links Bestrahlungsplan, Mitte Monte-Carlo-Dosisverteilung, rechts PDE-basierte Simulation).



Bild 4: Univ.-Prof. Dr. med. Michael J. Eble bei der Strahlentherapieplanung in der Klinik für Radioonkologie und Strahlentherapie der Uniklinik RWTH Aachen.  
Foto: Peter Winandy



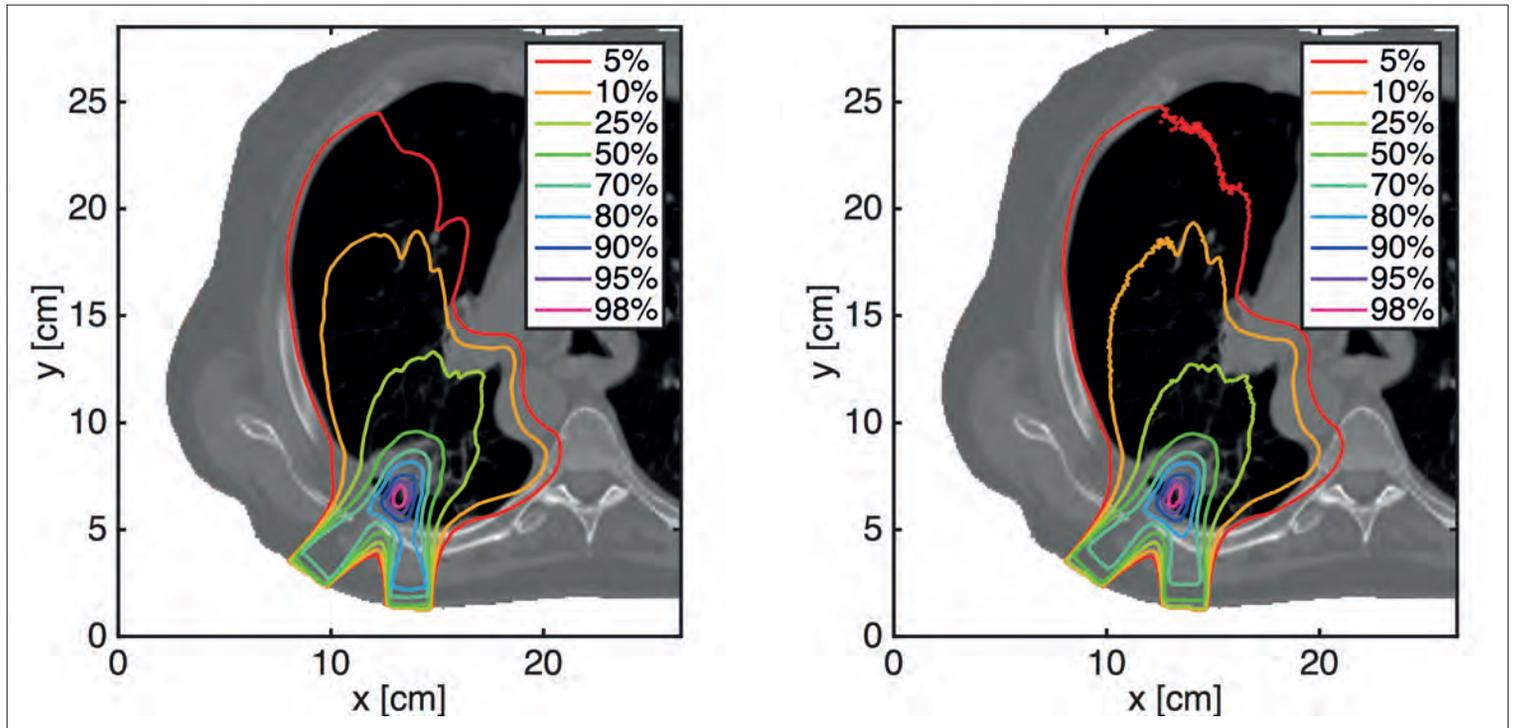


Bild 5: Isodosiskurven: Die PDE-basierte Simulation (links) und die Monte-Carlo-Simulation (rechts) zeigen eine große Übereinstimmung.

nete Struktur haben. Statt einer individuellen Beschreibung der Bewegung einzelner Photonen wird eine Beschreibung der Wahrscheinlichkeit, Photonen in einem räumlichen, energetischen und Winkelsegment zu finden, verwendet. Die Evolution der Wahrscheinlichkeitsdichte in Raum, Energie und Ausbreitungswinkel ist äquivalent zur Monte-Carlo-Methode und kann mittels einer deterministischen partiellen Differenzialgleichung beschrieben werden. Die mathematische Struktur der Differenzialgleichung ermöglicht verschiedene Approximationen, sprich Annäherungen, insbesondere für die „continuous-slowing down approximation“ (CSDA) für geladene Teilchen. In diesem Fall ergeben sich nur geringe Abweichungen einer Simulation der CSDA-Gleichung im Vergleich zur konventionellen Monte-Carlo-Simulation. An der RWTH wurde zu analytischen und numerischen Eigenschaften der CSDA-Gleichung in den letzten Jahren intensiv gearbeitet. Das theoretische inverse Problem konnte für einzelne Strahlungsarten und für die kombinierte Ausbreitung inklusive Sekundärteilchen kürzlich gelöst werden. Die theoretischen Erkenntnisse über die Struktur der Gleichung ermöglichen die Entwicklung einer Methode zur numerischen Umsetzung der Lösung des inversen Problems. In diesem Zusammenhang kann zu nächst theoretisch eine Gleichung für die

räumliche Ausbreitung der Differenz zwischen gewünschter und applizierter Dosis aufgestellt werden. Durch die explizite, deterministische Struktur der Gleichung können aus der Differenz der anliegenden Dosis Rückschlüsse auf die Struktur der angelegten Strahlung geschlossen werden. Dadurch stehen auf mathematischer Seite beweisbare Bedingungen zur Verfügung, mit denen optimale Therapiepläne charakterisiert werden können. Die Umsetzung dieser Bedingungen, die aus einem gekoppelten System partieller Differenzialgleichungen bestehen, ist nur numerisch möglich. Eine explizite Lösung ist aufgrund der unterschiedlichen Gewebearten und der Kopplung durch integrale Größen im Allgemeinen nicht möglich. Neben diesen in der numerischen Umsetzung zu berücksichtigenden Effekten stellt die Dimension des Problems eine Herausforderung dar. Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist auf einem sechsdimensionalen Gebiet definiert, da drei Raumdimensionen, eine Energiedimension und die zwei Dimensionen der Sphäre als Ausbreitungsrichtung numerisch approximiert werden müssen. Die Genauigkeit der Approximation wird durch die Anzahl der gewählten Unbekannten und durch die numerische Ordnung des Verfahrens garantiert. Eine direkte Näherung, die der Auflösung eines CT-Bildes entspricht, führt auf eine im Rechner umzusetzende Gleichung in der Größen-

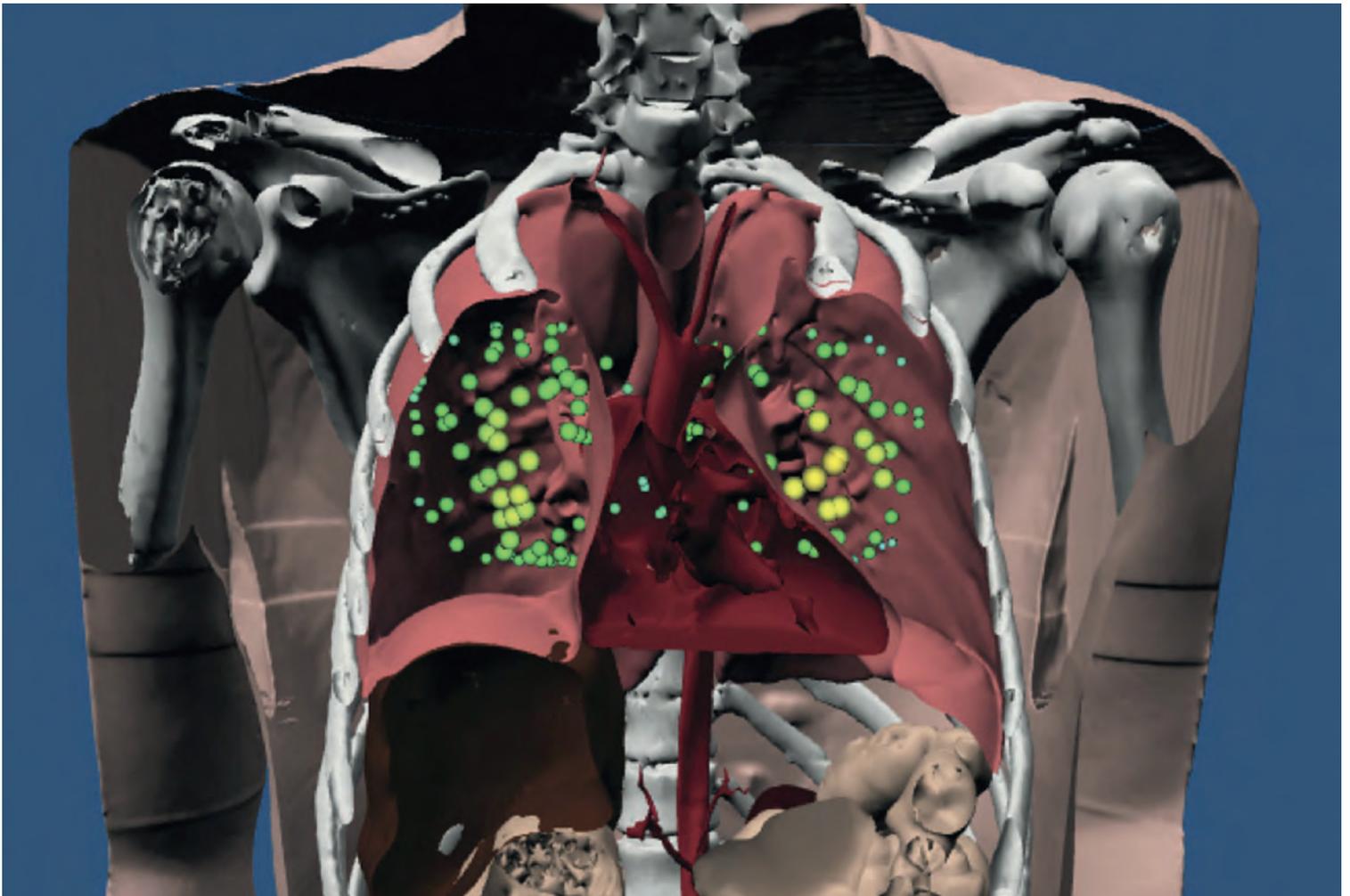


Bild 6: Visualisierung des Teilchentransports im Gewebe. Die Größe der Teilchen stellt die Teilchendichte dar, die Farbe die deponierte Dosis.

ordnung von über einer Billion Unbekannten und ist daher ausgesprochen herausfordernd. Weitere Forschungen an der RWTH beschäftigen sich daher mit der effizienten Umsetzung der hochdimensionalen Gleichungen durch geschickte Reduktion der Dimension. Eine Möglichkeit besteht zum Beispiel in der Approximation der Winkelabhängigkeit durch eine geeignet gewählte Reihenentwicklung, die exponentiell konvergiert. Damit sind bei gleicher Fehlerschranke wenige Terme in der Beschreibung ausreichend. Eine weitere Verbesserung der Approximation kann durch die Betrachtung von aus der Gleichung abgeleiteten Entropiegrößen gewonnen werden. Deren monotonen Verhalten ermöglicht eine Modifikation der Reihenapproximation durch nichtlineare Terme. Dies führt zu einer weiteren Reduktion der Komplexität in Bezug auf die Anzahl der unbekanntenen Terme. Allerdings wächst die numerische Herausforderung, da die hergeleiteten Gleichungen nichtlinear sind.

Ein weiterer wichtiger Aspekt in der Strahlentherapie ist die Beschreibung von Unsicherheiten im Modell, da zum Beispiel die Messdaten (CT-Scan) als auch die Materialparameter Fehlern unterliegen. Da diese Unsicherheiten in der Realität nicht ausgeschlossen werden können, müssen diese auch im Modell beschrieben und bestimmt werden. Denn erst die Beschreibung der Unsicherheiten garantiert die Gültigkeit der numerischen Lösung in der Anwendung. Die Unsicherheiten im Modell werden durch ein statistisches Modell beschrieben und in die Gleichungen integriert. Dann können die Unsicherheiten im Modell weiterverfolgt und deren Einfluss auf die Dosis bestimmt werden. Die Bestimmung der Unsicherheiten erfordert zum Beispiel die Berechnung verschiedener möglicher Konfigurationen und führt damit erneut zu einer Erhöhung der Komplexität des Problems. Zur Untersuchung der Unsicherheiten sollen neue effiziente Methoden weiterentwickelt und diese zur Quantifizierung der Unsicherheiten in der Strahlentherapie genutzt werden.

---

## Autoren

Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Martin Frank betreut das Lehr- und Forschungsgebiet Simulation in der Kerntechnik.

Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Michael Herty betreut das Lehr- und Forschungsgebiet Mathematik. Kerstin Küpper, M.Sc., ist wissenschaftliche Mitarbeiterin am Lehr- und Forschungsgebiet Simulation in der Kerntechnik.

---

# Strömende Bits und Bytes

Zusammenspiel von Höchstleistungsrechnern und Medizin

Respiration is an essential physiological functionality of the human organism and is responsible for supplying the body with oxygen. The nasal cavity takes care of olfaction and degustation, filters fine dust from the air as well as moisturizes and tempers the air. Therefore, it is indispensable in respiration, and a degradation of only one or a few functionalities leads to discomfort or further pathologies. In the profile area Computational Science & Engineering (CompSE), human respiration is analyzed by means of highly-resolved numerical simulations that, due to the large problem sizes, can only be executed on supercomputers. Complaints in nasal respiration, the development of chronic airway diseases, a reduction of olfaction and degustation, particle deposition behavior and filtering mechanisms of the nasal cavity, air conditioning capability, and a fundamental understanding of the physics of human respiration are at the core of the research. The following article gives an overview of the methodologies employed by the group, current results, and the challenges engineers, computer scientists, and medical specialists have to face in the future to reach the goal of personalized medical treatment.

Wie wird heutzutage an der RWTH Aachen das Zusammenspiel von Höchstleistungsrechnern, der Strömungsmechanik und der Informatik zur Beantwortung biofluidmechanischer Fragestellungen aus der Medizin genutzt? Im Fokus stehen die Arbeiten der Sektion Computing des Profilbereichs „Computational Science & Engineering“ (CompSE), die sich mit der Simulation der Luftströmungen in den menschlichen Atemwegen beschäftigen. Die Forschung konzentriert sich hierbei auf Untersuchungen zu Atembeschwerden durch die Nase, auf die Herkunft chronischer Atemwegserkrankungen, das Herrühren verminderten Riech- und Geschmacksvermögens, auf das Ablagerungsverhalten von Feinstaubpartikeln und die Filterfunktion der Nase, Lufterwärmung und -befeuchtung sowie auf die fundamentale Physik der Atmung. Ziel ist es, ein besseres Verständnis der menschlichen Atmung zu bekommen, um mögliche Erkrankungen patientenindividuell zu untersuchen und die Operationsplanung zu verbessern. Zur Simulation wird ein Strömungslöser verwendet, der zusammen mit dem Aerodynamischen Institut entwickelt wird. Er ist hochskalierbar und effizient auf Höchstleistungsrechnern lauffähig. Als Eingabe dient dem

Verfahren ein medizinischer Computertomographie-Datensatz (CT) eines Patienten, der dreidimensionale Informationen über Luft, Gewebe und Knochen direkt aus dem Inneren des Patienten enthält. Die verschiedenen Materialien lassen sich über ihren Hounsfield-Wert (HU), welcher prinzipiell das Röntgenabschwächungsverhältnis von Gewebe zu Wasser beschreibt, identifizieren. Aus solch einem Datensatz wird mittels Algorithmen das Luftvolumen extrahiert und ein Oberflächennetz erzeugt. Die betrachteten Geometrien reichen hinunter bis zur zwölften Lungengeneration, an der sich die terminalen Bronchiolen befinden und dienen als Grundlage zur Erzeugung von Rechengittern. Entwickelt wurde eine effiziente Methode, die eine sehr hohe räumliche Auflösung erlaubt und Gitter innerhalb kurzer Zeit parallel auf sehr vielen Prozessen erzeugen kann. Die einzelnen Elemente des Gitters bestehen aus Würfeln und haben eine Kantenlänge im Submillimeterbereich, um möglichst alle Strömungsphänomene aufzulösen. In der Regel sind etwa eine Milliarde Gitterelemente nötig, um zum Beispiel einen Datensatz bestehend aus dem gesamten Atemtrakt zu vernetzen.

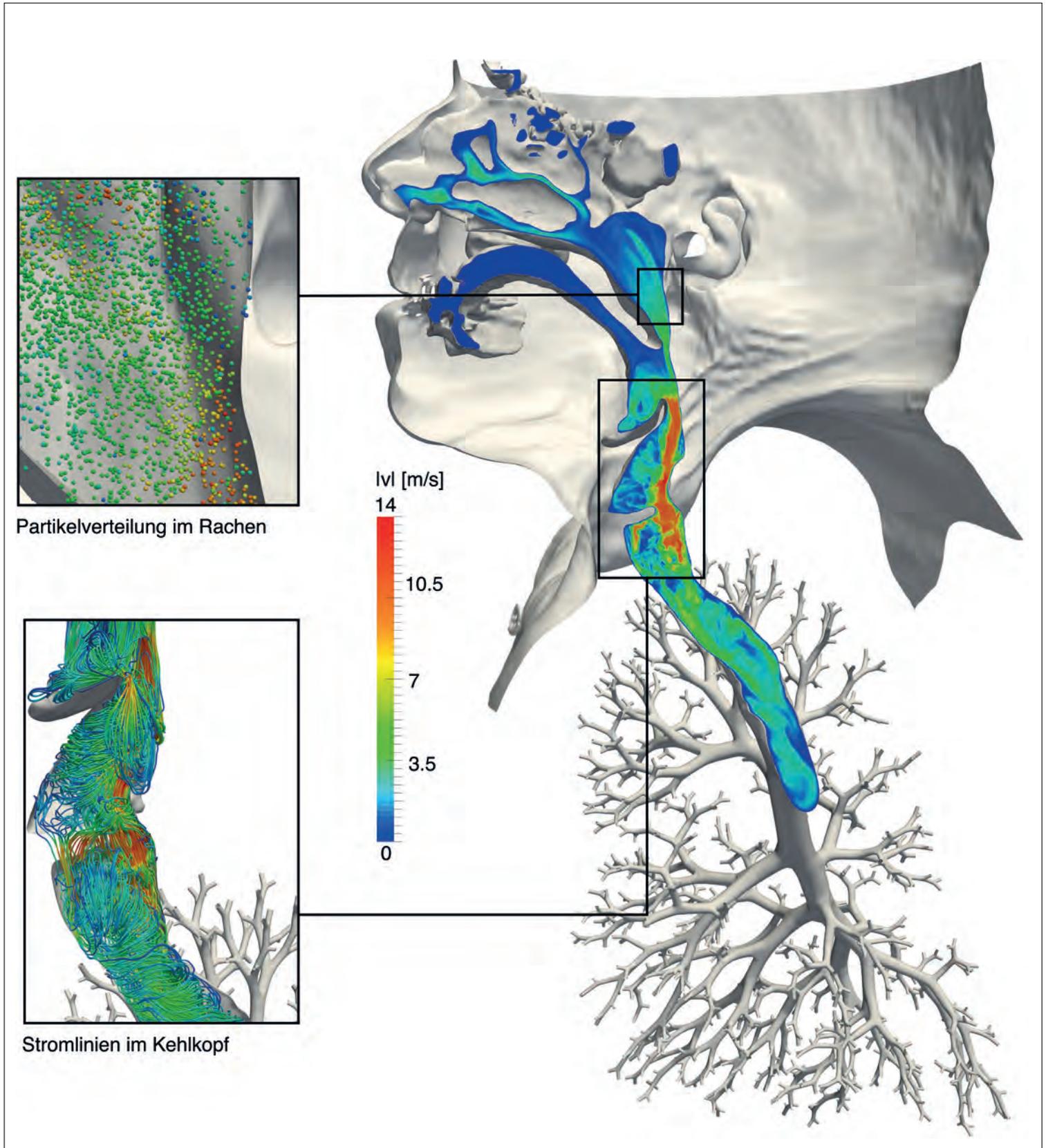


Bild 1: Luft- und Partikelströmung in den menschlichen Atemwegen. Farblich dargestellt ist der Geschwindigkeitsbetrag.



Bild 2: Von hohem Interesse ist das Verhalten von Feinstaubpartikeln in den menschlichen Atemwegen bei der Inspiration. Insbesondere lässt sich mittels Simulationen der Filtermechanismus der Nase sowie das Depositionsverhalten unterschiedlicher Partikel in der Luftröhre und der Lunge charakterisieren.

Foto: Peter Winandy



LBM velocity mag.

0.194

0.146

0.0970

0.0485

Um eine Strömung einzuleiten, muss bei der Einatmung an den Enden der Lungenäste der Druck abgesenkt werden. Darüber hinaus ist die Haftbedingung an festen Wänden zu erfüllen. Sind diese Voraussetzungen gegeben, kann das Problem auf die Anzahl der zur Verfügung stehenden Prozessoren verteilt werden und die Simulation beginnen. Zur Auswertung der Simulationsdaten werden entweder in bestimmten Zeitintervallen die Lösungen auf die Festplatte geschrieben oder direkt während der Laufzeit Analysen betrieben. Ersteres wird durch die stetig steigenden Simulationsanforderungen zunehmend unpraktikabel, da immense Datenmengen von der Größenordnung von mehreren hundert Terabyte (1.024 GB) bis zu Petabyte (1.048.576 GB) geschrieben werden müssen. Daher geht der Trend immer mehr zur so genannten „in-situ“-Analyse der Strömungsdaten zur Laufzeit der Simulation. Auch Visualisierungen lassen sich so durch Kopplung des Strömungslösers an einer am Jülicher Supercomputing Centre entwickelten „in-situ“-Bibliothek direkt während der Simulation realisieren.

Ein wichtiges Kriterium für die Analyse der Nasenatmung ist der Druckverlust von den

Nasenlöchern bis hin zum Rachen. Er ist ein Maß für die Energie, die nötig ist, um einzuatmen. Mit Hilfe von Simulationen lässt sich so patientenindividuell die Effektivität einer Nase aus strömungsmechanischer Sicht beurteilen, um Problemstellen und mögliche Orte für eine Operation zu lokalisieren. Zusätzlich lassen sich solche Aussagen durch die Analyse lokal erhöht auftretender Schubspannungen an der Schleimhautoberfläche erhärten. Sie können je nach Stärke zu Irritationen oder Entzündungen führen. Die Temperatur im Rachenbereich sollte im gesunden Menschen bereits Körpertemperatur erreicht haben. Ist dies nicht der Fall, ist der Wärmetransport vom Gewebe in die Luft, zum Beispiel durch eine geringere Oberfläche in der Nase, vermindert. Mehrfache Operationen der Nasenmuschel führen nicht selten zum so genannten Empty-Nose-Syndrom, welches eine Reduktion der Oberfläche zur Folge hat und schlussendlich das Erwärmungsverhalten und die damit gekoppelte Befeuchtung der Luft reduziert. Ein verminderter Riech- beziehungsweise Geschmackssinn rührt derweil von einer falschen Luftführung innerhalb der Nase. Die Luft wird dann schlichtweg nicht am im

oberen Bereich der Nase nahe des Gehirns befindlichen Riechepithel vorbeigeleitet. Zur Analyse der Verteilung der Strömung in der Nase verwenden die Forscher Stromlinienvisualisierungen. So lassen sich auch lokale Beschleunigungen und verengte Strömungskanäle identifizieren.

Wichtig ist darüber hinaus, ob eine Strömung laminar oder turbulent ist, also einen gleichmäßigen oder chaotischen Charakter entwickelt. Turbulente Strömungen tendieren einerseits dazu, die Vermischung von Fluiden zu verbessern, andererseits, infolge von erhöhter Schubspannung an der Geweboberfläche, das Einatmen zu erschweren. Ein Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung findet sich auch im Bereich des Kehlkopfs, der bei der Einatmung einen Strömungsstrahl in Richtung Luftröhre erzeugt, welcher sich, abhängig von der Atemintensität, hinunter zur primären Lungenbifurkation wieder laminarisiert.

Betrachtet man zusätzlich Feinstaubpartikel, welche in der Regel eine Größe von 2,5 bis 10 Mikrometer haben, werden diese auf Grund ihrer Größe und ihres geringen Gewichtes im einfachsten Fall mit der Strömung transportiert. Abhängig von lokalen Strö-

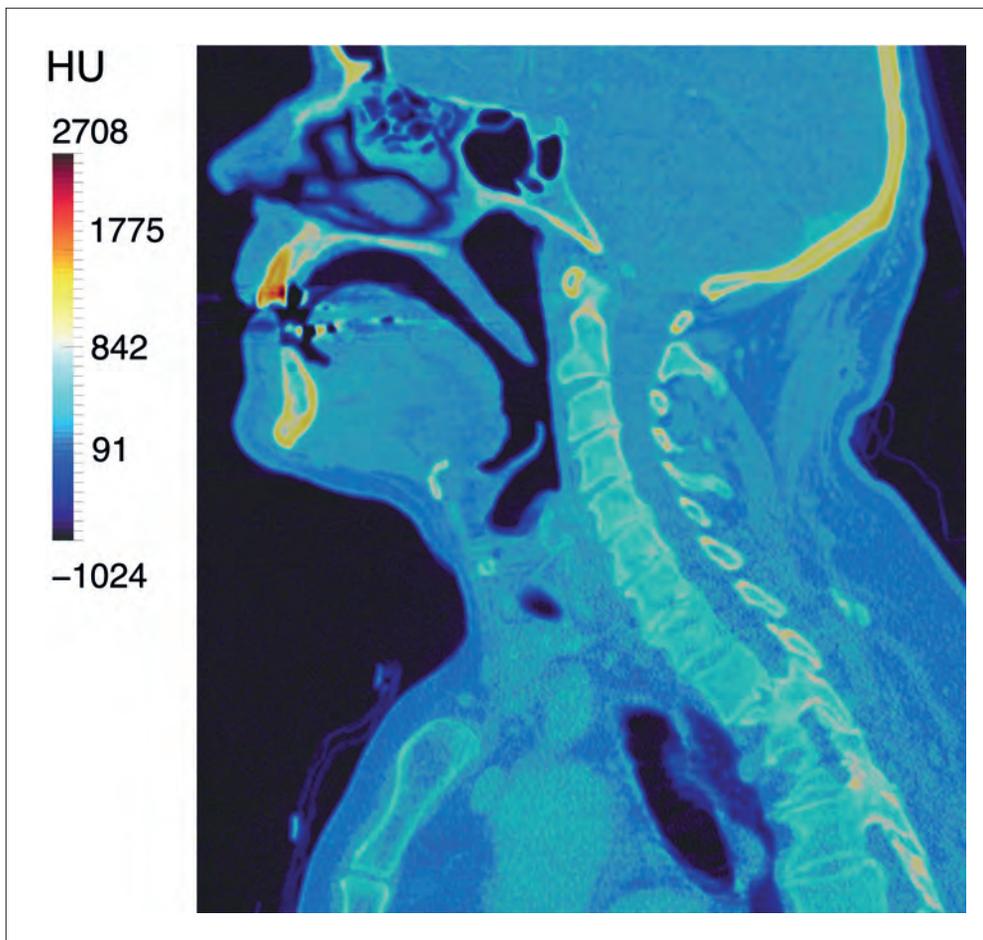


Bild 3: Koronaler Querschnitt einer Computertomographieaufnahme. Farblich dargestellt ist das Verhältnis der Röntgenabschwächungskoeffizienten von Gewebe zu Wasser in Hounsfield-Einheiten.

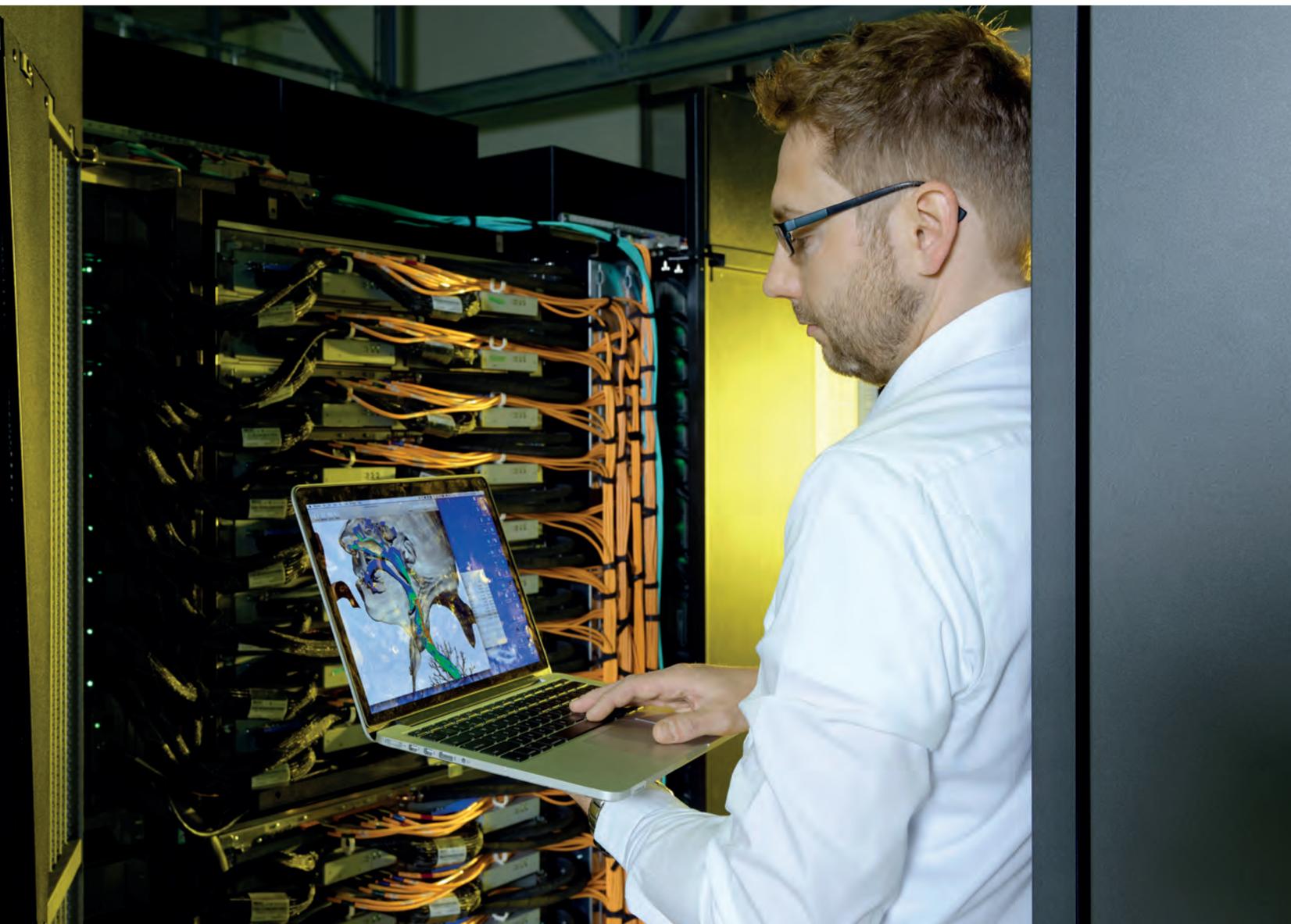


Bild 4: Die vielen Rechenknoten der JUQUEEN sind über ein großes Netzwerk miteinander verbunden, welches es der parallelen Simulation erlaubt, höchst effizient Daten zwischen den einzelnen Recheneinheiten auszutauschen.

Foto: Peter Winandy

mungsphänomenen, wie beispielsweise dem Strömungsstrahl im Kehlkopf oder beschleunigter Strömung in der menschlichen Nase, können sie durch ihre Trägheit gegen das Gewebe transportiert werden und sich dort ablagern. In der Nase ist ein solcher Effekt gewünscht und erfüllt eine Filterfunktion. In der Lunge lagern sich solche Partikel hauptsächlich an Bifurkationen ab, also in Regionen, wo sich die Lungenäste teilen. Sie können dort je nach gelöstem Toxid Erkrankungen wie Husten, Bronchitis oder – wenn man Diesel- und Kohleaerosole betrachtet – sogar Krebs erzeugen. Eine große Anzahl solcher Partikel passiert die Nase und dringt in tiefere Lungengenerationen vor. Eine typische Anzahl an Prozessoren für solche Simulationen beläuft sich auf 16.000 bis 64.000. Das Jülicher Supercomputing

Centre am Forschungszentrum Jülich betreibt zu Forschungszwecken das IBM BlueGene/Q System JUQUEEN. Es besteht aus 28.672 Prozessoren mit jeweils 16 Kernen. Die Gesamtzahl der Recheneinheiten beläuft sich somit auf 458.752. Die Simulation des Atemvorgangs auf 16.000 solcher Kerne dauert je nach Gitterauflösung und zu betrachtender physikalischer Zeit etwa 24 Stunden. Die Berücksichtigung zusätzlicher physikalischer Vorgänge in solchen Simulationen und die Anforderungen an immer höhere zeitliche und räumliche Genauigkeit bedingt immer größere Rechenkapazitäten. Die Lösung hierzu bieten aktuelle Entwicklungen im Bereich des High Performance Computing (HPC). Heutige HPC-Systeme haben die Rechenleistung hunderttausender einzelner Computer und ermöglichen theoretisch das Lösen großer

Strömungsprobleme. Hierzu müssen die Algorithmen zur Lösung der Erhaltungsgleichungen der Strömungsmechanik neu formuliert werden, so dass viele Prozessoren gleichzeitig das Problem parallel bearbeiten können.

Eine Parallelisierung unterteilt das Gesamtproblem in die Anzahl der zur Verfügung stehenden Prozesse, sodass jede Einheit ein Teilproblem löst. Allerdings besteht eine Informationsabhängigkeit zwischen diesen Prozessen, die einen Austausch über das Netzwerk des HPC-Systems bedingen. Zusätzlich muss die Einzelprozessperformanz ebenfalls sehr hoch sein und die Unterteilung des Strömungsgebietes so gewählt werden, dass teure Kommunikation reduziert wird. Je mehr Prozesse man verwendet, desto kleiner werden zwar die Teilprobleme, allerdings



Bild 5: Nur mit Hilfe des Höchstleistungsrechners JUQUEEN des Forschungszentrums Jülich und ihrer 458.752 Rechenkerne kann Dr. Andreas Lintermann die komplexen Strömungsvorgänge in den menschlichen Atemwegen simulieren. Die dabei entstehenden enormen Datenmengen lassen sich nur mit solch spezialisierten Systemen auswerten.  
Foto: Peter Winandy



*Blue Gene supercomputer*



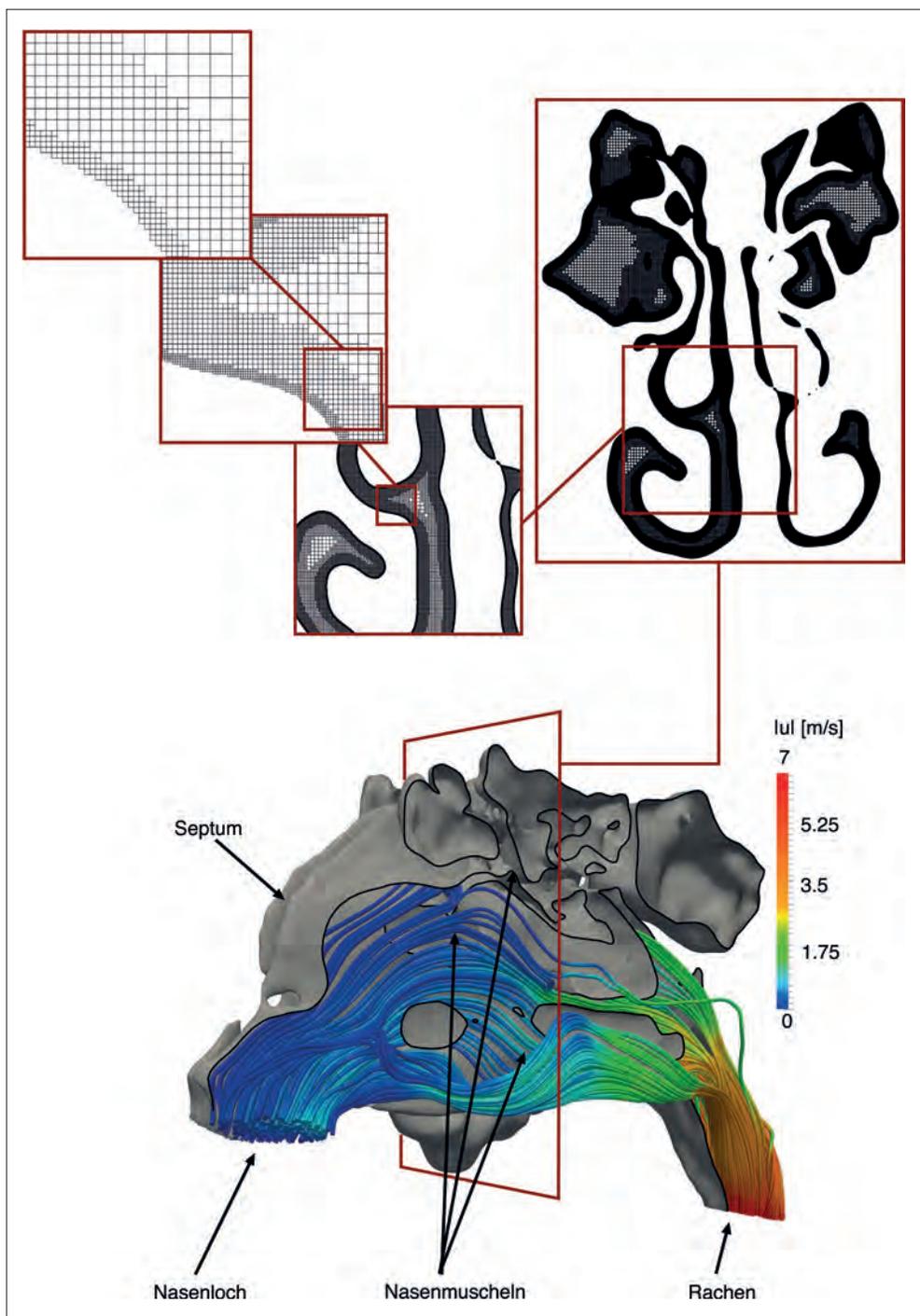


Bild 6: Randverfeinertes Rechengitter (oben) einer menschlichen Nasenhöhlengeometrie (unten) bestehend aus  $1,8 \cdot 10^9$  Rechenzellen. Dargestellt ist jeweils nur jede zweite Gitterlinie. Des Weiteren sind in der unteren Darstellung Stromlinien farblich mit dem Geschwindigkeitsbetrag unterlegt.

wächst auch die Kommunikation zwischen den Recheneinheiten immens und nimmt bei immer weiter steigenden Prozessorzahlen überhand. Dieser Flaschenhals ist nur durch Überlappung von Kommunikation und Rechnen überwindbar, was im optimalen Fall zu einem hochskalierenden Code führt, welcher kontinuierlich bei Verdopplung der Prozessorzahlen seine Laufzeit halbiert. Der Trend im HPC geht zu immer inhomogeneren Systemen, die nicht nur aus einzelnen Prozessoren mit mehreren Recheneinheiten bestehen, sondern auch um Beschleunigerkarten – das können Grafikkarten oder spezielle, für HPC-Anwendungen entwickelte Beschleuniger sein – erweitert werden. Dies bedingt die Entwicklung neuer algorithmischer Konzepte, um solche neuen Rechenressourcen auszunutzen. Eine Parallelisierung erstreckt sich demnach nicht mehr nur über die Prozessorebene, sondern bezieht die einzelnen Kerne eines Prozessors und eine Auslagerung auf Beschleunigerkarten – immer mit Blick auf Reduzierung von Kommunikation und effizienter Ausführung – mit ein.

Die Berechnung der dreidimensionalen, zeitabhängigen Strömungsfelder ist erst durch numerische Simulationen ermöglicht worden und der Wissenshorizont und die Möglichkeiten, die sich durch diese ergeben, sind bei Weitem noch nicht ausgeschöpft. In Zukunft wird nicht nur die Strömung, sondern auch die Interaktion mit dem Gewebe mittels Simulationen modellierbar sein. Operationsplanungen werden durch Formoptimierungsalgorithmen unterstützt, die patientenindividuell dem Operateur eine Gewebeform vorschlagen, die die Eigenschaft der Atmung im Hinblick auf die wichtigen Funktionen optimiert. Neue Rechnerarchitekturen und erhöhte Rechenleistung, neue optimierte Simulationswerkzeuge und verbesserte Analysemethoden werden ein eingehendes Verständnis der menschlichen Atmung liefern können und das Gesundheitssystem individualisieren.

### Autor

Dr.-Ing. Andreas Lintermann ist Gruppenleiter der Sektion Computing im Profilbereich Computational Science Engineering (CompSE) und des Simulation Laboratory Highly Scalable Fluids & Solids Engineering, JARA-HPC.

# Gemeinsam Richtung Zukunft.

FordPass ist da und hebt unsere Definition von Service und Mobilität auf eine neue Ebene. Jetzt auch mit Live Traffic Informationen\* und Ford Carsharing erhältlich.

**SEIEN SIE DABEI.  
LADEN SIE JETZT  
FORDPASS HERUNTER.**



\* Aktuelle Verkehrsinformationen in Echtzeit nur i. V. m. einem Navigationssystem und gleichzeitiger Verbindung Ihres Smartphones mit dem System Ford SYNC 3 mit AppLink. Für die Nutzung von Ford SYNC 3 ist ein kompatibles Mobiltelefon erforderlich. FordPass nutzt unter Umständen Daten von externen Anbietern, wie Karten und Richtungsangaben, um seine Dienste bereitzustellen. Beim Herunterladen und Verwenden der FordPass App fallen ggf. SMS- und Datenübertragungskosten bei Ihrem Mobilfunkanbieter an. Wenn Sie Fragen haben oder diese Aktion nicht vorgenommen haben, kontaktieren Sie bitte einen FordPass Assistenten über die FordPass App. Oder senden Sie eine E-Mail an FPDEU@ford.com. FordPass Funktionen können sich ändern. Das FordPass Erscheinungsbild kann variieren. Apple und das Apple-Logo sind in den USA und anderen Ländern eingetragene Warenzeichen von Apple Inc. App Store ist eine Dienstleistungsmarke von Apple. Google Play und das Google Play-Logo sind eingetragene Warenzeichen von Google Inc.

# Vom Molekül bis zum Patienten

„Big Data“ hilft bei der Vorhersage der Entwicklung chronischer Erkrankungen

Prediction of the evolution of chronic diseases in individual patients is key to the development of targeted therapies. The Joint Research Center for Computational Biomedicine, a private-public partnership of Bayer, RWTH and Uniklinik RWTH Aachen, is dedicated to research and development on new computational technologies to extract the relevant information out of big data repositories and transform it into tangible predictions. This requires a sophisticated combination of models and methods, which is demonstrated using the example of a model disease, chronic myeloid leukemia.

Medikamente für komplexe sowie chronische Erkrankungen haben eine enorm niedrige Erfolgsrate. Besonders häufig scheitern Medikamente zur Krebstherapie: Nur etwa 20 Prozent der in präklinischen Studien erfolgreichen Krebsmedikamente demonstrieren in Phase III klinischer Arzneimittelstudien eine ausreichende Wirksamkeit für eine spätere Medikamentenzulassung [1]. Zusätzlich sind neue Medikamente in der Praxis oft bei einer signifikanten, aber unvorhersagbaren Anzahl von Patienten unwirksam. Beides zeigt, dass trotz der wachsenden Forschungsanstrengungen zur Aufklärung der molekularen Mechanismen, die einer Erkrankung und einer entsprechenden Therapie zugrunde liegen, das Verständnis der therapielevanten Prozesse zumindest quantitativ oft noch unbefriedigend ist.

Der Therapieerfolg hängt zwar wesentlich von den molekularen Prozessen in den erkrankten Zellen ab, aber die Zellreaktion im System des Patienten auf einen Wirkstoff, die Pharmakodynamik, wird nicht nur von der direkten Interaktion des Medikaments mit seinem Target, dem Wirkungsgegenüber im Körper, bestimmt, sondern auch von einer Vielzahl an systemischen Co-Faktoren. Einflussgrößen wie das Mutationsprofil transportrelevanter Gene, Co-Medikationen und Co-Morbiditäten sowie umwelt- und lebensstilbezogene Faktoren und das Alter beeinflussen die Medikamentenwirkung. Zusätzlich müssen der Transport des Wirkstoffs zum Wirkort sowie sein Abbau und die Ausschei-

dung, die Pharmakokinetik, mit berücksichtigt werden. Die Mehrzahl dieser Faktoren kann im Labor nur schwer untersucht werden, so dass ein detailliertes quantitatives Verständnis des Zusammenwirkens der meisten dieser Prozesse oft schwer zu erlangen ist.

Die Heterogenität der relevanten Prozesse und die Komplexität ihrer Interaktion führen dazu, dass Modelle, die auf einzelnen Messgrößen basieren, nur selten eine zuverlässige Vorhersage des Therapieerfolgs ermöglichen können. Ein weiterer Ansatz ist daher, mit Hilfe sehr großer Datenmengen in Kombination mit künstlicher Intelligenz, dem so genannten maschinellen Lernen, die vorhandenen Lücken im mechanistischen Verständnis zu überbrücken.

Die Integration des den Mechanismus betreffenden biomedizinischen Vorwissens in ein Vorhersagemodell ist ein Forschungsschwerpunkt am Joint Research Center for Computational Biomedicine (JRC-COMBINE). Es wurde 2013 gemeinsam von der Bayer Technology Services GmbH, der RWTH und der Uniklinik RWTH Aachen gegründet. In mehreren Arbeitsgruppen werden intelligente Technologien entwickelt, die Hybrid-Modelle mit lernfähigen Programmen, mechanistischen Modellen und datengetriebenen Analysen kombinieren, die akute Probleme sowohl in der Industrie als auch der Klinik pragmatisch lösen sollen.

Das Einbinden in ein diverses Umfeld von Mathematik und Computational Sciences

ermöglicht die Verwendung von Analogien aus anderen Gebieten der Wissenschaft und Technik. Arbeitsgebiete des JRC-COMBINES sind zum Beispiel:

- Identifikation von therapierelevanten molekularen Mechanismen, sowohl mithilfe öffentlicher Datenbanken als auch mit gezielten Experimenten
- Vorhersage der Medikamentenwirksamkeit im Patienten aus in-vitro-Aktivitätsprofilen der Medikamente
- Charakterisierung des patientenspezifischen Krankheitszustandes für eine optimale Auswahl der Therapiestrategie

Außerdem werden Daten mit mathematischen Methoden aus der Systemtheorie im Hinblick auf ihren Nutzen für das Monitoring und das Vorhersagen kritischer Stadien im Krankheitsverlauf analysiert. Die Ergebnisse dieser Analysen sollen eine Früherkennung der Übergänge von chronischen hin zu akut bösartigen Krankheitsstadien ermöglichen. Dies wird exemplarisch an Modellerkrankungen wie der chronisch myeloiden Leukämie, kurz CML, getestet. CML ist ein vergleichsweise seltener Subtyp der Leukämien, der von der charakteristischen BCR-ABL-Mutation in den blutbildenden Stammzellen (HSC) erzeugt wird. Unbehandelt verläuft sie in drei Stadien mit letalem, also tödlichem Ende [2]. Die erste Phase wird als chronische Phase (CP) bezeichnet und kann mehrere Jahre andauern. Während dieser gutartigen Phase treten kaum weitere Mutationen auf und die vermehrt gebildeten Leukozyten nehmen ihre

normale Funktion wahr. Nach einigen Jahren werden die HSCs jedoch genetisch instabil und beginnen, sich zunehmend beschleunigt zu teilen und sich weiter zu verändern. In dieser so genannten akzelerierten Phase (AP) verlieren die Leukozyten ihre Funktion und nach etwa sechs weiteren Monaten geht die AP in die bösartige Blastenkrise (BC) über, in der die Leukozytenzahl explosionsartig wächst. Die BC kann nur noch mit einer Stammzelltransplantation behandelt werden und verläuft ansonsten letal. Ein großer Fortschritt der Krebstherapie war jedoch die Entwicklung von Imatinib und weiteren gegen BCR-ABL gerichteten Medikamenten, mit denen die Progression der Erkrankung innerhalb der chronischen Phase gestoppt und die Krankheit somit zurückgehalten werden kann.

Aufgrund ihres klar definierten Verlaufs ist die CML eine ideale Modellerkrankung, um Computermodelle für chronische Erkrankungen mit später bösartigem Verlauf zu entwickeln. Daher sind bereits mechanistische Modelle für die Entwicklung der Blutzellbildung, der Hämatopoese, im Verlauf der CP vorhanden. Diese Modelle beschreiben die Veränderungen in der Population der blutbildenden Zellen im Verlauf der Progression der CP. JRC-COMBINE erforscht, ob bestimmte Messgrößen, so genannte Biomarker, gefunden werden können, die bei einem neu diagnostizierten Patienten das Krankheitsstadium identifizieren und im unbehandelten Fall die Progression vorhersagen können.

Zusätzlich sollen die Biomarker auf andere, ähnliche Erkrankungen übertragbar sein. Ein geeigneter Datentyp hierfür ist die genomweite Genexpression von Krebszellen, also die Aktivierung der genetischen Substanz zur Ausbildung von Strukturen und Funktionen der Zelle. Hierfür liegen bereits große Datenmengen vor. Eine Schwierigkeit bei der Entwicklung von Biomarkern auf Basis der Genexpression ist jedoch deren hohe Variabilität in Bezug auf Messprotokolle und Verfahren der Datenaufarbeitung, die einen direkten Vergleich der Daten aus unterschiedlichen Quellen problematisch macht. Dieses Problem kann aber umgangen werden, wenn zum Beispiel zwei unabhängige Biomarker gefunden werden.

Ein Biomarker für die Progression der CML in der chronischen Phase kann relativ leicht gefunden werden: Aus den Modellen ist bekannt, wie sich die Population der blutbildenden Zellen verändert. Es muss also ein Gen gefunden werden, das bei mutierten Zellen deutlich anders exprimiert wird als bei gesunden Zellen, wie zum Beispiel das Gen CD34 [3]. Mit Hilfe des Modells kann die erwartete Expression in jedem Stadium berechnet und mit den Daten eines Patienten verglichen werden. Wegen der unterschiedlichen Protokolle ist der direkte quantitative Vergleich jedoch nicht möglich. Zur Kalibrierung wird daher ein zweiter Marker gebraucht, der nicht mit dem ersten Marker korreliert und trotzdem die Krankheitsprogression reflektiert. Diese letzte Anforderung ist die eigentliche Herausforderung: Es gibt viele Gene, die in mutierten und gesunden Zellen unterschiedlich exprimiert sind und daher als Biomarker dienen könnten. Allerdings haben diese einen zu CD34 analogen Verlauf während der Progression und bieten damit keine neuen verwertbaren Informationen.

Um dies zu umgehen, wurde eine Analogie zu Phasenübergängen in der Thermodynamik untersucht, die eine deutliche Veränderung der Entropie eines komplexen Systems

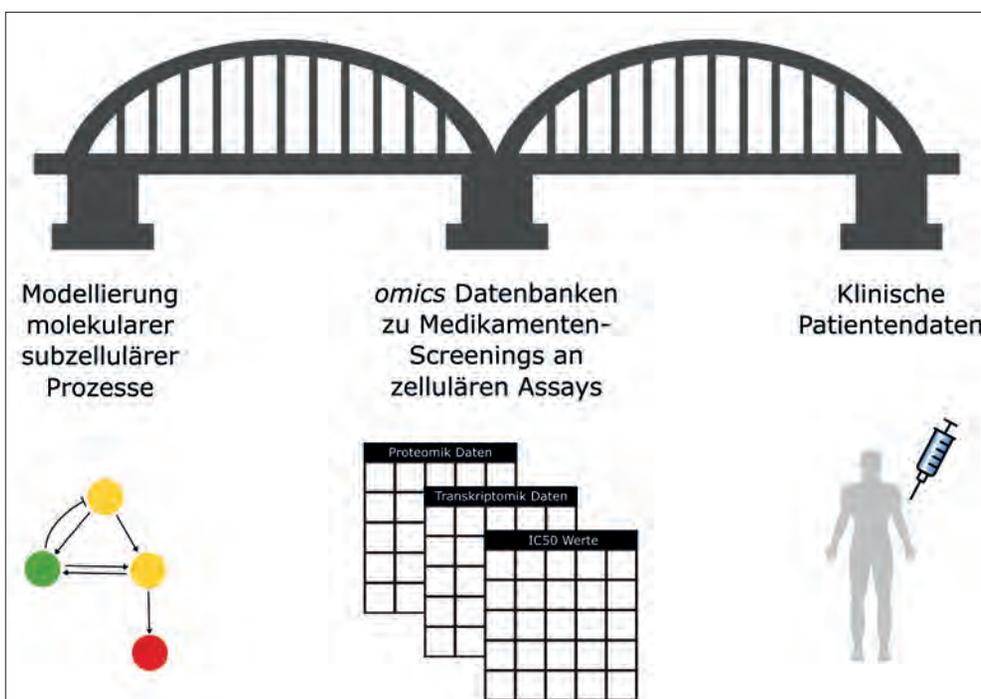


Bild 1: Aufgrund der Vielfalt der Einflussfaktoren auf die Medikamentenwirkung im Patienten benötigt die angestrebte Translation vom Labor in die klinische Praxis die Integration multipler und sehr heterogener Datenstrukturen, auf die heutzutage leicht zugegriffen werden kann. Neben systembiologischen Modellen zur Bestimmung von Medikamentenwirkungen auf molekularer Ebene müssen auch kombinatorische zelluläre Screenings und Patientendaten berücksichtigt werden.

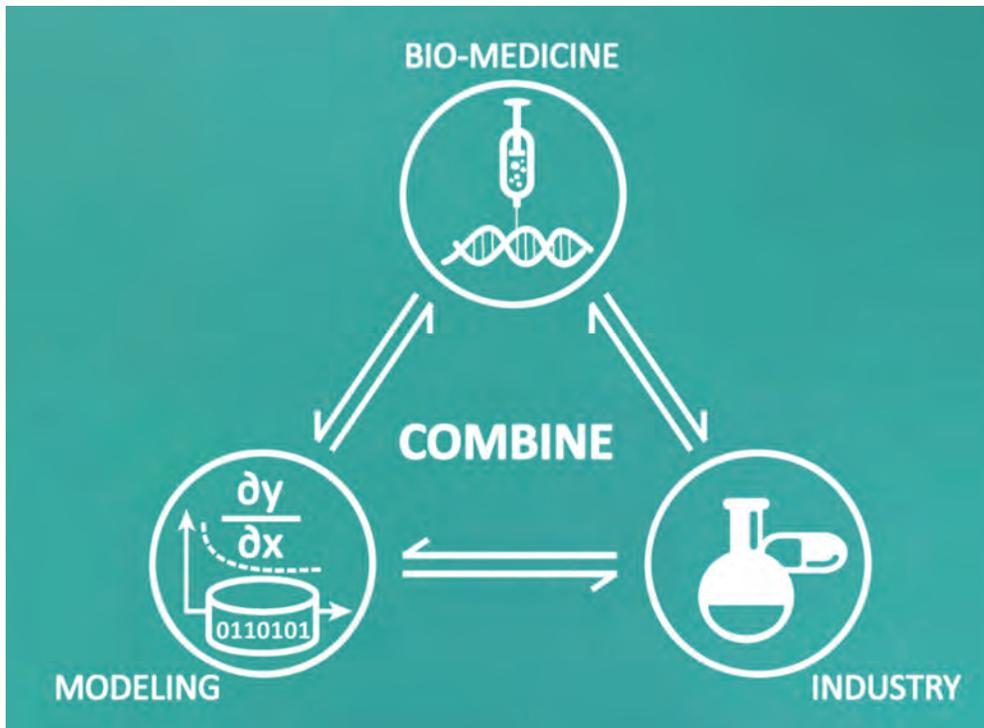


Bild 2: Das Joint Research Center for Computational Biomedicine versucht, durch mechanistische, datengetriebene und hybride Modelle molekularbiologische Prozesse mit konkreten Anwendungen in der Klinik und der Industrie zu verknüpfen und pragmatische Lösungen für die Klassifizierung und Therapie komplexer Erkrankungen zu finden.

beschreibt, wenn dieses System instabil wird. Als Analogon zur Entropie in der Thermodynamik dient für die Genexpression die Shannon-Entropie. Diese kann als Maß für die Unordnung der Expression der Gene auf dem gesamten Genom dienen. Das Ergebnis zeigt, dass diese Entropie dann minimal ist, wenn die Vielfalt der Zelltypen ein Maximum durchläuft, wohingegen die Entropie nahezu konstant ist, solange das System im selben Zustand ist [3]. Eine Simulation zeigt, dass die Shannon-Entropie der genomweiten Genexpression tatsächlich die gesuchten Eigenschaften für einen zweiten, unabhängigen Biomarker ausweist. Die Berechnungen beider Marker aus den Daten einer klinischen Studie zeigten eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Modell und erlaubten die Identifizierung einer kritischen Krankheitsphase innerhalb der bisher undifferenzierten chronischen Phase.

Ein weiteres Beispiel zur Modellierung der Progression biologischer Prozesse bietet die am JRC-COMBINE entwickelte PhysioSpace-Methode [4]. Ebenfalls mit Hilfe von Genexpressionsdaten werden dabei gewebsspezifische Signaturen entwickelt, die mit statistischen Verfahren auf ihre Ähnlichkeit zu anderen für den Anwendungsfall relevanten Signaturen untersucht werden können. Die PhysioSpace-Methode nutzt dabei die Beobachtung, dass die quantitativen Messwerte der Expression einzelner Gene zwar stark von den experimentellen Umständen und der Aufarbeitung der Originaldaten

abhängen und damit schwer zwischen verschiedenen Studien vergleichbar sind, genomweite Unterschiede in der Expression jedoch sehr robust sind und damit als Vergleichsmaßstab genutzt werden können. Die Koordinaten der einzelnen Gewebeproben sind also ungenau, die Abstände zwischen den Proben sind aber durchaus zuverlässig. Damit ist die PhysioSpace-Methode in der Lage, Daten aus heterogenen Quellen zu vergleichen und dadurch die ständig wachsenden Datenmengen leicht nutzbar zu machen. So konnte unter anderem die Differenzierung von Stammzellen in neuronales und kardiales Gewebe nachverfolgt und analysiert, aber auch die Entwicklung von Tumoren in den verschiedenen Stadien untersucht werden [4]. Der PhysioSpace-Algorithmus kann nicht nur für biomedizinische Fragestellungen eingesetzt, sondern auch in einer modifizierten Variante benutzt werden, um Stresszustände bei Pflanzen zu untersuchen [5].

Diese Ergebnisse sind nur ein Beispiel dafür, wie Konzepte aus der Theorie komplexer Systeme helfen können, neue Lösungen für biomedizinische Fragestellungen zu finden. In Kombination mit heutzutage verfügbaren hochdimensionalen Datensätzen erlauben diese Konzepte ein profundes Verständnis komplexer Systemkrankheiten, welches erfolgreich in verbesserte Therapieprotokolle umgesetzt werden kann.

#### Literatur

- [1]. Hutchinson, L. and R. Kirk, High drug attrition rates - where are we going wrong? *Nature Reviews Clinical Oncology*, 2011. 8(4): p. 189-190.
- [2]. Calabretta, B. and D. Perrotti, The biology of CML blast crisis. *Blood*, 2004. 103(11): p. 4010-22.
- [3]. Brehme, M., et al., Combined Population Dynamics and Entropy Modelling Supports Patient Stratification in Chronic Myeloid Leukemia. *Scientific Reports*, 2016. 6: p. 24057.
- [4]. Lenz, M., et al., PhysioSpace: relating gene expression experiments from heterogeneous sources using shared physiological processes. *PLoS One*, 2013. 8(10): p. e77627.
- [5]. Mass, J., B. Schuldt, and A. Esfahani. *Plant PhysioSpace*. [cited 2017 01.02.2017]; Available from: <http://plabipd.de/physiospace/>.

---

#### Autoren

Univ.-Prof. Dr. rer. nat. **Andreas Schuppert** ist Inhaber des Lehrstuhls für Datengetriebene Modellierung in der Computational Engineering Science und Leiter einer Forschungsgruppe am Joint Research Center for Computational Biomedicine der RWTH Aachen.

Lisa Turnhoff, Nina Kusch, Maryam Montazeri und Ali Esfahani, alle M.Sc., gehören zu dieser Forschergruppe.

---

Lieber digital statt analog? Gestalten Sie mit Ihren Software-Ideen Zukunft.

[www.start-a-remarkable-career.de](http://www.start-a-remarkable-career.de)

**Willkommen bei Bosch. Hier bewegen Sie Großes.** Ob beim Thema Internet der Dinge, automatisiertes Fahren oder Smart Home Applikationen: Wir setzen immer wieder neue Maßstäbe durch Ideen für eine vernetzte Zukunft. Das gelingt nur mit einem globalen Netzwerk von über 375.000 hoch engagierten Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern, die vordenken und täglich fachliches Neuland betreten. **Starten auch Sie etwas Großes.**

Let's be remarkable.

# Der Shi Code

## Data Mining als Schlüsselkompetenz der Zukunft

Xiahan Shi schreibt Codes, mit denen aus unendlichen Datenmengen Wissen wird. Ihre Algorithmen sagen zum Beispiel vorher, welche Autos wann mit welchen Problemen in die Werkstatt müssen. Große Datenmengen gezielt auszuwerten (Data Mining) ist eine Schlüsselkompetenz der Zukunft.

Data Mining hilft auch, Industrieprozesse zu verbessern: Produktionslinien werden vernetzt. Sensoren liefern Daten, Algorithmen erkennen darin drohende Schäden an den Maschinen und geben im Voraus wichtige Hinweise zur rechtzeitigen Wartung.

**Technisch ist das extrem anspruchsvoll.** „Die notwendigen Algorithmen sind zwar schon lange bekannt“, erklärt Xiahan Shi. „Aber erst jetzt können wir



ausreichend Daten sammeln. Zudem sind die Rechner mittlerweile so leistungsstark, dass sie die Algorithmen auf mehrere Milliarden Datenpunkte anwenden.“ Das wird möglich, indem aus vielen Servern zusammengeschaltete Cluster auf tausenden Prozessoren parallel rechnen. Bosch betreibt international mehrere solcher Cluster. Exper-

ten wie Xiahan Shi kommt eine Schlüsselrolle zu: Sie müssen die Rechner so programmieren, dass sie Milliarden Daten effizient und parallel abarbeiten.

Bei Bosch steht Xiahan Shi täglich in Kontakt mit Kollegen aus den unterschiedlichsten Feldern. „Bosch hat so viele Geschäftsbereiche. In Renningen vernetzen sich Forscher aller Disziplinen. Außerdem arbeiten wir eng mit unserem Team im Silicon Valley und Kooperationspartnern wie der Stanford University zusammen.“

**„Wir können hier wirklich bemerkenswerte Innovationen schaffen“**, sagt Xiahan Shi, die selbst Mathematik studiert hat.

Und der Bedarf an qualifizierten Software-Experten wie Xiahan Shi steigt. Was die Datenwissenschaftler können müssen? „Sie müssen sich mit Software auskennen und diese auch selbst schreiben können. Zudem müssen sie Mathematik, Statistik und maschinelles Lernen verstehen.“

Bild 1: Interaktive Analyse und Beschreibung eines Gittermodells für das Perth Basins in Australien, durchgeführt in der aixCAVE zur besseren Visualisierung der dreidimensionalen Strukturen.

Foto: Peter Winandy

Florian Wellmann

# Wie gut kennen wir die Welt unter unseren Füßen?

Geowissenschaftliche Modellierungen und Simulationen sowie die statistische Analyse von Unsicherheiten

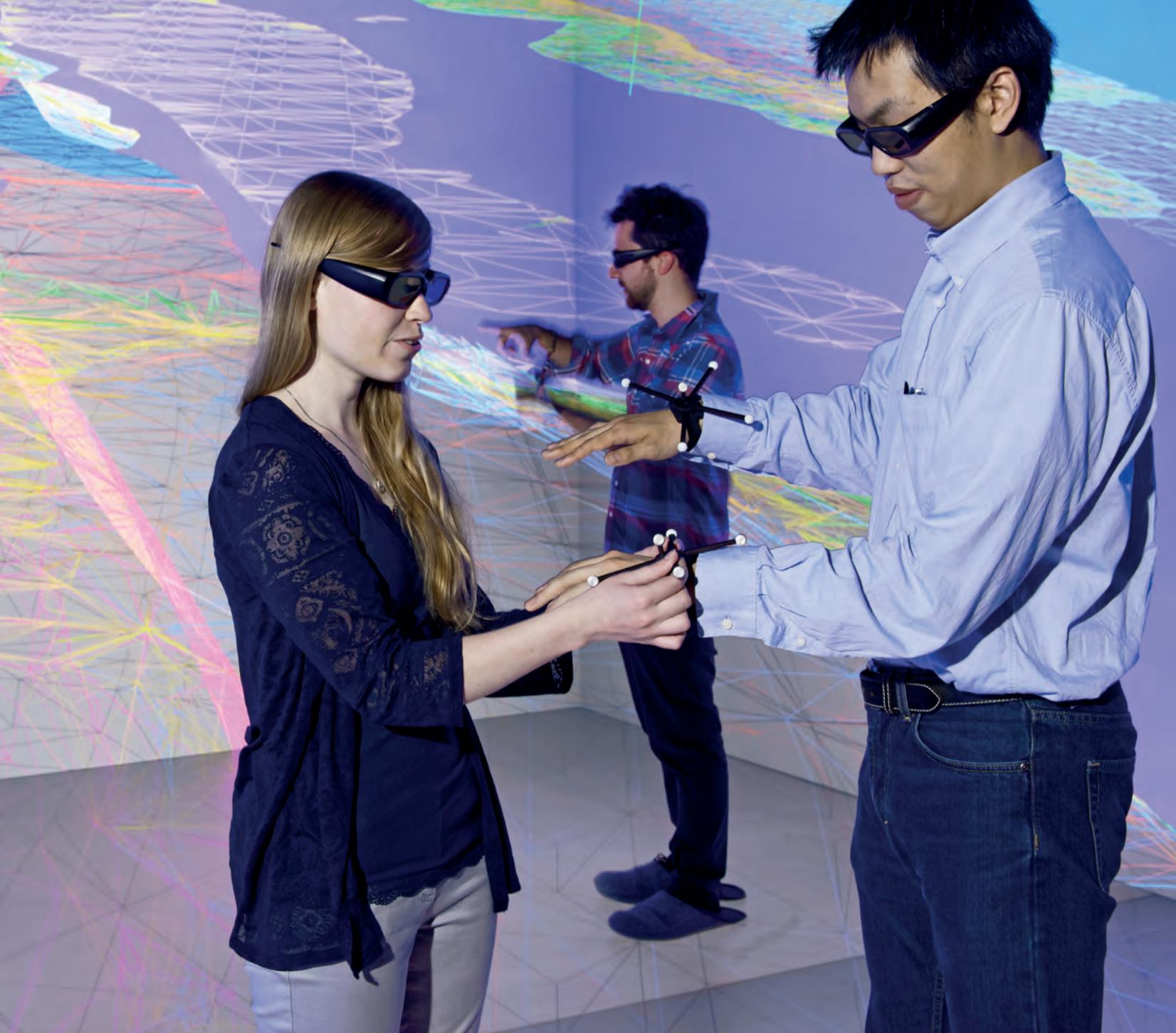
Accurate predictions about the subsurface are as essential as weather forecasts: they help us locate groundwater and energy resources, form the basis for underground engineering, and guide the search for critical raw materials. However, our knowledge about the subsurface is fragmented, to say the least: while we may know in great detail about rocks and their physical properties around a borehole, in most other areas we have to rely on indirect observations, geophysical measurements, and assumptions based on the overall geological setting. However, in the end we have to be able to estimate how good our predictions about the subsurface are – and a robust estimation of the involved uncertainties is paramount for any subsequent engineering application and usage.

In the research group of Junior Professor Florian Wellmann, novel modelling and simu-

lation methods in the area of computational geosciences are developed and adapted to address predictions in subsurface systems. Our research encompasses advanced geological modelling techniques, including the quantification of uncertainties and integration into state-of-the-art probabilistic programming frameworks. One important aim is the integrated analysis of geological and geophysical observations and measurements, for example in the analysis of geothermal systems. Another example is the characterization of subsurface soil patterns for a better prediction of soil-atmosphere interactions in climate simulations. In summary, the goal is always to provide predictions about subsurface systems with the best possible integration of all information and an estimate of uncertainties – to enable the most efficient and sustainable use of one of our most precious resources: the subsurface.



In vielen Bereichen der Erde ist unser Wissen über den Untergrund nur bruchstückhaft. Man muss regelrecht den Hut davor ziehen, mit wie viel Akribie und Hingabe Geowissenschaftler über hunderte von Jahren hinweg Informationen und Beobachtungen bis ins kleinste Detail zusammengetragen haben, um unser Wissen über die Erde, ihre Entstehung und Entwicklung, das Werden und Vergehen von Gebirgen und Kontinenten besser zu verstehen. Sie haben damit einen wesentlichen Beitrag dazu geleistet, dass wir heute zumindest eine Vorstellung davon haben, wie es unter der Erdoberfläche aussieht. Da wir allerdings im Regelfall keine direkte Möglichkeit haben, in den Untergrund zu schauen, ist diese Vorstellung mit Unsicherheiten belastet. Um aussagekräftige Vorhersagen zu machen, müssen diese Unsicherheiten genau betrachtet werden. Denn ähnlich wie bei einer Wetter-



vorhersage wollen wir nicht nur eine einfache Prognose haben, sondern auch wissen, wie gut diese Prognose ist, da jede Maßnahme zur Nutzung des Untergrundes aufwändig sowie teuer ist und aus Gründen der Nachhaltigkeit genau abgewägt werden sollte. Wenn Geowissenschaftler ein neues Gebiet untersuchen, beispielsweise bei der Suche nach Grundwasser, kritischen Rohstoffen oder tiefen Speichermöglichkeiten (siehe auch die Beiträge im RWTH THEMEN 2/2016), dann erfolgt dies auf der Grundlage einer erheblichen Menge an Vorwissen, punktuellen Beobachtungen in Bohrungen und geophysikalischen Messungen. Allerdings passen diese Betrachtungen nicht immer hundertprozentig zusammen. Dazu kommt, dass zum Beispiel eine Bohrung nur sehr punktuell genaue Informationen gibt. Um bei einer bekannten Redewendung zu

bleiben: Bildlich gesprochen suchen wir nicht die Nadel im Heuhaufen. Wir versuchen vielmehr, den Heuhaufen zu verstehen, obwohl wir nur wissen, wie es um die Nadel herum aussieht. Die Erkundung des Untergrundes gleicht in diesem Sinn einem großen Puzzle, in dem Informationen unterschiedlicher Genauigkeit und Aussagekraft sinnvoll zusammengefügt werden müssen. Daraus entsteht letztendlich ein Bild der Verteilung bedeutender geologischer Einheiten und Strukturen sowie ein Verständnis der physikalischen Gesteinseigenschaften – häufig in Form von 3D-Modellen –, auf deren Basis dann eine ingenieurtechnische Nutzung ausgearbeitet werden kann. Da diese Modelle auf Daten mit sehr ungleichmäßiger räumlicher Verteilung sowie stark unterschiedlicher Qualität beruhen, ist es nachvollziehbar, dass die Modelle nicht überall exakt sein können. Und es ist

konsequent zu fragen, wie Unsicherheiten in den Modellen sich auf die weitere Nutzung auswirken können.

Die Arbeitsgruppe „Numerisches Reservoir Engineering“ am Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES) geht unter anderem dieser Frage mit neuen Theorien zur computergestützten Modellierung und Simulation von geologischen Systemen und Analyse von Unsicherheiten auf den Grund. Im Folgenden zeigen einzelne Projekte die Durchführung dieser Analysen.

Ein Bereich, in dem diese Betrachtungen relevant sind, ist die geologische Modellierung und numerische Simulation von geothermischen Systemen. Um die Verteilung von Gebieten mit günstigen Temperaturen und Gesteinsbedingungen im Untergrund aufzufinden, müssen sowohl die physikalischen



Bild 2: Geophysikalische Feldmessungen, elektrische Widerstandsmessungen (Vordergrund) und Bodenradarmessungen (Hintergrund), zur Analyse von oberflächennahen Strukturen auf einer landwirtschaftlich genutzten Fläche bei Düren in einem Projekt mit dem Forschungszentrum Jülich (IBG-3).

Foto: Peter Winandy





Gesteinseigenschaften, wie auch die räumliche Verteilung bedeutender Fluid- und Wärmeleiter verstanden werden. Unsicherheiten in diesen Parametern führen dann zu Unsicherheiten in einer abgeleiteten Prognose. Die Arbeitsgruppe trägt zu einer besseren quantitativen Abschätzung der Prognosegenauigkeit bei, indem diese Unsicherheiten mit modernen statistischen und numerischen Methoden systematisch analysiert werden. Damit ist es beispielsweise möglich, 3D-geologische Modelle zusätzlich mit einer Darstellung von Unsicherheiten zu versehen, die dann im weiteren technischen Planungsablauf berücksichtigt werden können. Ein weiteres Beispiel ist die gekoppelte Inversion von geophysikalischen Messungen und geologischen Beobachtungen – beispielsweise bei der Suche nach Grundwasser oder auch der Exploration nach bedeutenden mineralischen Rohstoffen. In diesen

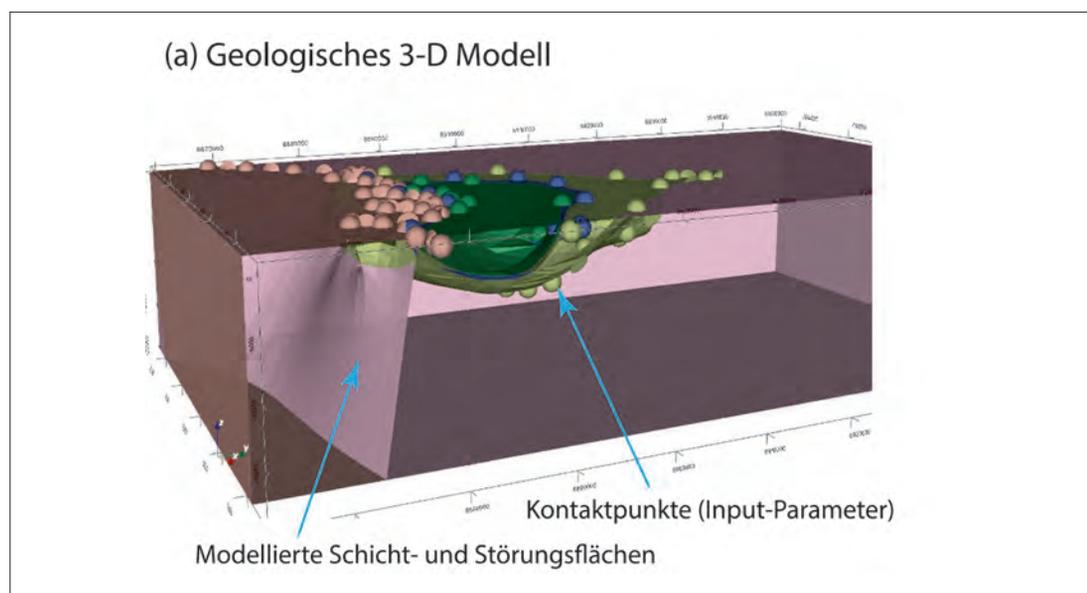


Bild 4: a) Dreidimensionales geologisches Modell eines Greenstone Gürtels. Hervorgehoben sind die modellierte Oberfläche (linke Seite) und die Eingabeparameter in Form von Kontaktpunkten. b) Verteilung der Unsicherheiten nach Durchführung der Optimierung. Die Entropie ist ein Maß für die Ungenauigkeit und weist die höchsten Werte an den Schichtgrenzen auf.



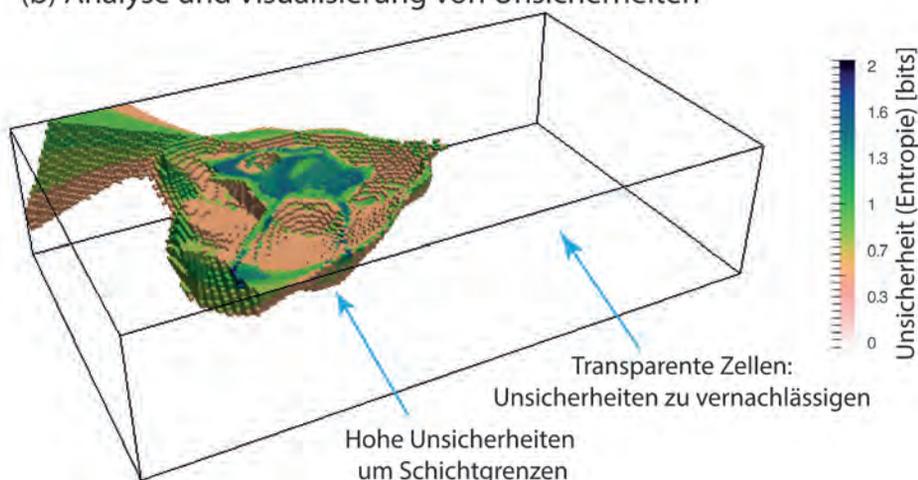
Bild 3: Geologische Untersuchung und Diskussion eines bedeutenden Grundwasserleiters (dargestellt in lila) des Perth Basins in Australien. Die Analyse erfolgt in der aixCAVE zur genaueren Erfassung der komplexen dreidimensionalen Geometrie.

Foto: Peter Winandy

Anwendungen werden regelmäßig geophysikalische Messungen verwendet, um die Lage von geeigneten Strukturen in der Tiefe zu bestimmen. Allerdings werden bisher selten geophysikalische Messungen direkt mit geologischen Beobachtungen zusammengebracht. In den letzten Jahren wurden neuartige Methoden entwickelt, mit welchen es jetzt nicht nur möglich ist, diese Daten integrativ zu betrachten, sondern zusätzlich auch die damit verbundenen Unsicherheiten zu analysieren. Dabei kommen auch neueste mathematische Methoden zum Zug, die unter anderem gemeinsam mit weiteren Arbeitsgruppen am AICES entwickelt werden. Der Untergrund ist nicht vollständig zufällig entstanden, sondern als Folge von Prozessen, die zu einer gewissen Regelmäßigkeit geführt haben und die sich heute beispielsweise in Gebirgen gut beobachten lassen. Es ist nur konsequent zu erwarten, dass eine genaue Analyse dieser Regelmäßigkeiten beziehungsweise Muster dabei helfen sollte, Unsicherheiten zu verringern. Dieser Weg wird realisiert in einem Projekt, in dem neueste statistische Methoden verwendet werden, um Muster aus geophysikalischen Messungen zu extrahieren und im Folgenden mit Daten der Fernerkundung zu verbinden. Letztendlich ist

das Ziel, mit dieser Kombination Vorhersagen zur Verteilung von Bodenmustern ohne aufwändige und teure detailgenaue Messungen in allen Bereichen zu erstellen. Diese Information kann dann dazu führen, präzise Daten an geeigneten Stellen zu erheben, um die Unsicherheiten zu verringern. Ein altes Bergmannssprichwort besagt: „Vor der Hacke ist es duster“ – bei der Komplexität, die im Bereich der Analyse des Untergrundes immer vorhanden ist, ist verständlich, dass dieses Sprichwort einen bedeutenden Kern hat. Allerdings erlauben eine Vielzahl unterschiedlicher geophysikalischer Messmethoden, ein quantifiziertes Verständnis des Systems sowie eine systematische Analyse in gekoppelten numerischen Modellen, im wahrsten Sinn des Wortes „Licht ins Dunkel“ zu bringen – wenn auch etwas diffus. Denn genau wissen, wie es unter unseren Füßen aussieht, das werden wir nie. Allerdings bekommen wir ein immer besseres quantifizierbares Bild davon, wie genau die Vorhersagen sind – ein essenzieller Aspekt für die langfristig nachhaltige Nutzung einer kostbaren Ressource: dem Untergrund.

### (b) Analyse und Visualisierung von Unsicherheiten



### Autor

Prof. Dr. Florian Wellmann ist Juniorprofessor für Numerisches Reservoir Engineering.

# Faszination Kryosphäre

## Simulationsmodelle für die Erforschung von Eiswelten

Water means life – even ‘hostile-to-life’ environments, such as the dark and cold subglacial aquatic ecosystems underneath Antarctic ice sheets, have proven to be vivid ecosystems. This fuels speculations that the presence of liquid water on the icy moons of our Solar System also bears some potential for the development of life. Astrobiologically interesting candidates are the Saturnian moon Enceladus (see figure 1) and the Jovian moon Europa.

Advanced mission scenarios for direct exploration of the icy moons suggest to deploy a robotic exploration probe that melts into the subsurface for the purpose of data collection and sampling of subglacial water [1]. A sound understanding of the probes’ dynamics and the evolution of its ambient cryo-environment is key to any such mission.

The group ‘Mathematical and Numerical Methods in Geoscience’ at AICES develops advanced simulation technologies tailored to assess, evaluate and extrapolate the dynamics of robotic ice exploration probes for terrestrial and extraterrestrial use. From a scientific computing perspective, we are facing the following challenges:

1. presence of multiple scales: micro-scale melt film vs macro-scale melt channel evolution
2. multi-physics character: phase-change process with coupled mass, momentum and heat transport under terrestrial as well as extraterrestrial conditions (low pressure, gravity and temperature)
3. rigid body motion through an evolving ambient cryo-environment
4. exerted contact forces that imply a non-local coupling

This article describes our current progress on the way towards a holistic robotic melting probe simulation model. We describe a ‘divide-and-conquer’ strategy, in which we separately consider the micro-scale thermal contact processes, and a macro-scale phase-change model for the channel evolution. In the future, we intend to join our current efforts into a holistic simulation model. We will conclude by briefly discussing the relevance of this research beyond the field of robotic cryosphere exploration, e.g. for studying terrestrial and planetary surface processes, or, outside the geosciences, for quantifying processes in latent heat storage systems as well as in production technology.

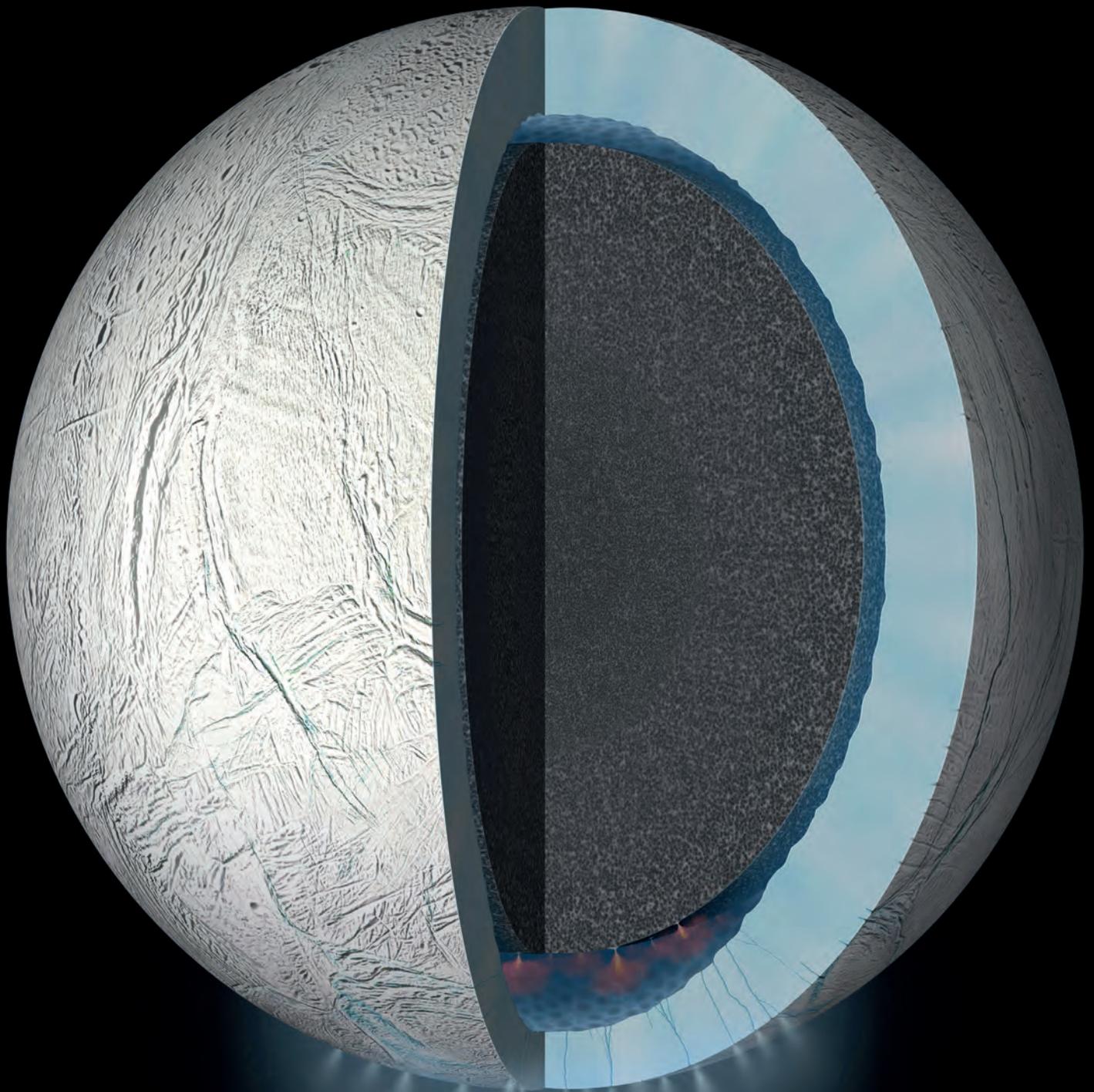


Bild 1: Schematisch dargestellte interne Struktur des Saturnmondes Enceladus. Unter der Eisschicht wird ein globaler Ozean aus flüssigem Wasser vermutet. Am Südpol ist aktiver Kryovulkanismus zu beobachten. Die Zusammensetzung des vulkanischen Auswurfmaterials lässt auf hydrothermale Quellen am Meeresgrund schließen.

Quelle: NASA/JPL-Caltech (<http://photojournal.jpl.nasa.gov/catalog/PIA20013>)



Wasser ist Leben! Dass das Leben auf der Erde ursprünglich in den Ozeanen entstanden ist, gilt als unumstritten. Allerdings sind nicht alle marinen (oder ursprünglich marinen) Ökosysteme gleichermaßen leicht für die Erforschung zugänglich. Neben der Tiefsee sind hier vor allem auch die subglazialen Wasservorkommen in der Antarktis zu nennen. Diese konnten erst im letzten Jahrzehnt durch sehr aufwändige Bohrprojekte, beispielsweise am Lake Whillans und am Lake Vostok, direkt erforscht werden. Bei beiden subglazialen Gewässern wird vermutet, dass es sich um ehemals marine Ökosysteme handelt, welche seit Jahrmillionen isoliert und von der Außenwelt abgeschlossen waren. Deren Erforschung ist von großem wissenschaftlichen Interesse und gleicht einem Blick in die Vergangenheit unserer Erde [2].

Subglaziale Wasservorkommen gibt es allerdings nicht nur auf der Erde, sondern auch auf anderen Himmelskörpern unseres Sonnensystems. Trotz der extrem lebensfeindlichen Bedingungen unter den Eisschilden der Antarktis ist dort nachweislich Leben möglich. Deswegen wird vermutet, dass sich auch in den Ozeanen der Eismonde unseres Sonnensystems Leben entwickelt haben könnte. Astrobiologisch interessante Kandidaten sind der Jupitermond Europa und der Saturnmond Enceladus mit jeweilig reichhaltigen Eis- und Wasservorkommen und – im Fall von Enceladus – nachgewiesenem aktiven Kryovulkanis-

mus. Die gemeinsame Vision der im nächsten Jahrzehnt startenden Explorationsmissionen JUICE (ESA) und „Europa Multiple Flyby“ (NASA) ist daher die Suche nach einfachem Leben an diesen Orten.

### Intelligente Explorationsrobotik

JUICE und „Europa Multiple Flyby“ werden sich auf Beobachtungen aus dem Orbit beziehungsweise eine einfache Landungsmission mit oberflächennahen Messungen beschränken. Bereits jetzt werden allerdings auch schon die Grundsteine für eine nächste Generation von Explorationsmissionen gelegt, deren Ziel die direkte subglaziale Probenentnahme ist. Gängige Missionskonzepte basieren auf der Idee eines sich autonom durch das Eis schmelzenden Roboters. Dieser soll Proben erkennen, ansteuern und entnehmen sowie mit Sensorik für in situ, also an Bord des Roboters durchzuführende Auswertungen, ausgestattet sein. Die Herausforderungen bei der Entwicklung eines solchen Roboters sind zahlreich. Grundsätzlich ist das Problem der Energieversorgung zu klären. Darüber hinaus stellt sich bei navigierbaren Schmelzrobotern die Frage nach der Steuerung. Wie reagiert der Roboter auf eine Änderung der Heizerkonfiguration und den Einsatz bestimmter Aktoren? Nicht zuletzt will man den Roboter exakt lokalisieren, um damit eine Richtungsänderung überhaupt erst zu ermöglichen. All diese Anforderungen

Bild 2: Beispiel einer robotischen Schmelzsonde, entwickelt im Fachbereich Luft- und Raumfahrttechnik der Fachhochschule Aachen.

Quelle: Clemens Espe, Fachhochschule Aachen.

Bild 3: Miniaturisierte Schmelzsonde vor dem Exponat eines visionierten Explorationsszenarios auf dem Saturnmond Enceladus. Der Laptopbildschirm zeigt das Gletschercamp eines vergangenen Feldtests auf dem Hofsjökull in Island. Mitarbeiter von oben nach unten: Gero Francke\*, Julia Kowalski\*\*, Fabian Baader\*, Marco Feldmann\*, Kai Schüller\*\* (\*Fachbereich Luft- und Raumfahrttechnik der FH Aachen, \*\* AICES, RWTH Aachen)  
Foto: Peter Winandy



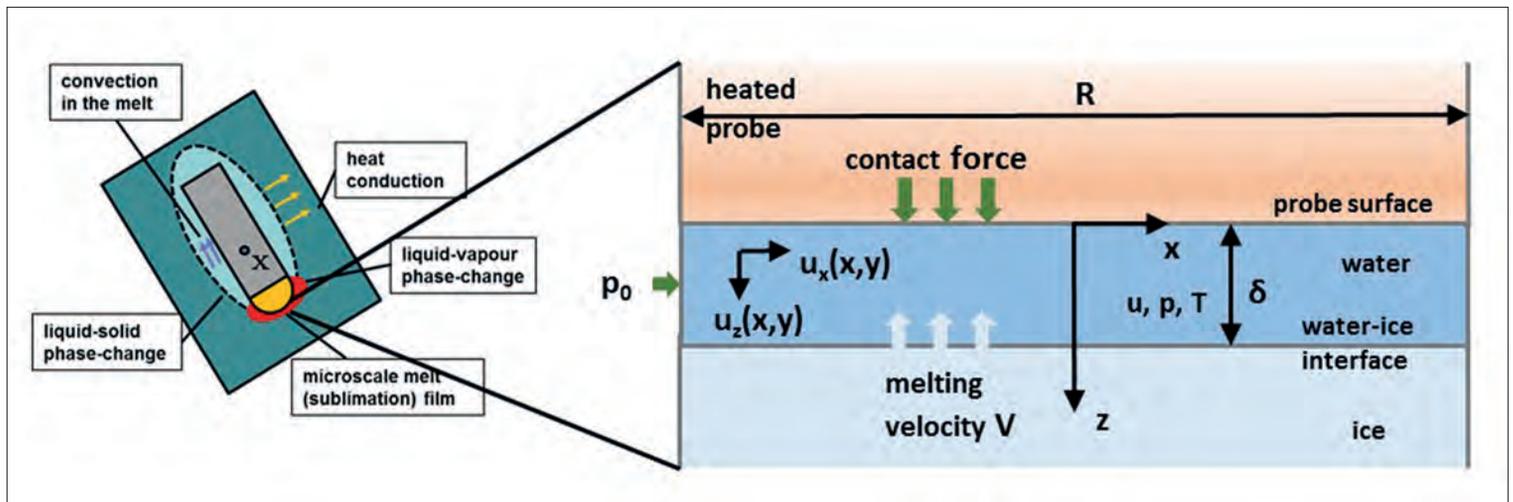


Bild 4: Um den Schmelzprozess modellieren und simulieren zu können, müssen sowohl der mikroskalige Schmelzfilm vor der Sonde als auch die makroskaligen Strömungs-, Wärmetransport- und Phasenübergangsprozesse im Schmelzkanal betrachtet werden. Deshalb ist es sinnvoll, die Prozesse skalengetrennt zu betrachten.

bedürfen robuster, flexibel einsetzbarer Simulationsmethoden zur Berechnung des dynamischen Verhaltens eines Schmelzroboters im Eis, um zum Beispiel Schmelzgeschwindigkeit und Schmelzrichtung vorherzusehen. Solche Simulationsmethoden werden derzeit am Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES) in der Nachwuchsgruppe „Mathematische und Numerische Methoden in den Geowissenschaften“ mit finanzieller Unterstützung durch das Raumfahrtmanagement des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt DLR entwickelt.

#### Einschmelzen ins Eis – ein Mehrskaligen-Prozess

Reale Schmelzroboter, wie sie beispielsweise bereits in der Antarktis verwendet wurden [3,4] oder demnächst miniaturisiert in Vakuumkammerexperimenten eingesetzt werden, siehe Bild 2, sind sehr komplex. Stark vereinfacht kann man sich allerdings auch eine beliebige Wärmequelle vorstellen, welche auf dem Eis liegt, dasselbe aufheizt und damit zum Schmelzen bringt. In der Folge sinkt die Wärmequelle durch ihr eigenes Gewicht immer weiter ins Eis. Das Schmelzwasser strömt an der Wärmequelle vorbei und füllt den Schmelzkanal auf. Dieser kann abhängig von den herrschenden Umgebungsbedingungen nach einiger Zeit wieder zufrieren. Der Schmelzfilm vor dem Roboter ist nur einige Mikrometer dick, wohingegen der Schmelz-

kanal die Maße des Sondenquerschnittes aufweist (also im Zentimeter bis Dezimeterbereich). Deshalb ist es sinnvoll, die Prozesse skalengetrennt zu betrachten.

#### Thermales Kontaktschmelzen

Indem die Wärmequelle auf dem Eis aufliegt, übt sie – abhängig von Gewicht und Geometrie – eine Kraft auf die Eisoberfläche aus. Wenn sie nun gleichzeitig das umliegende Eis zum Schmelzen bringt und „nachsinkt“, bildet sich unterhalb der Wärmequelle ein sehr dünner Schmelzfilm. Durch diesen Film hindurch wird Wärme in das Eis transportiert und führt dort zum Schmelzen. Gleichzeitig wird die flüssige Schmelze aber auch mit hoher Geschwindigkeit seitlich aus dem Schmelzfilm gepresst. Ein Teil der Wärme geht so verloren. Man spricht von konvektiven Verlusten. Das heißt, Wärme wird mit der Strömung abtransportiert und kann nicht mehr für den Phasenübergang eingesetzt werden. Um diesen Prozess zu simulieren, werden Gleichungen der Schmierfilmtheorie an Gleichungen gekoppelt, welche die Wärmeleitung beschreiben. Die Herausforderung besteht darin, die durch den Schmelzroboter ausgeübten Kräfte korrekt zu berücksichtigen, was einer nicht-lokalen Kopplung der Gleichungen entspricht [5,6].

Primäres Ziel des Simulationsmodells ist die Quantifizierung des Kontaktschmelzprozesses für verschiedene Sondendesigns und Umgebungsbedingungen, also beispielswei-

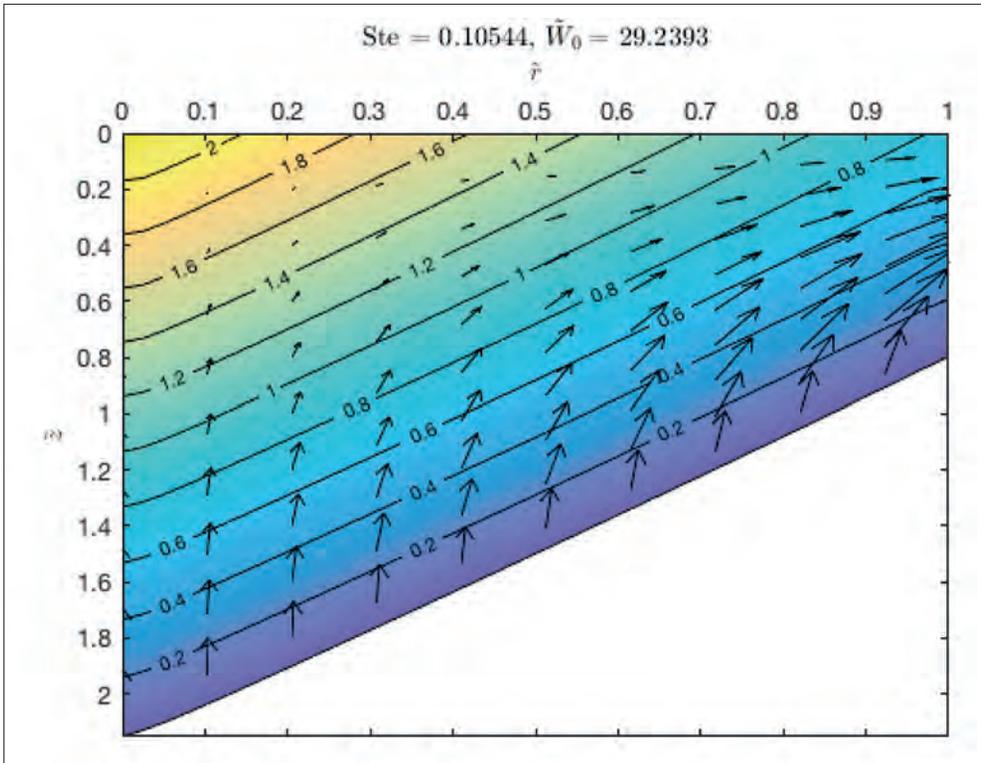


Bild 5: Strömungsfeld und Temperaturverteilung im Schmelzfilm unter Berücksichtigung einer linearen Heizleistungsverteilung. Die Schmelzfilmdicke ist stark überzeichnet. Man sieht, wie die Schmelze am rechten Rand ausströmt.

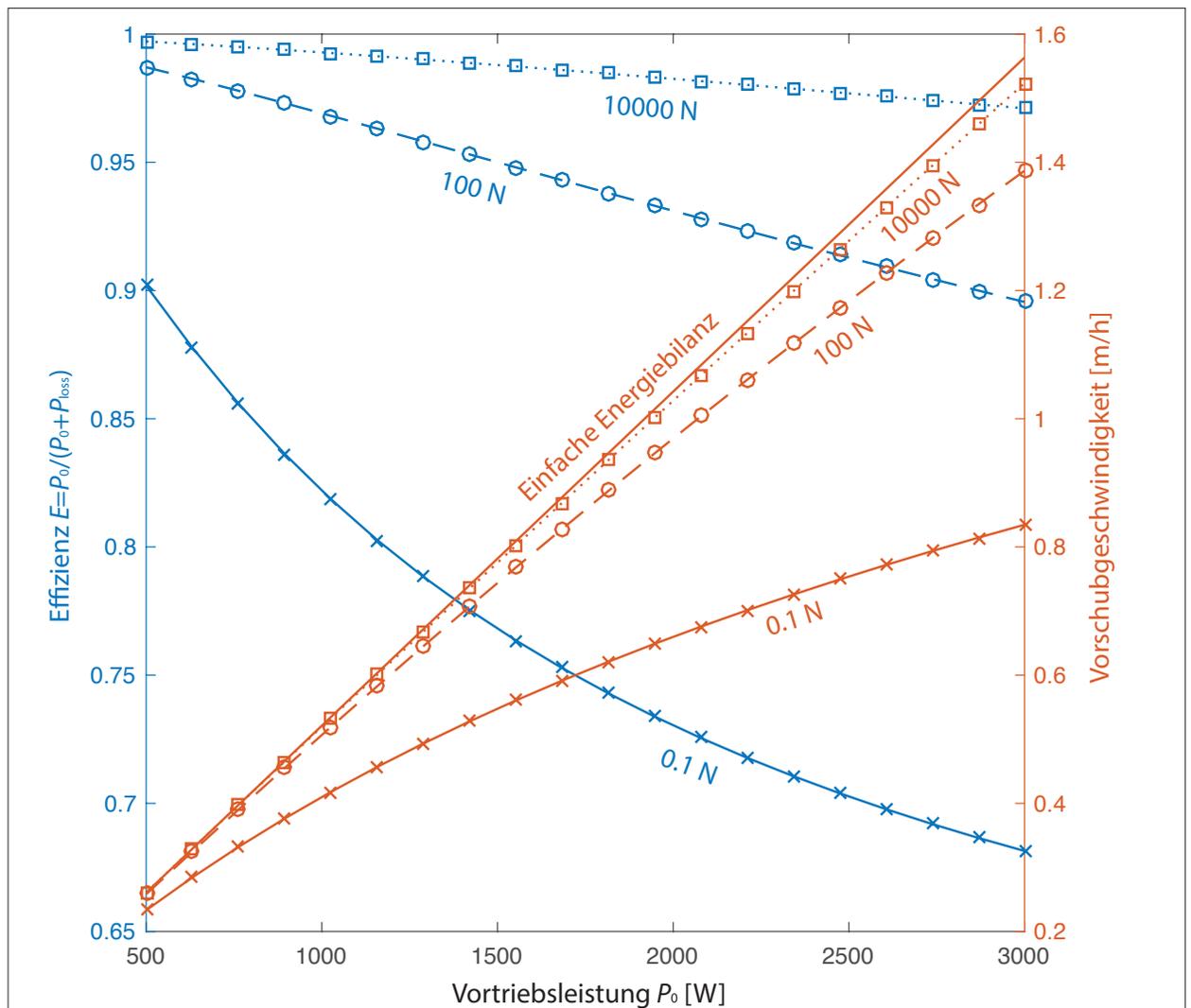


Bild 6: Effizienz (blau) und Schmelzgeschwindigkeit (rot) einer zylindrischen Schmelzsonde als Funktion der realisierten Heizleistung. Die verschiedenen Datenlinien entsprechen verschiedenen Kontaktkräften. Man sieht, dass mehr Heizleistung die Schmelzgeschwindigkeit zwar ansteigen lässt, das Schmelzen aber weniger effizient stattfindet.

Quelle: Modifizierte Grafik aus [6].

Bild 7: Schmelzsonde 'IceMole', welche im Rahmen eines gemeinsamen Feldtests des Enceladus Explorer Verbundes der DLR Raumfahrtagentur und des US-amerikanischen MIDGE (Minimally Invasive Direct Glacial Exploration) Projektes im Jahr 2014 zur subglazialen Probenentnahme in der Antarktis eingesetzt wurde. Mitarbeiter von links nach rechts: Marco Feldmann, Bernd Dachwald, Fabian Baader, Gero Francke (alle Fachbereich Luft- und Raumfahrttechnik, FH Aachen), Julia Kowalski, Kai Schüller (beide AICES, RWTH Aachen).  
Foto: Peter Winandy





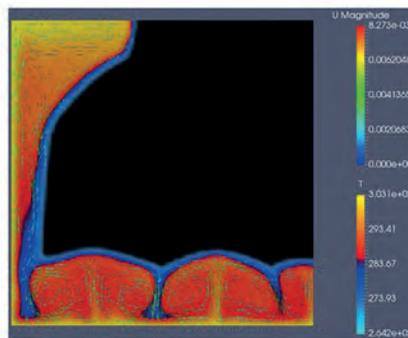
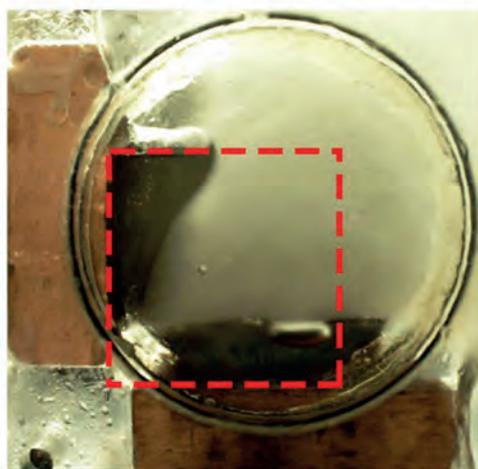
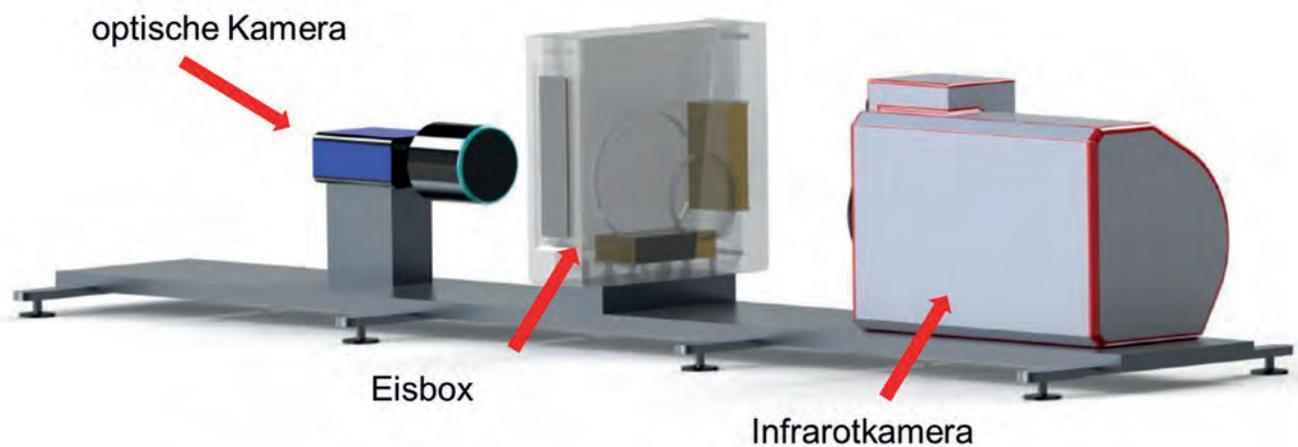


Bild 8: Vergleich unserer Simulationsergebnisse (unten rechts) mit den experimentellen Resultaten eines Laborexperiments. Der experimentelle Aufbau wurde nach unseren Vorgaben gemeinsam mit der Gesellschaft für Systementwicklung und Instrumentierung mbH (GSI), Aachen, entwickelt (siehe CAD Modell oben). Mit der Durchführung der Experimente wurde das Raumfahrtlabor der FH Aachen beauftragt, welches über die notwendige Infrastruktur verfügt.

Quelle oben: GSI mbH, Aachen

se die Berechnung von Schmelzgeschwindigkeit und Schmelzfilmdicke für eine heizergesteuerte, zylindrische Schmelzsonde. Das lässt sich in einem zweiten Schritt natürlich direkt in die Effizienz des Schmelzvorganges übersetzen.

Eine der zukünftigen Herausforderungen wird die Anpassung der Modelle auf Weltraumbedingungen sein. Durch die nicht vorhandene Atmosphäre ist der Umgebungsdruck auf den Oberflächen von Enceladus und Europa praktisch Null. Statt einem Phasenübergang von festem Eis zu flüssigem Wasser ist daher ein Phasenübergang von festem Eis zu Wasserdampf zu modellieren.

### Evolution des Schmelzkanales

Das Schmelzwasser, das aus dem Kontaktschmelzfilm „herausgepresst“ wird, umströmt die Schmelzsonde und füllt den Schmelzkanal mit Wasser auf. Für die Missionsplanung, aber auch für die spätere Auswertung der Sensordaten, sind ein genaues Verständnis des Strömungsfeldes im Kanal sowie dessen

eventuelles Wieder-Zufrieren wesentlich. Dafür werden Simulationsmodelle für gekoppelte Strömungs- und Phasenübergangsprozesse genutzt. Im Falle von Wassereis ist es dabei wichtig, die Dichte-Anomalie zu berücksichtigen. Aufgrund der Prozesskomplexität werden die Modelle mit maßgeschneiderten Laborexperimenten validiert, die den gekoppelten Strömungs- und Phasenübergangsprozess unter kontrollierten Bedingungen abbilden. In der Zukunft soll das mikroskalige Kontaktschmelzmodell mit dem makroskaligen Phasenübergangsmodell gekoppelt werden, um so eine ganzheitliche Simulation des sich einschmelzenden Eisroboters zu ermöglichen.

### Die „Enceladus Explorer Initiative“

Im Rahmen der „Enceladus Explorer (EnEx) Initiative“ des DLR-Raumfahrtmanagements werden Schlüsseltechnologien für eine robotische Schmelzexplorationsmission der Eismonde entwickelt. Mit der Erforschung innovativer Simulationsmethoden ist die

Nachwuchsgruppe „Mathematische und Numerische Methoden in den Geowissenschaften“ am AICES Teil dieser Initiative. Durch die EnEx-Initiative ergeben sich verschiedene Möglichkeiten zur Validierung der Simulationsmodelle mit realen Datensätzen vergangener Feldtests (Alpengletscher, Island und Antarktis), sowie zukünftig auch mit Resultaten aus Schmelzexperimenten unter Niedrigdruck- und Niedrigtemperaturbedingungen (EnEx-nExT, FH Aachen). In der EnEx-Initiative bündeln sich darüber hinaus aber auch instituts- und standortübergreifende Aktivitäten. Beispielsweise macht die am AICES entwickelte Software möglich, künstliche Schmelzpfade zu generieren. Darauf aufbauend können datengetriebene Modelle für den Echtzeitbetrieb validiert werden (EnEx-CAUSE, Universität Bremen). Auch sind sie zur Visualisierung autonomer Schmelzsondennetzwerke einsetzbar (EnEx-RANGE, RWTH).

Außerhalb der EnEx-Initiative begleitet die Nachwuchsgruppe „Mathematische und

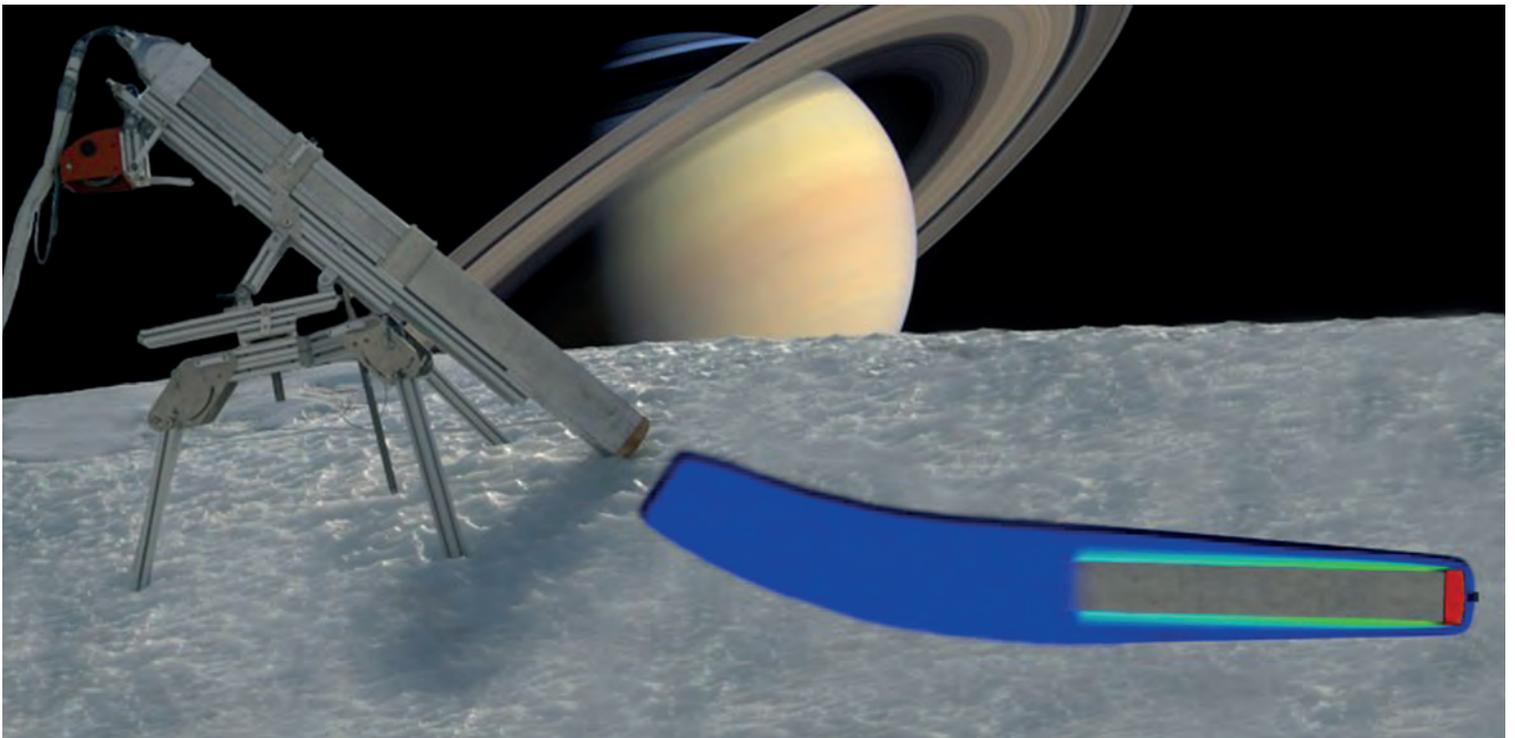


Bild 9: Künstlerische Darstellung einer Explorationsmission auf den Saturnmond Enceladus durch eine robotische Schmelzsonde.

Quelle: K. Schüller, AICES, RWTH Aachen

Numerische Methoden in den Geowissenschaften“ als wissenschaftlicher Partner das studentische VIPER-Projekt bestehend aus Studierenden der FH Aachen und der RWTH Aachen, das im Rahmen eines REXUS-Raketenstarts erstmals ein Kontaktschmelzexperiment unter kombinierten Niederdruck-, Niedrigtemperatur- und Schwerelosigkeitsbedingungen umsetzt.

### **Versunkene Meteoriten und Klimaprozesse**

Die betrachteten Modelle und entwickelten Methoden haben auch über die Grenzen der Kryoexplorationsrobotik hinaus Relevanz. Natürliche thermale Kontaktprobleme spielen beispielsweise in der Oberflächengeophysik eine wichtige Rolle. So wird momentan in der Antarktis nach einer Schicht „versunkener Meteoriten“ gesucht, welche sich unter Sonneneinstrahlung aufgeheizt und dadurch selbst in das Eisschild eingeschmolzen haben. Dieser Prozess ist der Prototyp eines Kontaktschmelzprozesses. Gekoppelte

Strömungs- und Phasenübergangsprozesse bestimmen zudem weiterhin das Zusammenspiel der Ozeane mit darüberliegendem Eis. Es besteht ein starkes Forschungsinteresse daran, bessere Modelle zur Quantifizierung dieses Zusammenspiels zu entwickeln, gerade im Hinblick auf ein verbessertes Verständnis der möglichen Folgen einer Klimaerwärmung. Auch außerhalb der Geowissenschaften trifft man auf Anwendungen, welche einer kombinierten Betrachtung von Phasenübergangs- und Strömungsprozessen sowie wirkenden Kräften bedürfen, beispielsweise bei der Modellierung von Prozessen in Latentwärmespeichern oder in bestimmten Bereichen der Produktionstechnologie (zum Beispiel Hot-Wire-Cutting).

### Literatur

- [1] Konstantinidis K. et al. (2015), Acta Astronaut., 106, 63–89.
- [2] Mikucki J. Et al. (2009), Science, 324, 397-400.
- [3] Kowalski, J., et al. (2016), Cold Reg Science Tech, 123, 53-70.
- [4] Dachwald, B., et al (2014), Annals of Glaciology, 55(65), 14-22.
- [5] Schüller, K., et al. (2016): Int J Heat Mass Transfer, Vol. 92, 884-892.
- [6] Schüller K., Kowalski J. (2016) Abstract-Nr.: C53B-0709, AGU Fall Meeting, San Francisco, USA.

### Autoren

Dr. sc. Julia Kowalski ist Leiterin der Nachwuchsgruppe „Mathematische und Numerische Methoden in den Geowissenschaften“ am Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES). Kai Schüller, M.Sc., ist Doktorand am AICES.

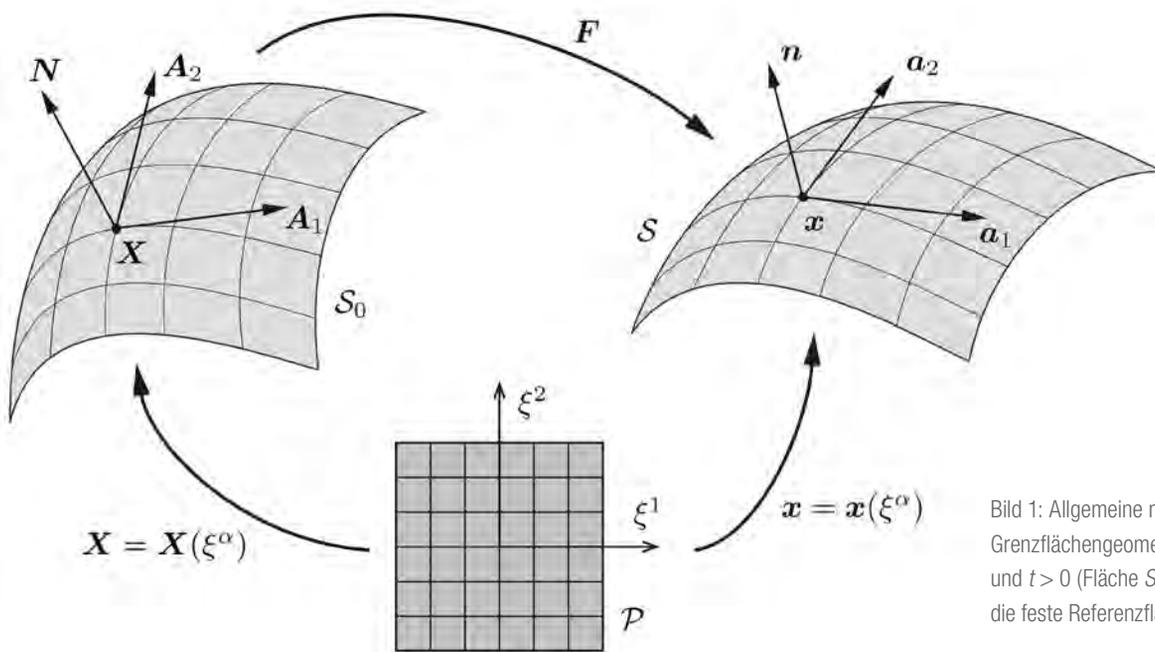


Bild 1: Allgemeine mathematische Beschreibung der Grenzflächengeometrie zum Zeitpunkt  $t = 0$  (Fläche  $S_0$ ) und  $t > 0$  (Fläche  $S$ ). Grundlage der Beschreibung bildet die feste Referenzfläche  $P$ .

Roger A. Sauer

# Grenzen überwinden

## Numerische Methoden an Grenzflächen

Interfaces play an important role in the understanding of many technical and scientific problems. Interfaces are two dimensional surfaces embedded in three dimensional space, and their general description follows from the formalism of differential geometry. The formalism provides a mathematical framework for the description of physical processes 'living' on the surface, and it naturally leads to corresponding numerical solution methods. For these methods, a smooth surface description is advantageous, since it provides an accurate and efficient way to solve the problem.

Grenzflächen spielen oft eine entscheidende Rolle bei der Beschreibung technischer und wissenschaftlicher Problemstellungen. Fahrzeugverhalten wird durch den Haft- und Reibkontakt zwischen Reifen und Fahrbahn geprägt. Verbundwerkstoffe wie CFK (carbonfaserverstärkter Kunststoff) besitzen interne Grenzflächen zwischen den Materialien, an denen es zur Rissbildung kommen kann. Flüssigkeiten werden maßgeblich von ihrer Oberflächenspannung beeinflusst – insbesondere auf kleinen Längenskalen. Biologische Zellen sind von einer Membran umgeben, auf denen sich chemische, mechanische, thermische und elektrische Prozesse abspielen. Bei der numerischen Beschreibung solcher Probleme ist es vorteilhaft, spezielle Verfahren zu verwenden. Diese kennzeichnen sich durch mathematische, physikalische und numerische Herausforderungen.

### Methodik

Grenzflächen sind Oberflächen und somit zweidimensionale Objekte im dreidimensionalen Raum. Sie können beliebig gekrümmt sein und Knicke aufweisen. Allgemein lassen sie sich durch die so genannte Differentialgeometrie beschreiben. Demnach lässt sich die gekrümmte Oberfläche – im Folgenden  $S$  genannt – auf die flache Region  $P$ , die durch die zwei Koordinaten  $\xi^1$  und  $\xi^2$  beschrieben wird, zurückführen. Jeder Oberflächenpunkt  $\mathbf{x}$  ist dann durch die Abbildung  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi^1, \xi^2)$  gegeben. Diese Formulierung bringt einige mathematische Komplexitäten mit sich. Sie ist jedoch möglichst allgemein. Mit Hilfe der Differentialgeometrie lassen sich nun physikalische Prozesse wie Stofftransport, mechanische Kräfte und Wärmeübertragung in Form von Differentialgleichungen mathematisch beschreiben (Sauer & Duong,

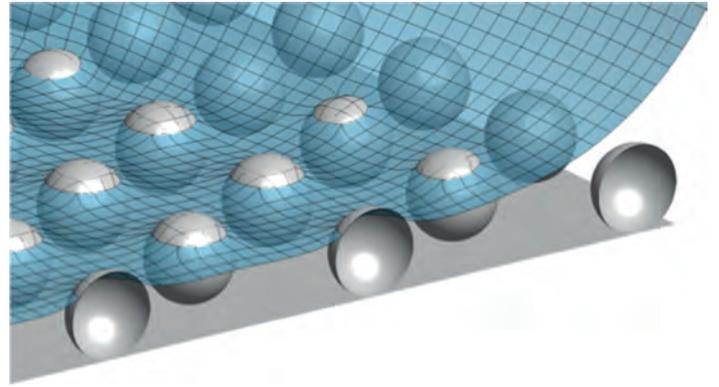
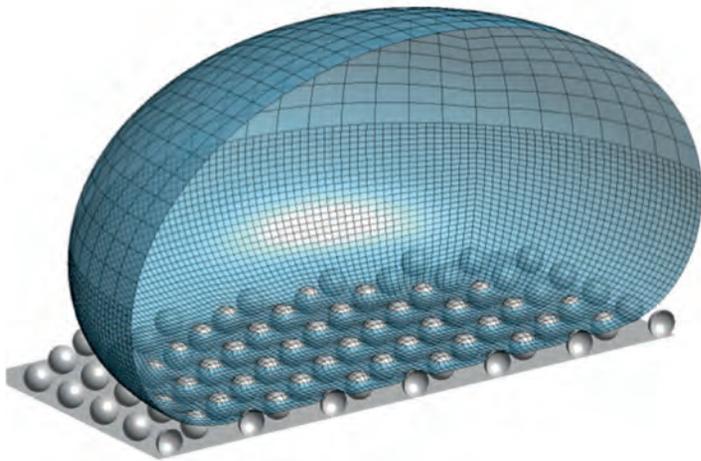


Bild 2: Tropfen auf rauher Oberfläche (Osman & Sauer, 2015). Die Rauigkeit ist durch Kugeln idealisiert. Die Tropfenform bestimmt sich aus der Oberflächenspannung und den Kontaktkräften auf der Tropfenoberfläche. Tropfenkontakt tritt in vielen technischen Anwendungen auf, unter anderem beim 3D-Druck.

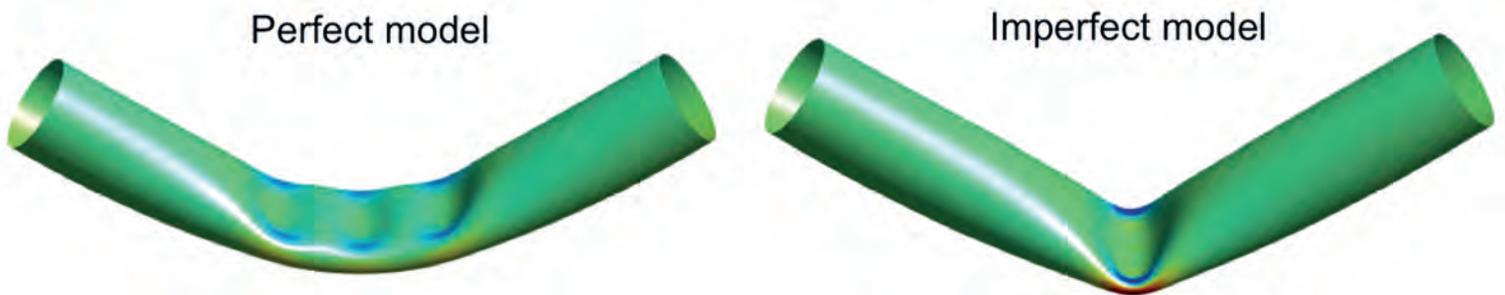


Bild 3: Verformung eines Kohlenstoffnanoröhrchens unter Biegebeanspruchung (Ghaffari et al., 2016). Das Biege- und Knickverhalten des Röhrchens hängt von den mechanischen Kräften in der Oberfläche ab. Kohlenstoffnanoröhrchen sind für die Entwicklung neuer Materialien interessant.

2015; Sahu et al., 2017). In diese Beschreibung fließt die Oberflächenkrümmung mit ein. Ansonsten ähneln sie der klassischen Beschreibung in zwei Dimensionen.

Eine besondere Herausforderung der Differentialgeometrie liegt in der Tatsache, dass sich die Oberflächengeometrie über die Zeit verändern kann. Die Differentialgleichungen „leben“ daher auf veränderlichen Oberflächen, und man spricht dann von so genannten geometrischen Differentialgleichungen. Ein großer Vorteil der Beschreibung ist der Bezug zur Region  $P$ , die unveränderlich ist. Damit lassen sich alle Gleichungen, trotz Veränderlichkeit von  $S$ , auf eine feste Region zurückführen.

#### Zerlegung

Aus der Abbildung  $\mathbf{x} = \mathbf{x}(\xi^1, \xi^2)$  kann der Normalenvektor  $\mathbf{n}$  sowie die Tangentenvektoren  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$  bestimmt werden. Damit lassen

sich alle physikalischen Prozesse in ihre Normal- und Tangentialanteile zerlegen: So gibt es Stofftransport quer zur Grenzfläche (Stichwort Membranpermeabilität) und in der Grenzflächenebene (Stichwort Oberflächendiffusion). Ebenso lässt sich der Wärmetransport zerlegen.

Auch mechanische Kräfte können normal oder tangential auf die Oberfläche wirken. Beispiele sind Druck und Reibkräfte. Mechanische Kräfte können zudem in der Oberfläche wirken. Bekanntes Beispiel ist die Oberflächenspannung. Die Erfassung mechanischer Kräfte ist entscheidend für die Bestimmung der aktuellen Oberflächenform. Die Kopplung verschiedener physikalischer Prozesse kann ebenfalls auf Grundlage der Differentialgeometrie erfolgen (Sahu et al, 2017).

Es ist dabei wichtig, dass die Zerlegung in Normal- und Tangentialanteile möglichst

genau erfolgt. Bei der numerischen Beschreibung der Oberfläche sind daher Verfahren besonders geeignet, die eine  $C^1$ -stetige Abbildung ermöglichen.  $C^1$ -Stetigkeit bedeutet, dass die Vektoren  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$  keine Richtungssprünge aufweisen. Dies stellt eine numerische Herausforderung dar.

#### Numerik

Finite-Elemente-Methoden (FE-Methoden) gehören zu den wichtigsten numerischen Berechnungsverfahren für technische und wissenschaftliche Problemstellungen. Sie sind robust und effizient und lassen sich flexibel an die Problemgeometrie anpassen. Ausgangspunkt von FE-Methoden ist die „schwache Form“ der Differentialgleichung. Im Fall geometrischer Differentialgleichungen lässt sich die schwache Form mit Hilfe der Differentialgeometrie herleiten. Der FE-Ansatz besteht nun darin, die schwache Form

näherungsweise zu lösen. Dazu wird die Oberfläche diskretisiert, das heißt sie wird durch ein Punktenetz ersetzt. Im Fall von Grenzflächenprozessen wird lediglich die Oberfläche diskretisiert. Der dreidimensionale Raum, der die Oberfläche umgibt, muss nur dann diskretisiert werden, wenn sich in diesem Raum komplexe physikalische Prozesse abspielen. Treten dort nur einfache Prozesse auf, lassen sich diese auf die Oberfläche projizieren und es genügt ein Oberflächennetz. Dies ist deutlich effizienter als die Vernetzung des umgebenden dreidimensionalen Raums. Klassische Finite-Elemente-Methoden erlauben keine  $C^1$ -stetige Oberflächendiskretisierung. In den vergangenen Jahren wurden jedoch neue FE-Methoden entwickelt (Hughes et al., 2005), die dies ermöglichen.

FE-Methoden stützen sich üblicherweise auf eine Referenzregion, wie beispielsweise die Region  $P$ . Sie lassen sich daher vergleichsweise einfach auf Grenzflächenprobleme anwenden, da sich deren Beschreibung ja ebenfalls auf  $P$  stützt.

Die größte Herausforderung in der Entwicklung von FE-Methoden liegt üblicherweise in der Bestimmung der Tangentenmatrizen. Diese charakterisieren das FE-Modell hinsichtlich unbekannter physikalischer Größen wie Konzentration (bei Stofftransport), Geschwindigkeit (bei mechanischen Kräften) und Temperatur (bei Wärmeübertragung). Die Bilder 2 bis 7 zeigen dazu verschiedene Berechnungsbeispiele.

### Fazit

Viele Problemstellungen aus Natur und Technik werden durch Prozesse beeinflusst, die auf gekrümmten Oberflächen „leben“. Zur numerischen Beschreibung bieten sich oberflächenbasierte Finite-Elemente-Methoden an. Diese beruhen auf der mathematischen Beschreibung gekrümmter Oberflächen im Rahmen der Differentialgeometrie. Sie erlauben eine glatte Oberflächendarstellung und damit eine hohe Rechengenauigkeit bei verhältnismäßig kleinem Aufwand.

### Autor

Univ.-Prof. Dr. Roger A. Sauer betreut das Lehr- und Forschungsgebiet Kontaktmechanik.

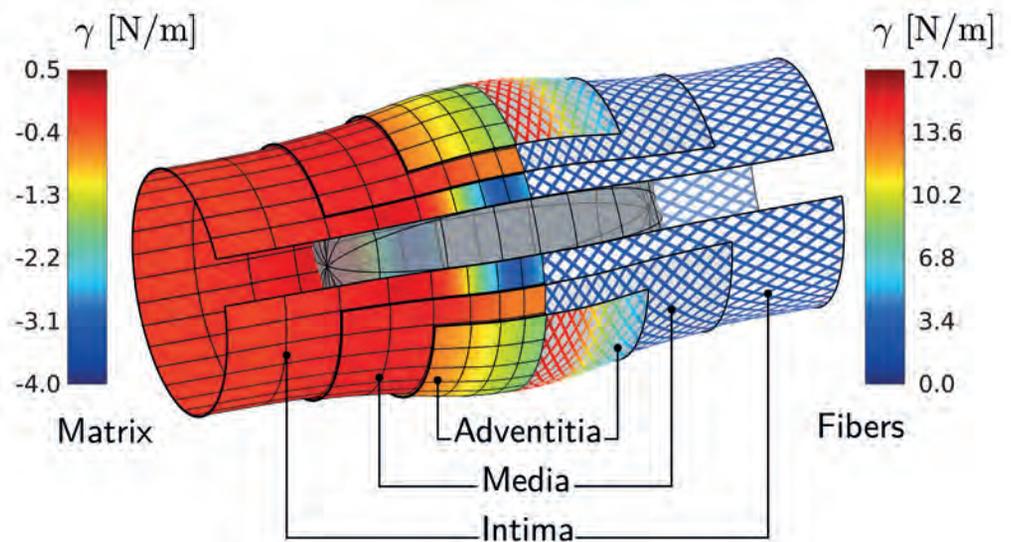


Bild 4: Arterienaufweitung mittels Ballonkatheter (Roohbakhshan & Sauer, 2017). Arterien bestehen aus verschiedenen faserverstärkten Schichten. Beim Aufweiten treten mechanische Kräfte im Ballon, im Kontakt und in den Arterien-schichten und -fasern auf. Der Aufweitungsvorgang mittels Ballonkatheter dient der Beseitigung von Engstellen in Arterien.

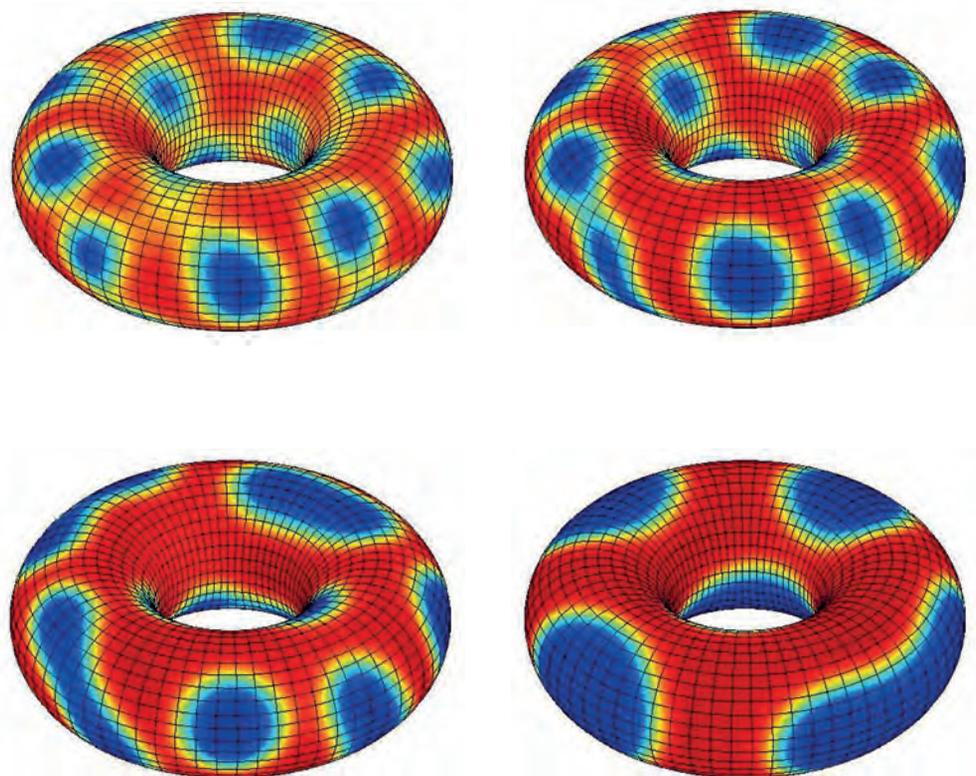


Bild 5: Entmischung zweier Materialphasen auf einer Torus-Oberfläche. Entmischung wird durch Stofftransport charakterisiert und ist speziell für Flüssigkeiten wichtig. Anwendungsbeispiel sind biologische Zellen. Die Zellmembran besteht aus verschiedenen Materialphasen.

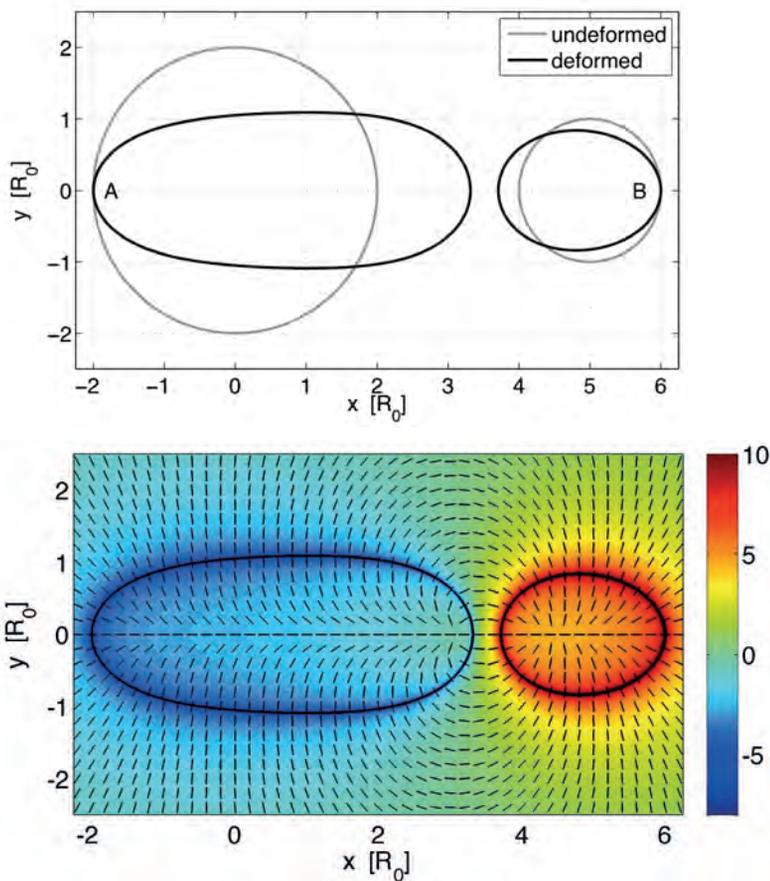


Bild 6: Elektrostatische Anziehung zweier verformbarer Ringe (Sauer & De Lorenzis, 2013). Hierbei wirken mechanische Kräfte zwischen den Ringen und innerhalb der Ringe. Das elektrische Umgebungsfeld kann ohne eigene Diskretisierung ausgewertet werden. Elektrostatische Anziehungskräfte treten in mikroelektromechanischen Bauteilen in Mobilfunkgeräten auf.

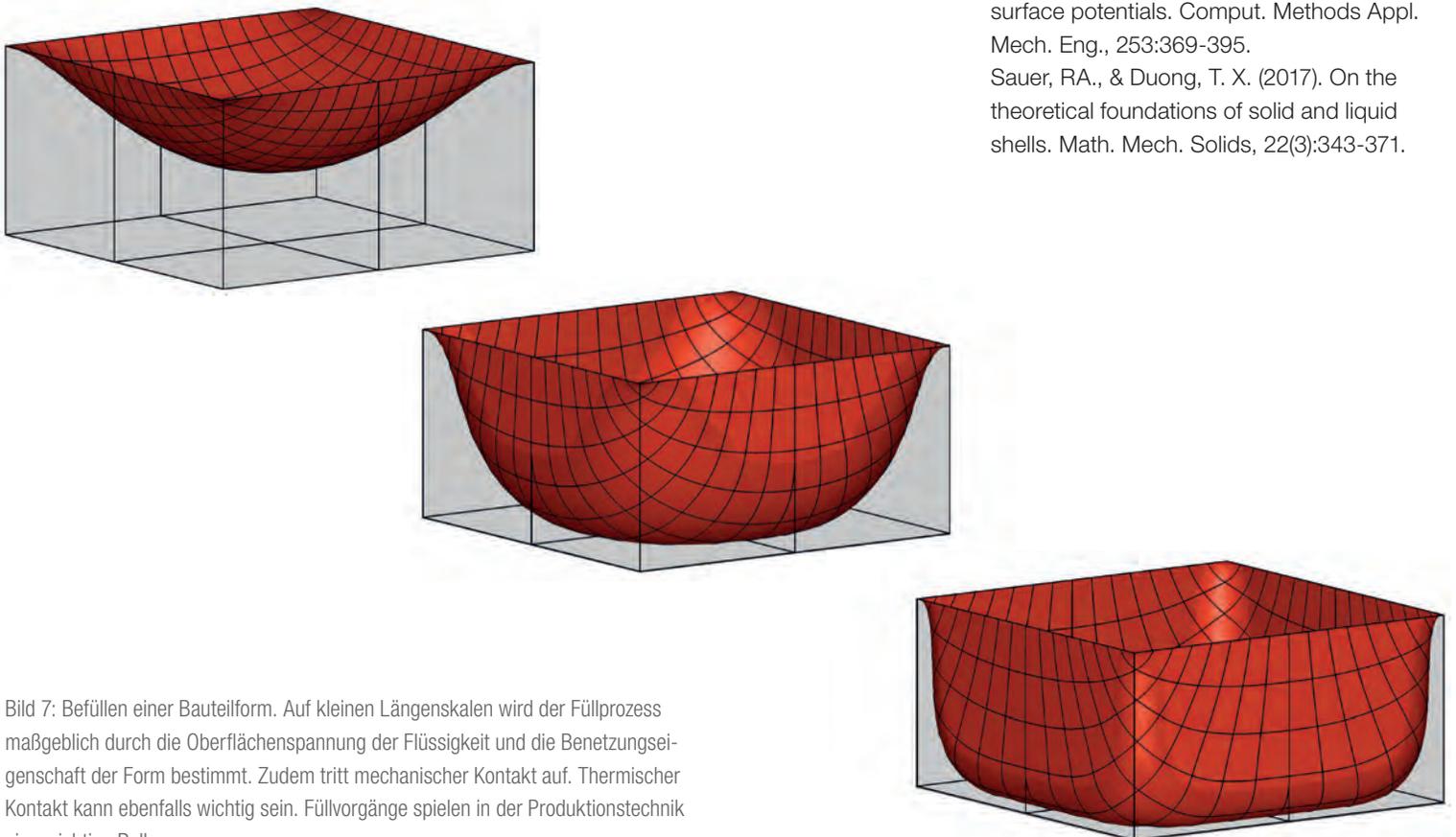


Bild 7: Befüllen einer Bauteilform. Auf kleinen Längenskalen wird der Füllprozess maßgeblich durch die Oberflächenspannung der Flüssigkeit und die Benetzungseigenschaft der Form bestimmt. Zudem tritt mechanischer Kontakt auf. Thermischer Kontakt kann ebenfalls wichtig sein. Füllvorgänge spielen in der Produktionstechnik eine wichtige Rolle.

#### Referenzen

- Duong, T. X., Roohbakhshan, F., & Sauer, R. A. (2017). A new rotationfree isogeometric thin shell formulation and a corresponding continuity constraint for patch boundaries. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 316:43-83.
- Ghaffari, R., Duong, T.X., & Sauer, R.A. (2016). A new shell formulation for graphene structures based on recent ab-initio data. [arXiv:1612.08965](https://arxiv.org/abs/1612.08965).
- Hughes, T. J. R., Cottrell, J. A., & Bazilevs, Y. (2005). Isogeometric analysis: CAD, finite elements, NURBS, exact geometry and mesh refinement. *Comp. Meth. Appl. Mech. Engrg.*, 194:4135-4195.
- Osman, M., & Sauer, R.A. (2015). Computational analysis of wetting on hydrophobic surfaces: Application to self-cleaning mechanisms, in K.L. Mittal, editor, *Advances in Contact Angle, Wettability and Adhesion*, Vol. 2, pp. 129-147, Wiley.
- Roohbakhshan, F., & Sauer, R.A. (2017). Efficient isogeometric thin shell formulations for soft biological materials. *Biomech. Model. Mechanobiol.*, accepted, preprint at [arXiv:1612.09087](https://arxiv.org/abs/1612.09087).
- Sahu, A., Sauer, R.A., & Mandadapu, K.K. (2017). The irreversible thermodynamics of curved lipid membranes. [arXiv:1701.06495](https://arxiv.org/abs/1701.06495).
- Sauer, R.A., & De Lorenzis, L. (2013). A computational contact formulation based on surface potentials. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 253:369-395.
- Sauer, RA., & Duong, T. X. (2017). On the theoretical foundations of solid and liquid shells. *Math. Mech. Solids*, 22(3):343-371.



Benjamin Berkels, Niklas Mevenkamp

# Den Atomen auf der Spur

Verbesserung der Bildinformation in der  
Elektronenmikroskopie mit Hilfe mathematischer Methoden

The invention of new materials has become a key factor for the development of many forward-looking technologies. For instance, sustainable fusion reactors will rely on materials that can withstand extreme temperatures and radiation at the same time. Using modern electron microscopes, it is possible to investigate material structures down to the atomic level. However, within the past decade, the precision and resolution of these instruments has been pushed to physical limitations imposed by the number of electrons that can be shot at smaller and smaller areas of the material without damaging it. Also, magnifications have reached levels at which unavoidable measurement instabilities significantly distort the acquired scans.

Together with national and international partners, such as the Forschungszentrum Jülich and the Department of Materials Science & Engineering of the University of Wisconsin-Madison, we at the Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES) investigate ways to reduce these problems using mathematical image processing techniques. We combine the understanding of physical processes with experience in mathematical modeling and optimization.

Due to our software, for the first time, material scientists were able to determine individual atom positions in scanning transmission electron microscope images with a precision error of less than one picometer, i.e. one trillionth of a meter. First tests also show that our software enables high precision analyses of beam sensitive materials that would otherwise be impossible.

Die Erforschung neuartiger Materialien wird zunehmend zur Voraussetzung für die Entwicklung zukunftsweisender Technologien. Die Herausforderung besteht dabei darin, bekannte Strukturen gezielt so zu verändern oder zu kombinieren, dass sich gewünschte Eigenschaften ergeben, wie zum Beispiel gute elektrische Leitfähigkeit oder hohe mechanische Festigkeit.

Ein aktuelles und relevantes Problem findet sich in der Erforschung von Fusionsreaktoren. Für eine langfristige Nutzung benötigt man neuartige Materialien, die gleichzeitig den hohen Temperaturen und der extremen Strahlung im Reaktor widerstehen können.

## **Mit dem Elektronenmikroskop auf einzelne Atome blicken**

Um zu untersuchen, wie Eigenschaften von Materialien mit deren strukturellem Aufbau auf atomarer Ebene zusammenhängen, sind Materialwissenschaftler an den genauen Positionen und Zuständen einzelner Atome interessiert. Von zentraler Bedeutung ist dabei das Elektronenmikroskop, welches Aufnahmen mit einer millionenfachen Vergrößerung

Bild 1: Gemeinsam mit dem Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES) und dem Institut für Metallkunde und Metallphysik untersuchen die Wissenschaftler Professor Sandra Korte-Kerzel und Professor Benjamin Berkels unter anderem auch den strukturellen Aufbau von Materialien im atomaren Bereich. Zusammen mit ihren Mitarbeitern diskutieren sie Ergebnisse am Focused-Ion-Beam-Mikroskop.

Foto: Peter Winandy

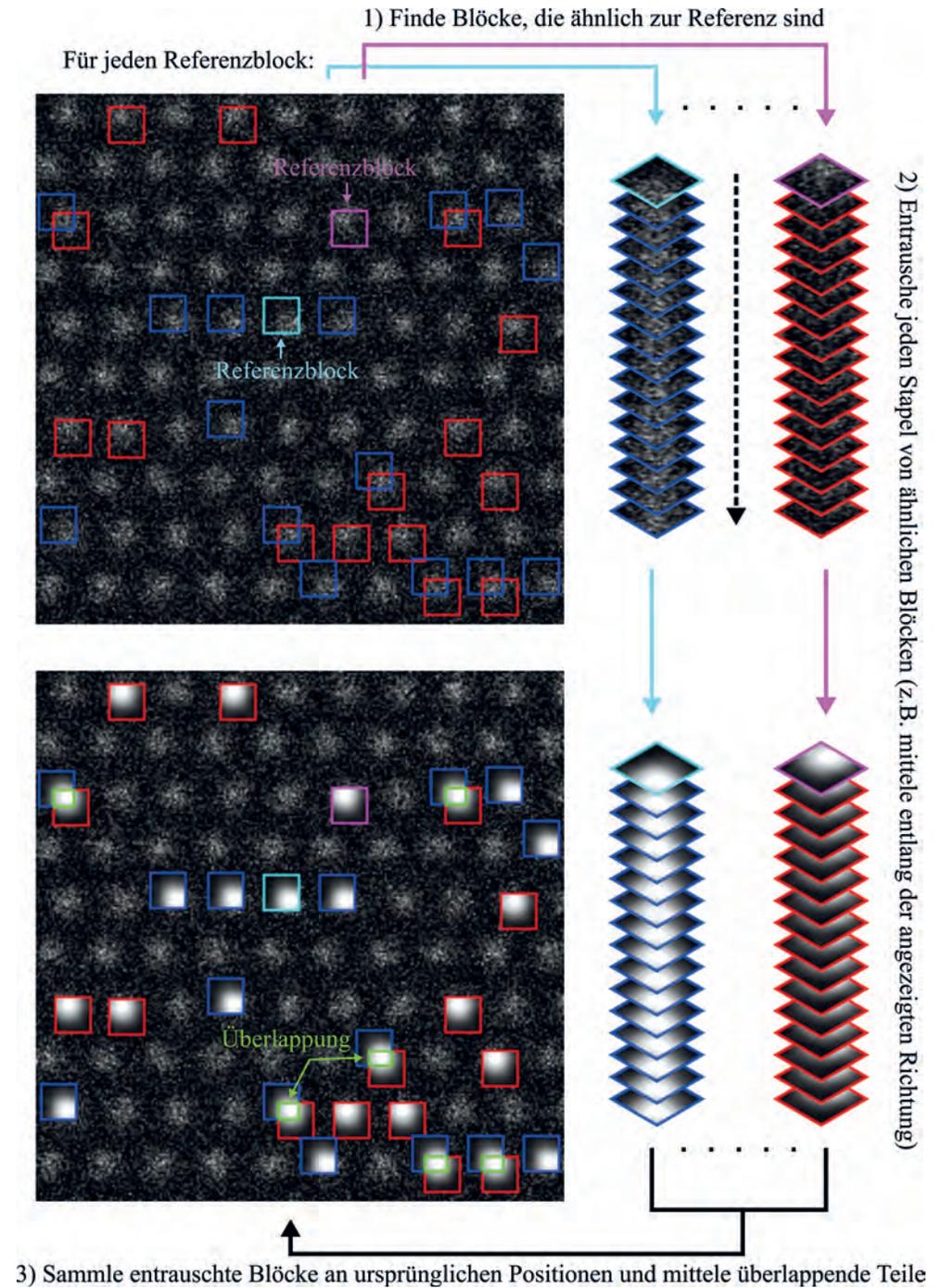
Bild 2: Illustration der Block-Matching-Prozedur zur Entrauschung von Einzelbildern.

Quelle der Eingangsdaten (links im Bild): Professor Paul Voyles, Department of Materials Science & Engineering, University of Wisconsin-Madison

erlaubt. Bei solchen Vergrößerungsfaktoren werden einzelne Atome mit hoher Auflösung sichtbar.

Die Präzision und Aufnahmequalität von Elektronenmikroskopen wurde in den letzten Jahrzehnten stetig verbessert. Dennoch stößt man inzwischen an physikalische Grenzen. So reagieren gewisse Materialien besonders empfindlich auf den Beschuss mit Elektronen und können daher bei maximaler Auflösung nicht mit der benötigten Belichtungszeit abgebildet werden. Das Ergebnis sind extrem verrauschte Daten, auf denen eine herkömmliche Analyse unmöglich ist.

Im Bereich der Rasterelektronenmikroskopie ergibt sich ein weiteres Problem: Dort wird das Bild sequenziell aufgenommen, also Zeile für Zeile und Pixel für Pixel. Aufgrund äußerer Einflüsse durch akustische oder elektromagnetische Vibrationen oder Temperaturschwankungen im Labor bewegt sich das Material während der Messung. Mit dem Vergrößerungsfaktor der Mikroskope wachsen auch die durch diese Bewegungen während der Aufnahme entstehenden Bildverzerrungen. Trotz enormer Anstrengungen,



diesem Trend durch speziell abgeschirmte und auf massivem Beton gelagerte Labors entgegenzuwirken, sind diese Verzerrungen in den letzten Jahren zu einer signifikanten Fehlerquelle geworden.

### Aufbruch zu neuartigen Rekonstruktionsverfahren

Mit nationalen und internationalen Partnern wie dem Forschungszentrum Jülich und dem Department of Materials Science & Engineering der University of Wisconsin-Madison forschen die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler am Aachen Institute for Advanced

Study in Computational Engineering Science (AICES) an mathematischen Methoden, mit denen sich diese Probleme umgehen oder verringern lassen.

Eine Lösung des Problems der Messstörungen – wie Rauschen oder Verzerrungen in Bildern – ist die Mittelung mehrerer unter gleichen Bedingungen erzielter Werte. Die besondere Herausforderung in der Elektronenmikroskopie besteht darin, dass es aufgrund des sensiblen Aufnahmeprinzips unmöglich ist, die Messparameter konstant zu halten, also das gleiche Bild mehrmals hintereinander aufzunehmen. Dank mathe-



Bild 3: Wissenschaftler vom Institut für Metallkunde und Metallphysik und dem Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES) bei der Diskussion an einem Zweistrahl-Rasterelektronen-/Ionenmikroskop.  
Foto: Peter Winandy



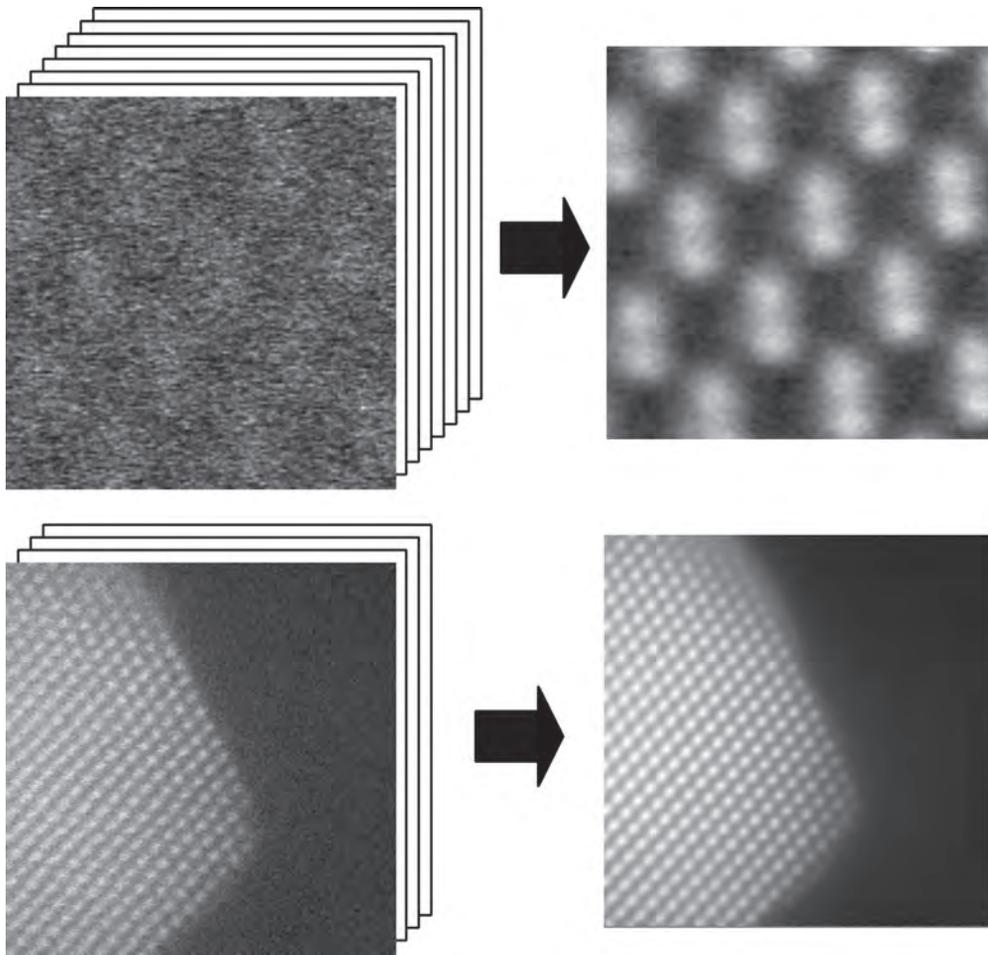


Bild 4: Rekonstruktion zweier Serien von rasterelektronenmikroskopischen Aufnahmen durch nicht-rigide Registrierung. Links: erstes Bild der beiden Serien, rechts: Mittelwert aller Bilder der jeweiligen Serie im gemeinsamen Koordinatensystem.

Quelle der Eingangsdaten (links im Bild): Professor Paul Voyles, Department of Materials Science & Engineering, University of Wisconsin-Madison

matischer Optimierungsverfahren ist dies aber nicht unbedingt notwendig. Jedes Bild einer Serie von rasterelektronenmikroskopischen Aufnahmen desselben Materials enthält im Prinzip dieselben Helligkeitswerte – abgesehen vom Rauschen. Allerdings stimmen aufgrund der Verzerrungen die Positionen, an denen diese Werte auftreten, nicht überein. Wegen des Rauschens und weil manche Helligkeitswerte mehrmals auftreten, lässt sich keine eindeutige Zuordnung der Helligkeitswerte finden, um die Verzerrungen direkt zu korrigieren. Da benachbarte Pixel aber sehr schnell nacheinander belichtet werden, muss deren Position nach der Korrektur auch ähnlich sein.

### Die mathematische Bildverarbeitung eröffnet neue Perspektiven

Aus mathematischer Sicht lassen sich die Einzelbilder der Serie als zweidimensionale Funktionen darstellen. Jeder Position wird ein Helligkeitswert zugeordnet. Die Verzerrungskorrektur wird ebenfalls als Funktion modelliert. Sie gibt an, wie die Positionen der

Helligkeitswerte verändert werden müssen. Dabei ist die zuvor erwähnte Ähnlichkeit ursprünglich benachbarter Pixel zu beachten. Die Korrekturfunktion sollte sich also in der Nähe einer bestimmten Position nicht zu stark ändern. Diese Eigenschaft wird als Regularität bezeichnet und anhand der Ableitungen der Funktion gemessen. Für jede mögliche Verzerrungskorrektur lässt sich die resultierende Ähnlichkeit der korrigierten Bilder messen. Gesucht ist nun diejenige Korrekturfunktion, welche die beste Übereinstimmung mit ausreichender Regularität vereint. Nach der Korrektur wird dann die Bildserie gemittelt, um ein Einzelbild hoher Qualität zu erhalten.

Die Optimierung über Funktionen anstelle von Parametern bildet einen eigenen Teilbereich der Mathematik. Die so genannte Variationsrechnung wurde um die Mitte des 18. Jahrhunderts von Leonhard Euler begründet. Sie führte auch zur Erforschung geeigneter Verfahren, mit denen sich die Optimierungsprobleme in der Praxis lösen lassen. Bei Bildern mit atomarer Auflösung lassen

sich Ähnlichkeiten nicht nur zwischen mehreren Bildern desselben Materials finden. In der Regel bestehen die untersuchten Materialien aus einer kleinen Anzahl verschiedener Elemente, deren Atome innerhalb des Materials in identischem Zustand mehrmals auftreten. Ähnlich wie bei der Korrektur einer Bildserie lassen sich auch die Abbilder verschiedener Atome oder ganze Teile der Materialstruktur innerhalb eines Bildes miteinander vergleichen und so in ein gemeinsames Koordinatensystem bringen. Dies erlaubt eine Mittelung ähnlicher Information innerhalb eines Einzelbildes. Der große Vorteil im Vergleich zur Nutzung einer Bildserie liegt darin, dass für ein Einzelbild das Material insgesamt mit einer wesentlich geringeren Elektronendosis beschossen wird. Somit kann diese Technik auch bei sehr empfindlichen Materialien zum Einsatz kommen.

Beide vorgestellten Methoden ermöglichen es, Verzerrungen und Rauschen der Bildintensität signifikant zu reduzieren, ohne bemerkbare Verluste in der örtlichen Auflösung in Kauf nehmen zu müssen.

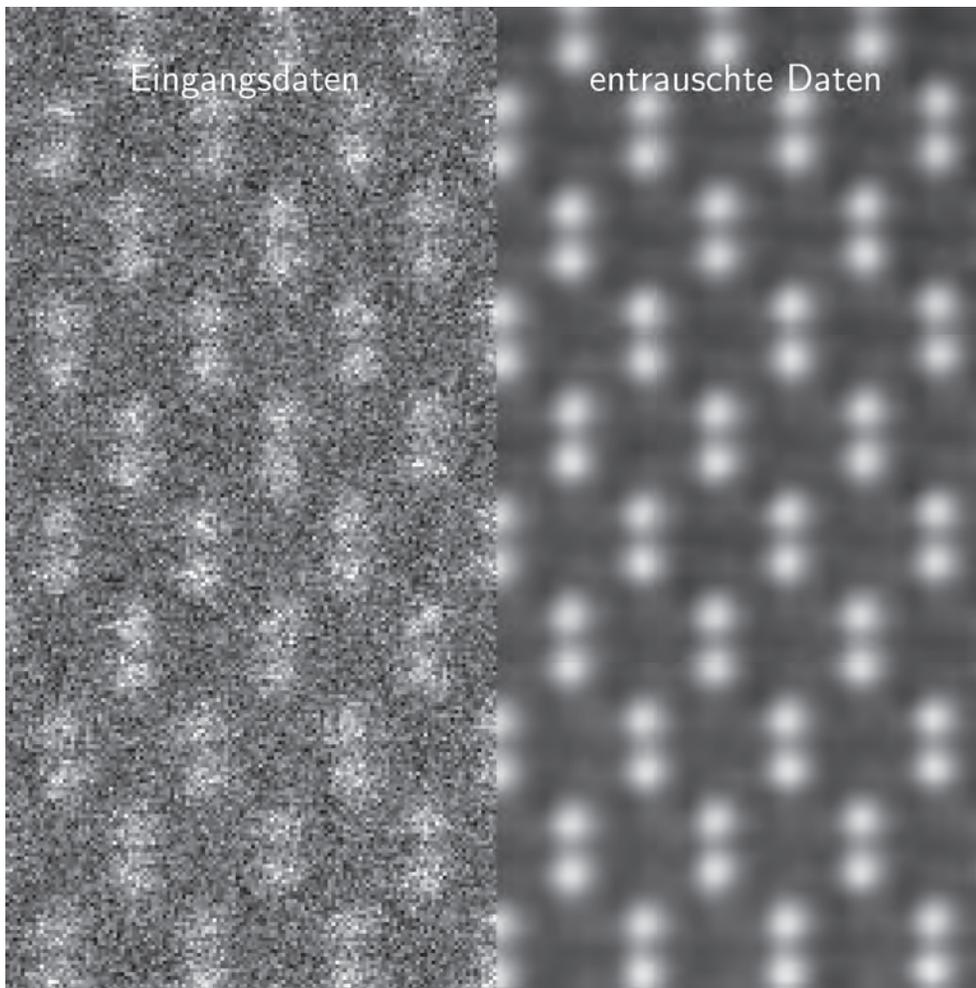


Bild 5: Rasterelektronenmikroskopische Aufnahme von Galliumarsenid (links) und Rekonstruktion durch nicht-lokales Entrauschungsverfahren (rechts). Quelle der Eingangsdaten (links im Bild): Professor Paul Voyles, Department für Materials Science & Engineering, University of Wisconsin-Madison

### **Interdisziplinäre Forschung bringt den Durchbruch**

Der Fortschritt basiert maßgeblich auf der Zusammenarbeit zwischen Materialwissenschaftlern und Mathematikern. Sie vereint das Verständnis physikalischer Prozesse hinter der eigentlichen Fragestellung mit mathematischer Modellierung und darauf aufbauenden modernen Optimierungs- und Rekonstruktionsverfahren.

Mit Hilfe der entwickelten Software ist es Materialwissenschaftlern beispielsweise erstmals gelungen, die Positionen einzelner Atome in Rasterelektronenmikroskopie-Aufnahmen mit einem Präzisionsfehler von weniger als einem Pikometer, das heißt einem billionstel Meter, zu bestimmen. Zudem konnten die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler des AICES anhand erster Tests belegen, dass die von ihnen entwickelte Software eine hochpräzise Analyse auch von solchen Materialien ermöglicht, bei denen dies aufgrund ihrer hohen Elektronenempfindlichkeit bisher nicht in Frage kam.

---

### **Autoren**

Dr. rer. nat. Niklas Mevenkamp war Promotionsstipendiat am Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES) und arbeitet jetzt bei der Carl Zeiss AG.

Prof. Dr. rer. nat. Benjamin Berkels ist Juniorprofessor für Mathematische Bild- und Signalverarbeitung und Gruppenleiter am Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES).

---

# Simulationen in Echtzeit

## Von der Optimierung bis zur Datenassimilation

In the last decades, the field of computational science and engineering has advanced sufficiently so that the behavior of many physical systems can already be simulated with sufficient accuracy. In systems governed by partial differential equations, for example, mathematical techniques such as the finite element and finite volume method have become standard and are widely used by researchers not just in academia, but also in industry. In cases where standard methods provide adequately accurate „forward“ predictions, the current scientific challenge is often more complex: to design, optimize, characterize, or control the behavior of the system, preferably even in real-time. Such problems can in general be formulated mathematically as optimization problems, and their solution typically entails repeated solution of the forward problem. This may cause the computational solution of the problem to be prohibitively expensive, especially when considering complex applications with extremely high dimensions.

How then can we address these challenges and compute solutions to such complex problems in real-time? In some applications, the use of supercomputing facilities may be infeasible, and real-time solution of complex, high-dimensional problems are not possible even with the fastest solvers. One set of techniques that can help achieve real-time simulations is model order reduction. As the name suggests, model order reduction approximates solutions to complex, high-dimensional problems using models of significantly smaller dimensions. The drastic reduction in the size of the models allows fast and efficient computation of solutions, thus allowing real-time response. In our research group, we seek to develop reduced order models that are not only efficient, but also provably accurate. Our goal is to enable engineers and scientists to make decisions based on reliable information in real-time.

In den letzten Jahrzehnten gab es immense Fortschritte sowohl bei der Modellierung physikalischer Prozesse als auch auf dem Gebiet des Hochleistungsrechnens und der Entwicklung numerischer Verfahren und moderner Rechnerarchitekturen. Dadurch können heutzutage auch komplexe physikalische Probleme in den Natur- und Ingenieurwissenschaften – häufig beschrieben durch partielle Differentialgleichungen (PDGl) – sehr präzise und zuverlässig simuliert werden. Finite-Elemente- (FE) oder Finite-Volumen-Methoden (FV) sind Standard in kommerziellen Simulationswerkzeugen und finden weitverbreitete Anwendung in der Industrie. Diese Anwendungen betreffen zum Großteil aber nur die Lösung des so genannten „Vorwärtsproblems“, das heißt der Berechnung der Lösung einer Gleichung für gegebene Eingangsdaten und Modellparameter. Die wissenschaftliche Herausforderung ist inzwischen jedoch deutlich anspruchsvoller und komplexer geworden. Dazu gehört zum

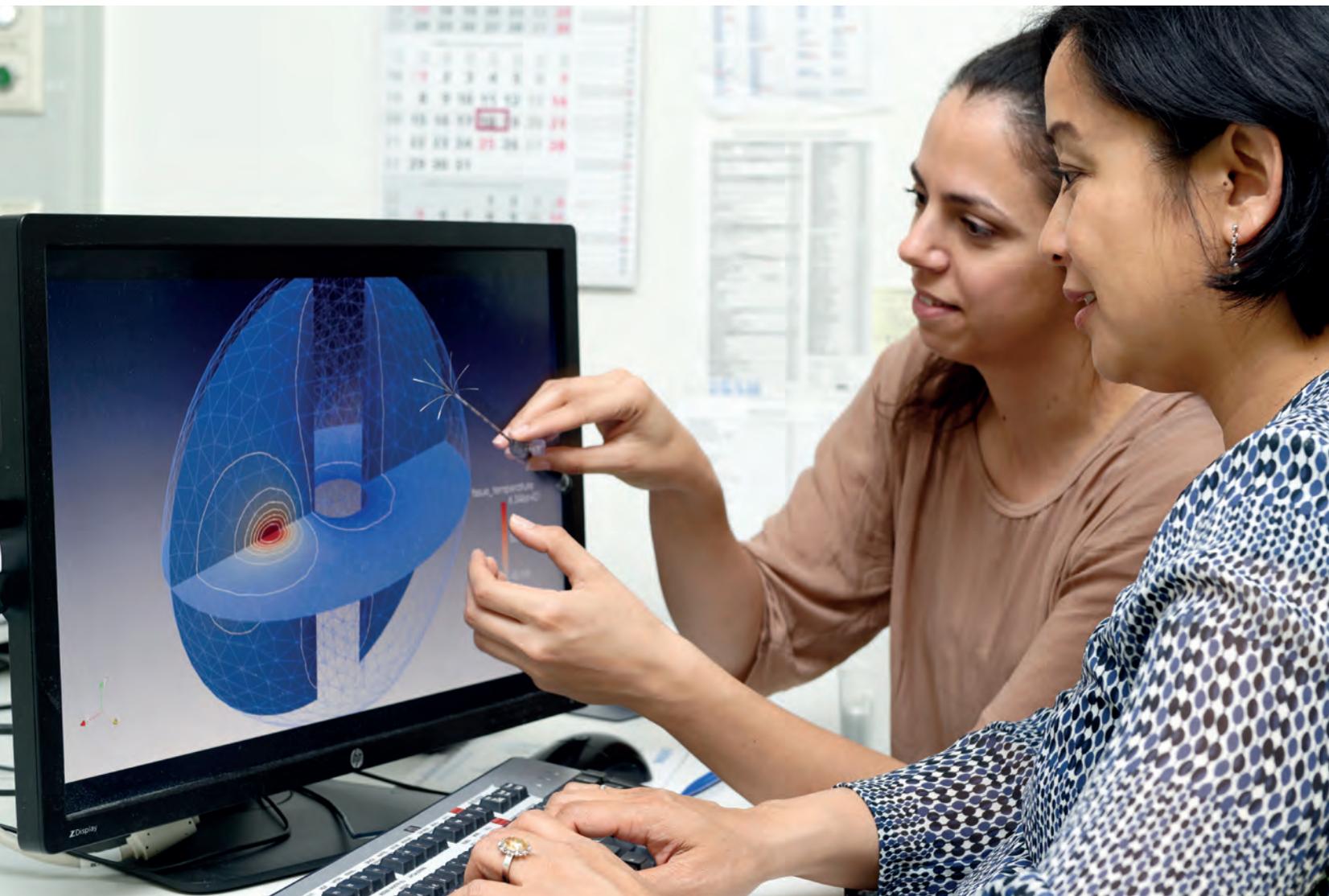


Bild 1: Optimierung der Temperaturverteilung einer Tumorablation in einem Prostatamodell.

Foto: Peter Winandy

Beispiel, den Einfluss von Unsicherheiten in den Eingangsdaten oder Modellparametern zu charakterisieren und das Verhalten des Systems zu regeln oder zu optimieren, möglicherweise sogar in Echtzeit. Diese Fragestellungen lassen sich als Optimierungsprobleme formulieren, deren iterative Lösung viele Auswertungen des Vorwärtsproblems benötigt. Die folgenden zwei Beispiele sind repräsentativ für die Vielzahl der Anwendungen.

### Optimierung in der Krebstherapie

Es gibt zwei Therapien in der Krebsbehandlung, die auf die Zerstörung des Tumors mittels Wärmeeintrag abzielen. Die Hyperthermie-Behandlung kommt bei größeren inoperablen Tumoren zum Einsatz. Dort wird der Tumor durch elektromagnetische Wellen, die über Applikatoren außerhalb des Körpers in den Tumor geleitet werden, für ungefähr eine Stunde auf eine Temperatur von bis zu 43 Grad Celsius erwärmt. Eine zweite Behandlungsart ist die Radiofrequenz-

induzierte Thermoablation („RF-Ablation“), die bei kleineren Tumor-Arealen von drei bis fünf Zentimetern zum Einsatz kommt. Bei diesem Verfahren wird eine Sonde direkt in oder nahe an den Tumor geführt. Durch die Sonde werden Radiofrequenzwellen eingebracht, die das Tumorgewebe auf mehr als 60 Grad Celsius erhitzen und durch thermische Ablation zerstören. Beide Verfahren haben das gleiche Ziel: Schadhafte Gewebe durch den Wärmeeintrag zerstören und angrenzendes gesundes Gewebe sowie andere Gewebestrukturen wie etwa Nerven und Blutgefäße schonen. Da sich die Wärme im Gewebe ausbreitet, erfordern beide Verfahren eine sehr genaue Behandlungsplanung zur Berechnung der Temperaturverteilung. Die Temperaturverteilung wird durch die Bio-Wärme-Gleichung beschrieben, die verteilte Wärmequelle ergibt sich aus der Berechnung der elektrischen und magnetischen Felder mittels der Maxwell-Gleichung. Viele Aspekte der Therapien und ihrer Aus-

wirkung sind immer noch nicht ausreichend erforscht. Ein wesentlicher Aspekt ist die Vorplanung und die Echtzeitoptimierung des Verlaufs der Behandlung. Bei der RF-Ablation stellt sich zum Beispiel die Frage: Wo sollte die Sonde optimal platziert werden? Wie viele Sonden sollten benutzt werden und welche Leistung sollte jede Sonde einbringen? Wie lässt sich der Tumor zerstören, ohne die benachbarten Organe und das gesunde Gewebe wesentlich zu schädigen? Wie kann die Behandlungsplanung möglichst schnell auf unterschiedliche Patienten angepasst werden? Und schließlich: Wie kann während der Behandlung in Echtzeit auf sich ändernde Bedingungen reagiert werden? Um diese Fragen zu beantworten, benötigt man mathematische Methoden, um schnell und effizient die Temperaturverteilung im Gewebe zu berechnen und diese durch die Optimierung des Wärmeeintrags zu beeinflussen.



### **Datenassimilation in den Geowissenschaften**

Ein weiteres Beispiel ist die Überwachung und Sicherstellung der Grundwasserqualität. Aktuell stellt vor allem die Belastung des Grundwassers mit Nitrat ein großes Problem dar. Eine generelle Fragestellung dabei ist, wie sich Schadstoffe im Grundwasser ausbreiten. Dazu sei angenommen, dass ein Unfall an einem unbekanntem Ort Schadstoffe in das Grundwasser freisetzt. Um angemessen reagieren zu können, muss im ersten Schritt die Quelle des Schadstoffes geortet werden. Diese Aufgabe ist aber sehr schwierig, da die

Konzentration des Schadstoffes im Allgemeinen nur an einzelnen wenigen Messstellen zu bestimmten Messzeitpunkten bekannt ist. Die Strömung des Grundwassers wird durch partielle Differentialgleichungen modelliert, in die Modellparameter zur Beschreibung der Bodeneigenschaften wie die Wasserdurchlässigkeit des Bodens und Porosität eingehen. Zur Lösung der Gleichung und Vorhersage der Schadstoffkonzentrationen muss außerdem die Anfangsbedingung, das heißt die Quelle des Schadstoffes, bekannt sein. In unserem Beispiel soll aber gerade die Anfangsbedingung für gegebene Messwerte

bestimmt werden. Zusätzlich weisen die Modellparameter häufig große Unsicherheiten auf. Die Bestimmung der Anfangsbedingung eines mit Unsicherheiten behafteten Modells für gegebene Messwerte ist gerade eine Aufgabe der Datenassimilation. Auch die Datenassimilation lässt sich wiederum als Optimierungsproblem mit partiellen Differentialgleichungen formulieren. Erst wenn diese Probleme gelöst und alle Informationen bekannt sind – die Materialeigenschaften des Bodens, die Anfangsbedingung (und dadurch die Quelle des Schadstoffes) und ein verbessertes mathematisches Modell –



Bild 2: Durchführung von Messungen im Magnetresonanztomographen zum Vergleich der Simulationsergebnisse mit klinischen Messdaten.

Foto: Peter Winandy

der Krebstherapie ist das Vorwärtsproblem ein zeitabhängiges, gekoppeltes System partieller Differentialgleichungen der Wärmeübertragung und der Elektromagnetik. In den Geowissenschaften ist das Vorwärtsproblem eine zeitabhängige partielle Differentialgleichung der Strömung in einem porösen Medium. In beiden Fällen – und in vielen anderen Anwendungen – existieren schon Standardverfahren für die numerische Lösung der partiellen Differentialgleichungen wie zum Beispiel die FE-Methode. Die Schwierigkeit jedoch besteht darin, dass die Diskretisierung der Gleichungen im Allgemeinen zu einem hochdimensionalen System mit Hunderttausenden bis Millionen Freiheitsgraden führt. Die Lösung solcher Gleichungssysteme ist allgemein sehr rechenintensiv und aufwändig, selbst für Hochleistungsrechner. Diese Tatsache erschwert daher die Echtzeit-Lösung PDGI-beschränkter Optimierungsprobleme.

### Modellreduktionsverfahren

Wie können wir angesichts der hohen Dimension der Probleme die Notwendigkeit für Geschwindigkeit, Effizienz und Echtzeit-Lösungen mit der Notwendigkeit von Genauigkeit und Zuverlässigkeit in Einklang bringen? Ein möglicher Weg besteht in der Modellreduktion.

Modellreduktionsverfahren sind mathematische Methoden, die hochdimensionale Gleichungssysteme durch so genannte reduzierte Modelle, das heißt Modelle niedriger Dimension mit nur zehn bis 100 Freiheitsgraden, approximieren. Das Ziel solcher Verfahren ist es, die Lösung hochdimensionaler Systeme schnell und effizient berechnen zu können.

Modellreduktionsverfahren sind vor allem in der Optimierung, Regelung oder für Parameterschätzverfahren von großem Wert, da die partielle Differentialgleichung zur Lösung dieser Probleme für viele verschiedene Parameter ausgewertet werden muss.

Die Herausforderung bei Modellreduktionsverfahren besteht darin, dass die Berechnung der Approximation nicht nur kostengünstig, sondern vor allem auch verlässlich sein muss. Ein Ziel der Forschung des Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES) ist daher die Entwicklung effizient berechenbarer Fehler-schranken oder -abschätzungen für die

niedrigdimensionale Approximation. Die sehr niedrigen Berechnungskosten und Fehlerschranken erlauben es, Simulationen sehr schnell durchzuführen und gleichzeitig den Approximationsfehler explizit zu überwachen. Die Methode ermöglicht es Naturwissenschaftlern und Ingenieuren, Echtzeit-Entscheidungen basierend auf verlässlichen Informationen zu treffen. Für die Anwendung in der Krebstherapie ist das Ziel, die Behandlungsplanung in Echtzeit durchzuführen und notfalls während der Behandlung so zu korrigieren, dass Grenzwerte für die Temperaturverteilung im Gewebe garantiert eingehalten werden. Für die Anwendung in der Geophysik wiederum ist das Ziel, die Schadstoffquelle in Echtzeit zu lokalisieren, um die künftige Verteilung des Schadstoffes vorherzusagen und die weitere Verbreitung des Schadstoffes verhindern zu können.

Diese Themen werden in Zusammenarbeit mit den folgenden Wissenschaftlern erforscht:

Dr. Aaldert Elevelt, Dr. Marco Baragona, Dr. Valentina Lavezzo, Ir. Ralph Maessen (Philips Research Eindhoven), Teresa Nolte, Nikhil Vaidya (Philips Research Eindhoven und RWTH Aachen), Prof. Dr. Martin Grepl, Dr. Mark Kärcher, Prof. Dr. Florian Wellmann (RWTH Aachen), Prof. Dr. med. Christiane Kuhl (Uniklinik RWTH Aachen) und Prof. Dr.-Ing. Volkmar Schulz (Uniklinik RWTH Aachen und Philips Research).

lässt sich die künftige Verteilung des Schadstoffes vorhersagen und die weitere Verbreitung des Schadstoffes verhindern. Obwohl diese zwei Problemstellungen in sehr unterschiedliche Themengebiete fallen, haben beide etwas gemeinsam: den Bedarf für schnelle, effiziente und zuverlässige Lösung von Optimierungsproblemen mit partiellen Differentialgleichungen. Die Lösung eines solchen Problems ist aber häufig komplex und sehr zeitaufwändig. Iterative Lösungsverfahren benötigen die wiederholte Lösung des bereits erwähnten „Vorwärtsproblems“ für verschiedene Werte der Parameter. Bei

---

## Autoren

Univ.-Prof. Karen Veroy-Grepl, Ph.D., betreut das Lehr- und Forschungsgebiet für Hochleistungsrechnen ingenieurmäßiger Modelle und ist Research Group Leader am Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES). Denise Degen, M.Sc., und Zoi Tokoutsis, M.Sc., promovieren am Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science, Tokoutsis im Rahmen des „European Industrial Doctorate“-Programms (ITN-EID), einer Zusammenarbeit zwischen Philips Research Eindhoven, der Uniklinik RWTH Aachen und der RWTH.

---

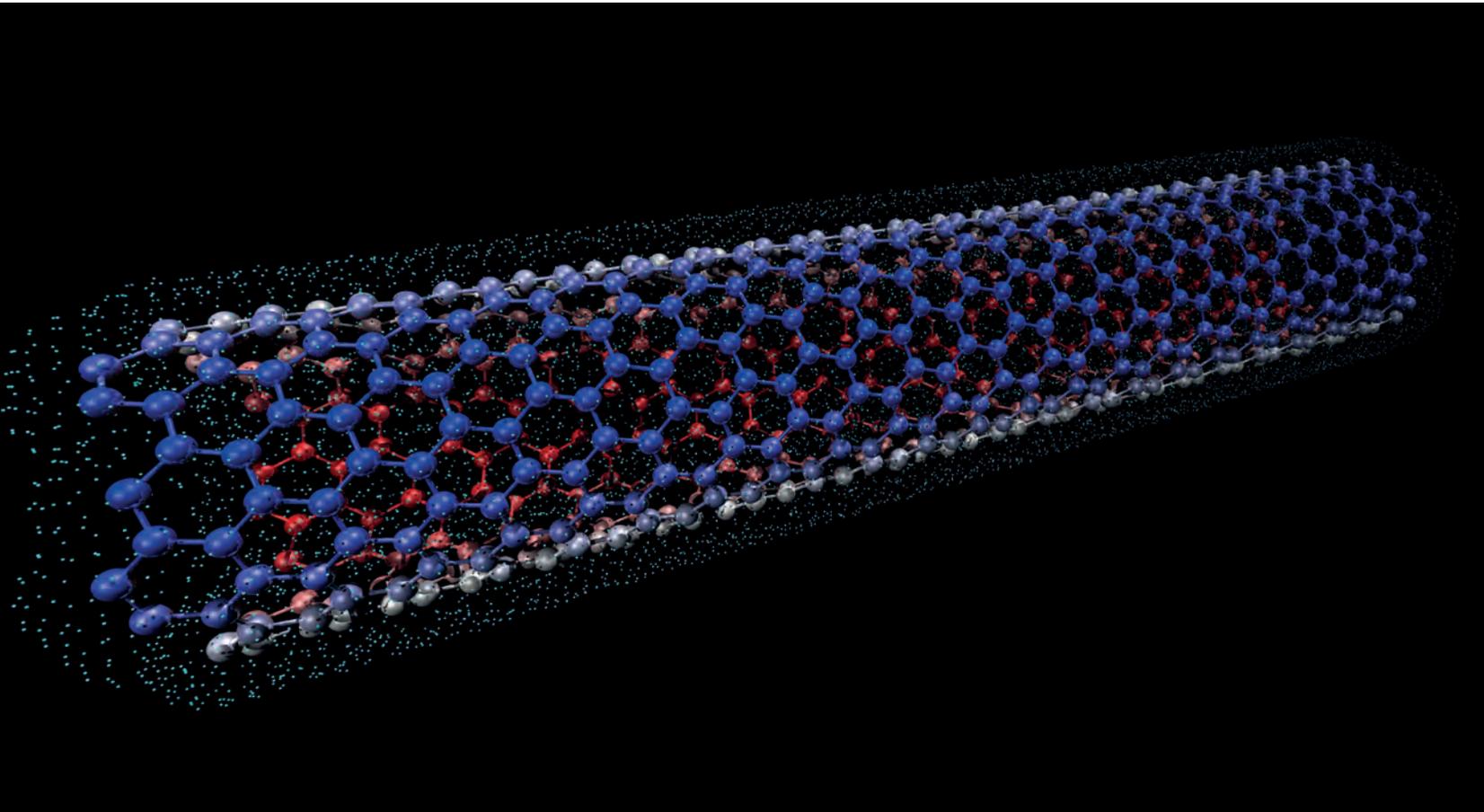


Bild 1: Kohlenstoffnanoröhrchen-Simulation, generiert mit Visual Molecular Dynamics.

Paolo Bientinesi, Markus Höhnerbach, William McDoniel

# Molekulardynamik-Simulationen beschleunigen

Effizientere Simulationsprogramme für heutige und zukünftige Supercomputer

Molecular dynamics simulations account for a large portion of the work performed on modern supercomputers, at the cost of a great deal of time and energy. Researchers from fields as diverse as biology, chemistry, and materials science make use of publicly-available codes to simulate their particular problems on the hardware available to them. Unfortunately, in many cases these codes are inefficient; modern hardware has capabilities that they do not take advantage of. In particular, the expensive calculations involved in obtaining the forces the atoms in the simulation exert on each other do not make

good use of the long vector registers available today. These enable a single processor to simultaneously perform many operations at once, speeding up the code's execution significantly relative to performing them one by one. As part of our collaboration with Intel, we optimize methods for these interactions between atoms for a variety of modern computer architectures, speeding up these parts of a molecular dynamics code by up to 12 times and achieving overall speedups of up to 8 times in simulations dominated by these functions.

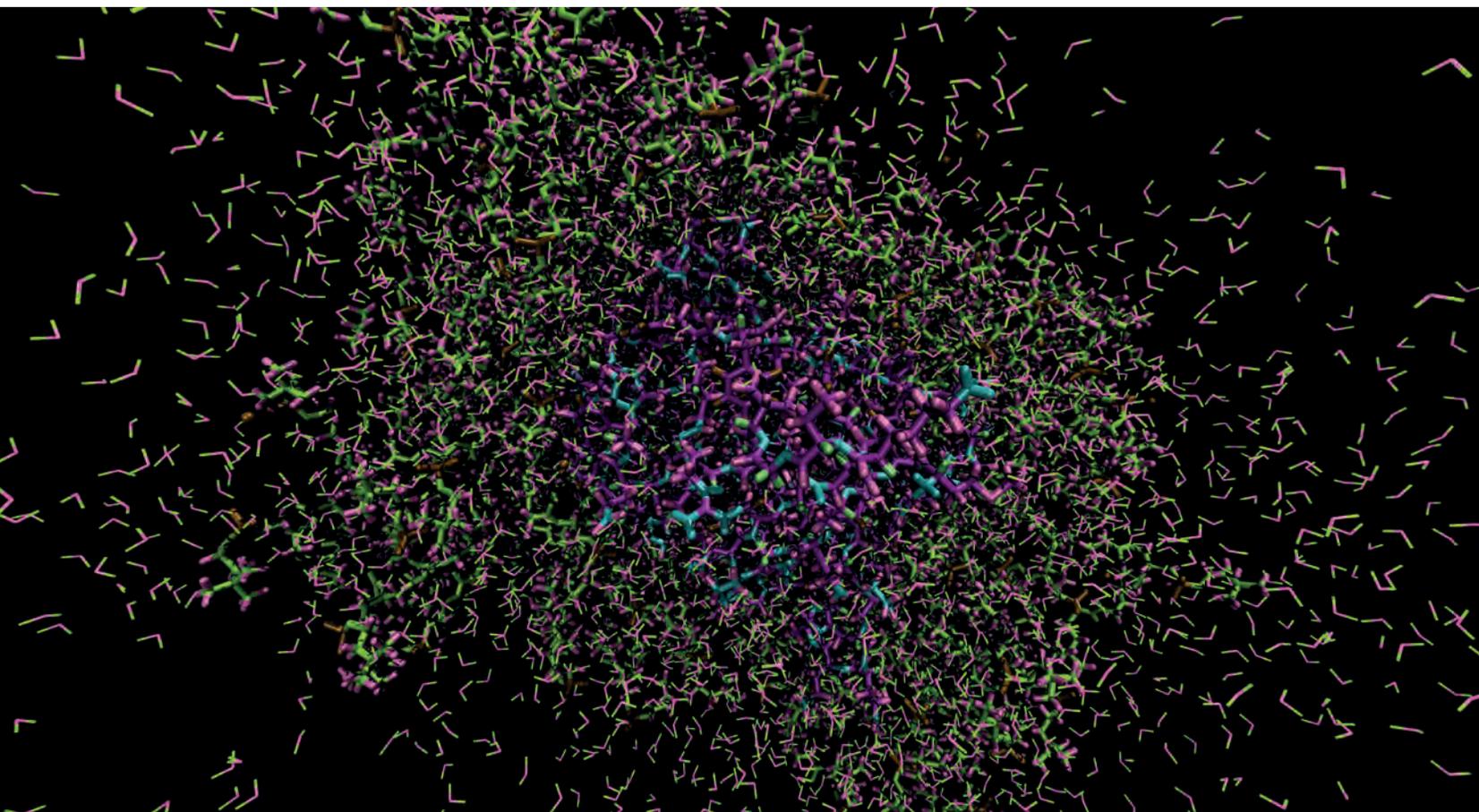


Bild 2: Protein-Simulation, generiert mit Visual Molecular Dynamics.

Molekulardynamik, kurz MD, ist eine weitverbreitete Simulationsmethode, die in vielen Feldern des wissenschaftlichen Rechnens angewendet wird, von Biologie über Chemie bis hin zu den Materialwissenschaften. MD-Simulationen verfolgen die Bewegung von Atomen, indem Kräfte berechnet werden, die durch die Interaktion zwischen Atomen entstehen und dann die Atome den Kräften entsprechend bewegt werden. Damit ermöglicht diese Methode die Untersuchung komplexer makroskopischer Eigenschaften eines Materials, die durch Interaktionen zwischen einzelnen Atomen entstehen.

Zum Beispiel kann MD dazu genutzt werden, die Faltung eines Proteins innerhalb einer Zelle zu simulieren. Von dem physikalischen Verständnis der einzelnen Atome lassen sich Schlüsse ziehen, wie sich das gesamte Molekül verhält. Die Methode ist so nützlich und vielseitig anwendbar, dass MD-Simulationen einen großen Teil der verfügbaren Rechenzeit auf Supercomputern in Anspruch nehmen. Die Rechenzeit auf Supercomputern ist nicht kostenlos. Das Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES) arbeitet daran, MD-Simulationen effizienter zu machen, um so die benötigte

Rechenzeit zu verringern. Damit wird Energie gespart und Rechenzeit für andere Projekte freigesetzt.

Im Rahmen dieser Forschung wird das weitverbreitete Molekulardynamik-Programm LAMMPS, das von den Sandia National Laboratories in den USA entwickelt wurde, genutzt. Zudem besteht eine enge Zusammenarbeit mit „Intel“ im Rahmen eines „Intel Parallel Computing Center“. Der Fokus liegt auf der Optimierung von Schlüsselroutinen im LAMMPS zur Berechnung von paarweisen Interaktionen. In diesen Routinen werden Organisation und Formulierung des Programmcodes geändert, um diese optimal an die Eigenschaften moderner Hauptprozessoren anzupassen und somit erheblich zu beschleunigen. Da diese Routinen einen Großteil der Programmlaufzeit in Anspruch nehmen, führen die Optimierungen zu einer signifikanten Beschleunigung der gesamten Simulation. Das Ziel ist dabei die Verbesserung der Programmlaufzeit auf verschiedenen Supercomputern mit verschiedensten Prozessoren, einschließlich der Hardware der RWTH Aachen. Insbesondere zählen auch die so genannten „Xeon Phi“-Prozessoren und Co-Prozessoren von Intel dazu, die

speziell für das wissenschaftliche Rechnen ausgelegt sind. 2017 hat die RWTH eine Reihe dieser Prozessoren beschafft. Die neuen Algorithmen und der Programmcode sind ausreichend flexibel, um die verschiedenen Rechnerarchitekturen effizient auszunutzen. Moderne Prozessoren haben im Vergleich zu vorangegangenen Generationen längere Vektor-Register. Dies bedeutet, dass Prozessoren heutzutage mit vier, acht oder gar 16 Paaren von Operanden gleichzeitig rechnen können. Dabei nehmen sie genau so viel Zeit in Anspruch, als würden sie mit einem Paar rechnen. Folglich kann die Ausführung einer numerischen Berechnung bis zu 16-fach beschleunigt werden. Allerdings ist diese „Vektorisierung“ nur dann möglich, wenn genau die gleiche Operation für alle Operandenpaare auszuführen ist: Alle Paare können entweder multipliziert oder addiert werden. Zwar können einfache Programme automatisch vektorisiert werden, zum Beispiel die Multiplikation zweier langer Listen von Zahlen. Aber bei komplizierteren Programmen kann der Compiler – das Programm, das den Code in das ausführbare Binärformat übersetzt – häufig solche Optimierungsmöglichkeiten verwerfen, obwohl sie zu großen

Bild 3: Diskussion über die Visualisierung einer Simulation.

Foto: Peter Winandy



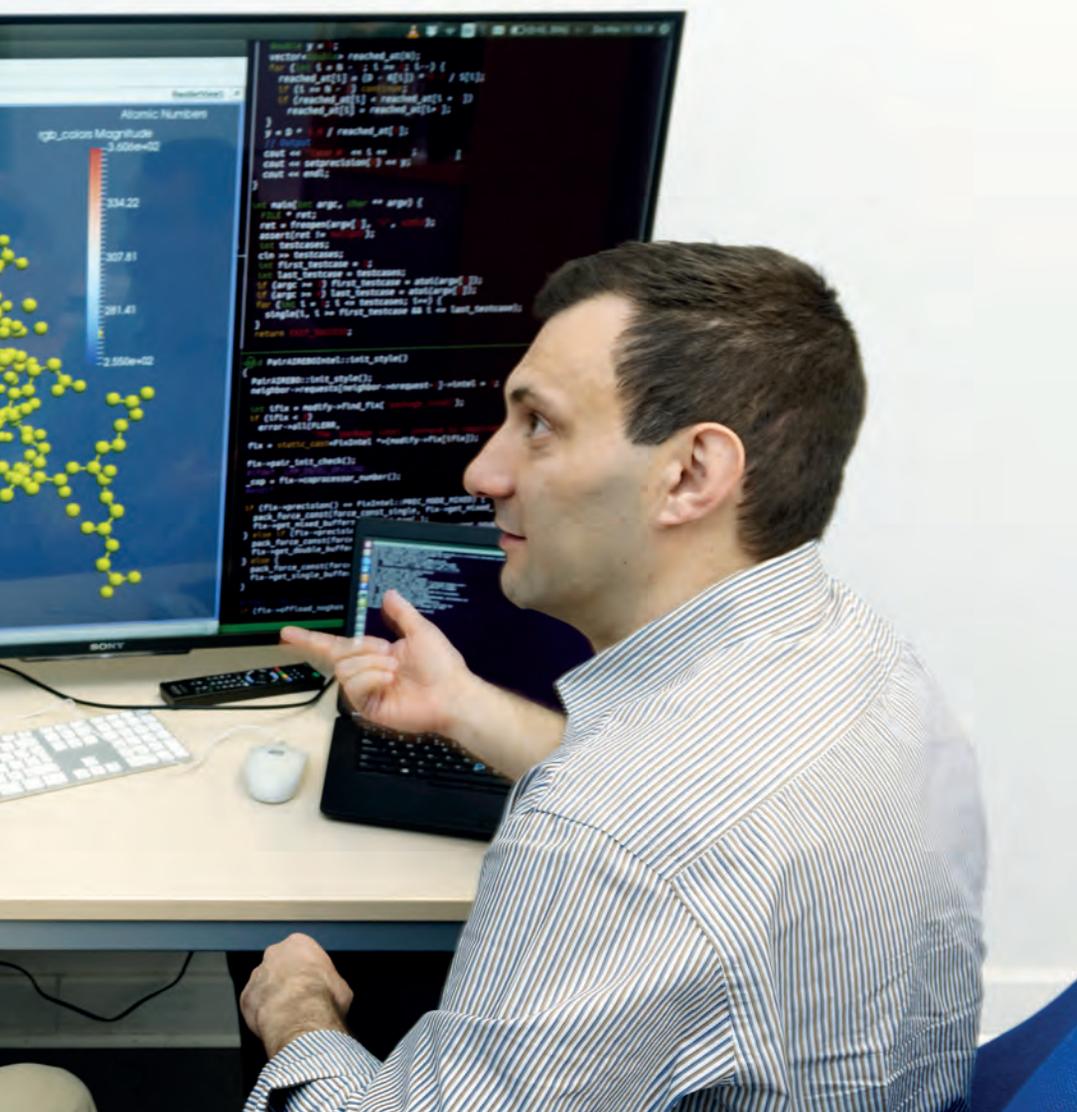
Zeitgewinnen führen könnten. MD-Simulationen sind eines der Schulbuchbeispiele für Programme, die zwar prinzipiell von Vektorisierung profitieren könnten, aber von Compilern nicht ohne weiteres vektorisiert werden können.

Eine MD-Simulation berechnet die Interaktion zwischen jedem Atom mit dessen Nachbarn. In der Tat ist dies der Arbeitsschritt, der typischerweise die meiste Zeit beansprucht. Um die Kräfte zu berechnen, die auf das einzelne Atom wirken, ist eine „Potenzialfunktion“ zwischen jedem Atom und allen benachbarten Atomen zu berechnen. Obwohl diese Potenzialfunktion viele verschiedene Formen annehmen kann und ihre letztendliche Wahl durch den Anwender in Abhängigkeit von der konkreten Simulation getroffen wird, haben sie doch einiges gemeinsam. Insbesondere ist die Berechnung der Funktion für ein gegebenes Paar von Atomen unabhängig von der Berechnung für alle anderen Atompaare, sodass Vektorisierung hier eine Verbesserung der Laufzeit verspricht.

Um die Potenzialfunktionen zu vektorisieren, müssen mehrere Herausforderungen gemeistert werden. Zum Beispiel sind verschiedene Ansätze für verschiedene Hardware-Konfigurationen vonnöten. Einige Maschinen sind so konfiguriert, dass „Offloading“ für Teile der Berechnung möglich ist, um diese Teile auf speziellen Co-Prozessoren auszuführen und damit erhöhte Rechenkapazität zugänglich zu machen – im Tausch für Kommunikationskosten, um die Daten zu dem Co-Prozessor und zurück zu schaffen. Das so genannte „Buckingham“-Potenzial, das zur Simulation einfacher Moleküle geeignet ist, kann von Offloading zum „Xeon Phi“-Co-Prozessor profitieren. In Zusammenarbeit mit Intel wurde diese Möglichkeit implementiert. Indem

gewisse Simulationsparameter separat berechnet, gespeichert und die Position der Atome zu Beginn eines jeden Zeitschrittes auf den „Xeon Phi“ geladen wurden, konnten anschließend die langen Vektor-Register des „Xeon Phi“ die Berechnung der Interaktion etwa acht Mal schneller als zuvor ausführen. Das „Tersoff“ und das „AIREBO“-Potenzial sind Beispiele für kompliziertere Potenziale, die gewisse Atombindungen modellieren, welche zum Beispiel in Kohlenstoff-Nanoröhrchen vorkommen. Bei diesen Potenzialen hängt die Interaktion zwischen jedem Paar von Atomen auch von den umliegenden Atomen ab. Die hauptsächliche Herausforderung für die Vektorisierung dieser Potenziale ist, dass die Anzahl der Nachbarn häufig sehr gering ist, sodass eine Vektorisierung über die Nachbarn nicht zur vollen Auslastung breiter Vektor-Register führt. In einem

Kohlenstoffmolekül hat jedes Atom in der Regel nur drei oder vier Nachbarn, mit denen es interagiert. Selbst ein handelsüblicher PC kann heutzutage Vektor-Operationen mit bis zu acht Elementen durchführen, ein Smartphone kann immer noch vier Elemente auf einmal berechnen. Ein spezialisierter „Xeon Phi“ hat dagegen 16 Vektor-Elemente. Diese Zahlen müssen noch halbiert werden, sofern der Anwender die Berechnung in doppelter Genauigkeit durchführt. Am AICES wurden mehrere Vektorisierungsstrategien entwickelt, um die vorhandene Vektor-Breite auf vielerlei Hardware voll auszunutzen, mit einer Verbesserung der Laufzeit von bis zu acht Mal im Falle des „Xeon Phi“. Der Code läuft auf vielen verschiedenen Arten von Hardware, ohne dass weitgehende Änderungen am Programmcode nötig sind. Potenzialfunktionen wie „Buckingham“ oder



„Tersoff“ sind nur für solche Berechnungen nützlich, bei denen Interaktionen zwischen Atomen berechnet werden, die nahe beieinander liegen. Natürlich könnte man prinzipiell die gleichen Funktionen auf weiter voneinander entfernte Atompaaire anwenden. Allerdings würde die Laufzeit bei einem solchen Verfahren sehr stark steigen, weil überproportional mehr Interaktionen berechnet werden müssen, je weiter die Interaktion reicht. Solche weitreichenden Interaktionen sind aber sehr wichtig für viele Probleme, für die MD ansonsten gut geeignet ist. Atome, die elektrische Ladung tragen, interagieren miteinander sehr viel stärker und über sehr viel längere Strecken, als neutral geladene Atome. Simulationen müssen das entsprechend modellieren. Selbst für Systeme, die insgesamt neutral geladen sind, können solche Interaktionen wichtig sein, wenn das si-

mulierte System inhomogen ist. Zum Beispiel werden in einem Tropfen Wasser die Moleküle an der Oberfläche schwach von den Molekülen im Inneren des Tropfens angezogen. Eine weitverbreitete Methode, um diese weitreichenden Interaktionen zu approximieren, ist „particle-particle particle-mesh“, kurz PPPM. Wenn die Simulationen größer werden – mehr Zeitschritte machen, mehr Atome enthalten – und auf mehr Rechenknoten laufen, wird PPPM relativ gesehen immer teurer. Das AICES verbessert die Performance der Simulation im Ganzen, indem die PPPM-Implementierung in LAMMPS optimiert wird. Die Kernidee von PPPM ist, die Interaktion zwischen den Atomen nicht direkt zu berechnen, sondern ein Gitter zur Hilfe zu nehmen. Dazu wird die Ladung der Atome erst auf das Gitter verteilt. Anschließend wird dann das Potenzial auf diesem Gitter berechnet;

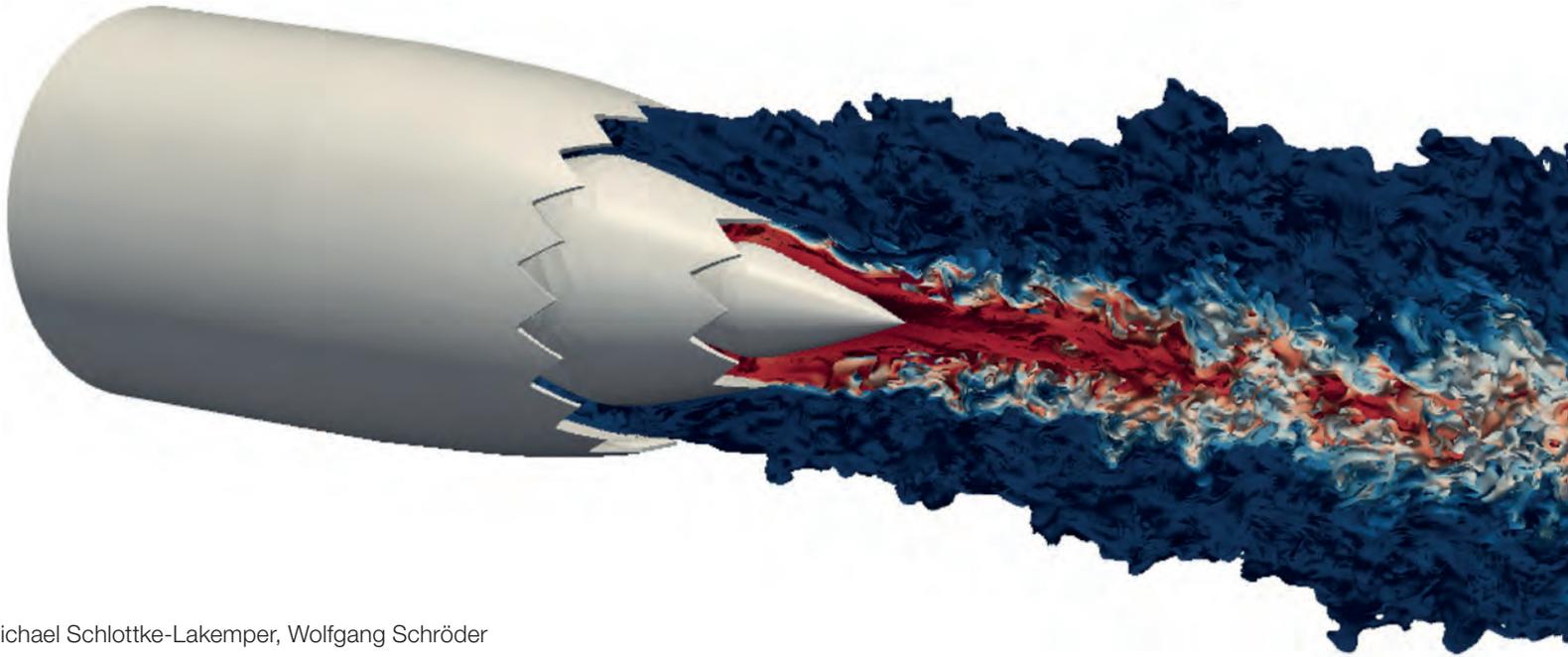
dies geschieht effizient durch die Nutzung der schnellen Fourier-Transformation. Daraus lassen sich wiederum die Kräfte auf die einzelnen Atome von den nahe liegenden Gitterpunkten errechnen. Die Genauigkeit und der Aufwand dieser Methode hängen einerseits von der Auflösung des Gitters und andererseits von der Anzahl der Gitterpunkte, mit der jedes Atom interagiert, ab. Der Schlüssel zur Vektorisierung von PPPM ist, die Anzahl der Gitterpunkte, mit denen jedes Atom interagiert, zu erhöhen. Dies verlangsamt zwar die Berechnung in einigen Teilen des Programms, aber es sorgt für eine bessere Ausnutzung der Vektor-Register. Außerdem erlaubt die Erhöhung der Anzahl der Gitterpunkte pro Atom, die Gesamtzahl der Gitterpunkte bei gleicher Genauigkeit zu verringern und damit in anderen Routinen Zeit zu sparen. Dadurch wird eine zwei- bis dreifache Verbesserung der Gesamtlaufzeit erreicht. Da LAMMPS ein Open-Source-Programm ist, also für jedermann inklusive Quelltext herunterladbar, ist es besonders wichtig, dass die entwickelten Verbesserungen die Anwender erreichen. Sobald die Optimierung eines Teiles des Codes abgeschlossen und das Resultat gründlich getestet ist, soll deshalb der optimierte Quellcode für die Anwender verfügbar werden – zuerst via AICES und letztendlich mit jedem Download von LAMMPS. Damit trägt die RWTH dazu bei, dass Biologen, Chemiker und Materialwissenschaftler weltweit Zugang zu Tools haben, welche die ihnen zugestandene Rechenzeit auf modernen Supercomputern bestmöglich nutzen.

---

## Autoren

Univ.-Prof. Paolo Bientinesi, Ph.D., betreut das Lehr- und Forschungsgebiet für Algorithmen-Orientierte Code-Generierung für Hochleistungsrechnerarchitekturen. William McDoniel, Ph.D., und Markus Höhnerbach, M.Sc., sind wissenschaftliche Mitarbeiter am Lehr- und Forschungsgebiet.

---



Michael Schlottke-Lakemper, Wolfgang Schröder

# Optimierte Multiphysik-Simulationen auf Höchstleistungsrechnern

Hochgenaue Berechnungen von Flugzeugtriebwerken zur Lärmreduktion

Noise reduction during takeoff and landing is one of the major challenges in civil aviation as well as one of the central aims in European aircraft policy. One proposed measure is the use of serrated engine jet nozzles, which are to be investigated with numerical methods to predict the flow field and the far-field noise. A direct-hybrid scheme is introduced, which improves the parallel efficiency of existing procedures for large-scale problems. Simulation results of a turbulent jet confirm that the approach scales well to thousands of cores. The findings show that a further integration of physical models, numerical techniques, and parallel algorithms is required for the next generation in simulation.

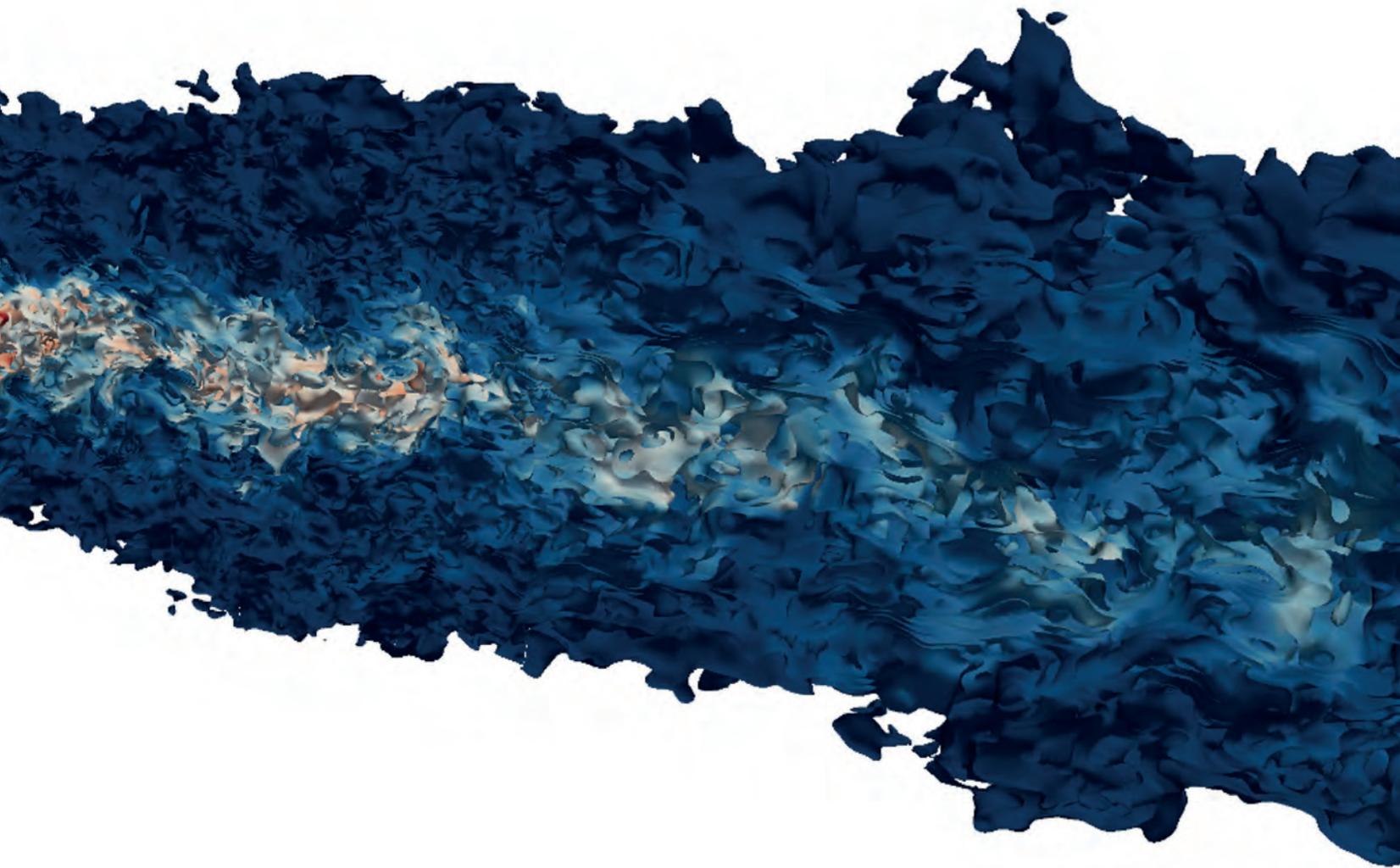


Bild 1: Turbulentes Geschwindigkeitsfeld einer coaxialen Chevron-Düse.

Startende und landende Flugzeuge sind gesundheitsschädlich laut. Die Reduzierung dieser Lärmemissionen ist gegenwärtig eine essenzielle Fragestellung in der zivilen Luftfahrt. Für Europa wird in den nächsten 20 Jahren mit einer Zunahme des Luftverkehrs um fast 50 Prozent gerechnet. Gleichzeitig wird eine weitere Konzentration der Flüge auf wenige Flughäfen erwartet. Fast ein Drittel aller europäischen Flugbewegungen werden sich bis 2035 auf zehn Flughäfen beschränken. Daher hat die Europäische Kommission das Ziel ausgegeben, bis 2050 die Geräuschentwicklung von Flugzeugen um 65 Prozent zu senken. Um dies zu erreichen, müssen viele Flug-

zeugkomponenten unter dem Aspekt der Lärmvermeidung untersucht und gegebenenfalls neu entwickelt werden. Ein vielversprechender Ansatz ist der Einsatz von Chevron-Düsen, bei denen die Austrittskante des Flugzeugtriebwerks ein sägezahnartiges Muster aufweist. Dieses soll das turbulente Strömungsfeld des austretenden Strahls so verändern, dass die Lärmemissionen verringert werden. Damit dies ohne Einbußen in der Leistungsfähigkeit der Triebwerke erreicht werden kann, muss die Form dieser Chevrons optimiert werden. Neben experimentellen Untersuchungen kommen dabei vor allem rechnergestützte Verfahren zum Einsatz. Zum einen ist dies meist mit re-

duzierten Kosten und einem schnelleren Erkenntnisgewinn verbunden, zum anderen erlauben numerische Simulationen oft detailliertere Einblicke in die physikalischen Zusammenhänge. Angesichts der gleichzeitig stetig wachsenden Anforderungen an die numerischen Simulationen müssen hierfür neue Verfahren entwickelt werden, bei denen die physikalische Modellierung, die Numerik und die Parallelisierung optimal aufeinander abgestimmt sind.



Bild 2: Zusätzlich zu den numerischen Untersuchungen werden Experimente im Windkanal des Aerodynamischen Instituts durchgeführt.  
Foto: Peter Winandy



### **Numerische Methoden zur Lärmvorhersage**

Bei der Simulation von Strömungsfeldern werden die Navier-Stokes-Gleichungen verwendet, aus denen sich im Prinzip alle Informationen zur Schallentstehung und -ausbreitung gewinnen lassen. Die akustischen Wellen haben jedoch im Vergleich zum turbulenten Strömungsfeld im Unterschall eine deutlich größere Wellenlänge bei gleichzeitig kleinerer Amplitude. Das macht eine „direkte“ Simulation von Schallfeldern mit den Navier-Stokes-Gleichungen sehr aufwändig und teuer. Als Alternative haben sich daher Verfahren etabliert, bei denen das Strömungsfeld und das Akustikfeld in zwei getrennten Schritten bestimmt werden. Zunächst wird in einer klassischen Strömungssimulation die Strömungslösung ermittelt. Aus dieser werden im Anschluss Schallquellen extrahiert, deren Ausbreitung dann in einer eigenständigen Akustiksimulation berechnet wird. Dieser „hybride“ Ansatz separiert somit die Strömungsphysik von der Schallausbreitung, weshalb man auch von einer Multiphysik-Simulation spricht. Dabei erlaubt die Trennung der Lösungsverfahren, dass die Gitterauflösung und die numerische Methode in beiden Simulationen an die jeweiligen Genauig-

keitsanforderungen angepasst werden kann. Hybride Methoden wurden bereits erfolgreich auf eine Vielzahl von Problemstellungen angewandt, zum Beispiel für die Vorhersage der Lärmentwicklung von Vorflügeln, bei Hinterkanten-Umströmung, bei Verbrennungslärm oder für Verbrennungsinstabilitäten. Die oben beschriebenen Chevron-Düsen stellen aber eine besondere Herausforderung dar, da aufgrund der Komplexität der Düsengeometrie sehr viele Gitterzellen notwendig sind. Bei typischerweise einer Milliarde Zellen oder mehr steigt die Datenmenge deutlich an, die bei dem hybriden Ansatz zwischen der Strömungs- und der Akustiksimulation ausgetauscht werden muss. Für eine einzelne Berechnung können so leicht über 100 Terabytes an Quellinformationen anfallen, was selbst auf modernen Höchstleistungsrechnern zu Schwierigkeiten führt. Dies schränkt die Nutzbarkeit von hybriden Verfahren für besonders große Simulationen deutlich ein. Zudem bedingt die Größe der genutzten Gitter, dass die Simulationen auf immer mehr Prozessoren parallel ausgeführt werden. Um in angemessener Zeit ein Ergebnis zu erhalten, kommen dabei üblicherweise 10.000 bis über 100.000 Rechenkerne zum Einsatz. Allerdings lässt sich die parallele Datenver-

arbeitung nicht im gleichen Maße skalieren wie die verwendeten numerischen Methoden. Das bedeutet im Extremfall, dass bei sehr großen Berechnungen ein Großteil der Rechenzeit darauf verwendet wird, die akustischen Quelldaten entweder auf das Festplattensystem zu speichern oder von dort wieder zu laden, während die Rechenkerne in der gleichen Zeit zum Nichtstun verurteilt sind.

### **Das direkt-hybride Verfahren**

Um diese Limitierungen des Speichersystems zu umgehen, wurde am Aerodynamischen Institut zusammen mit dem JARA-HPC Sim-Lab „Highly Scalable Fluids & Solids Engineering“ eine neue Methode für hochparallele Akustikberechnungen entwickelt. In diesem direkt-hybriden Verfahren werden sowohl der Strömungslöser als auch der Akustiklöser gleichzeitig ausgeführt. Dadurch kann die Problematik des Datenaustauschs über die Festplatte restlos vermieden werden, da die Quellinformationen direkt im Hauptspeicher des Computers übertragen werden. Zudem nutzen beide Simulationen ein gemeinsames hierarchisch-kartesisches Gitter. Dabei lassen sich feine Gitterzellen über eine Baumstruktur eindeutig den jeweils nächstgrößeren Zellen

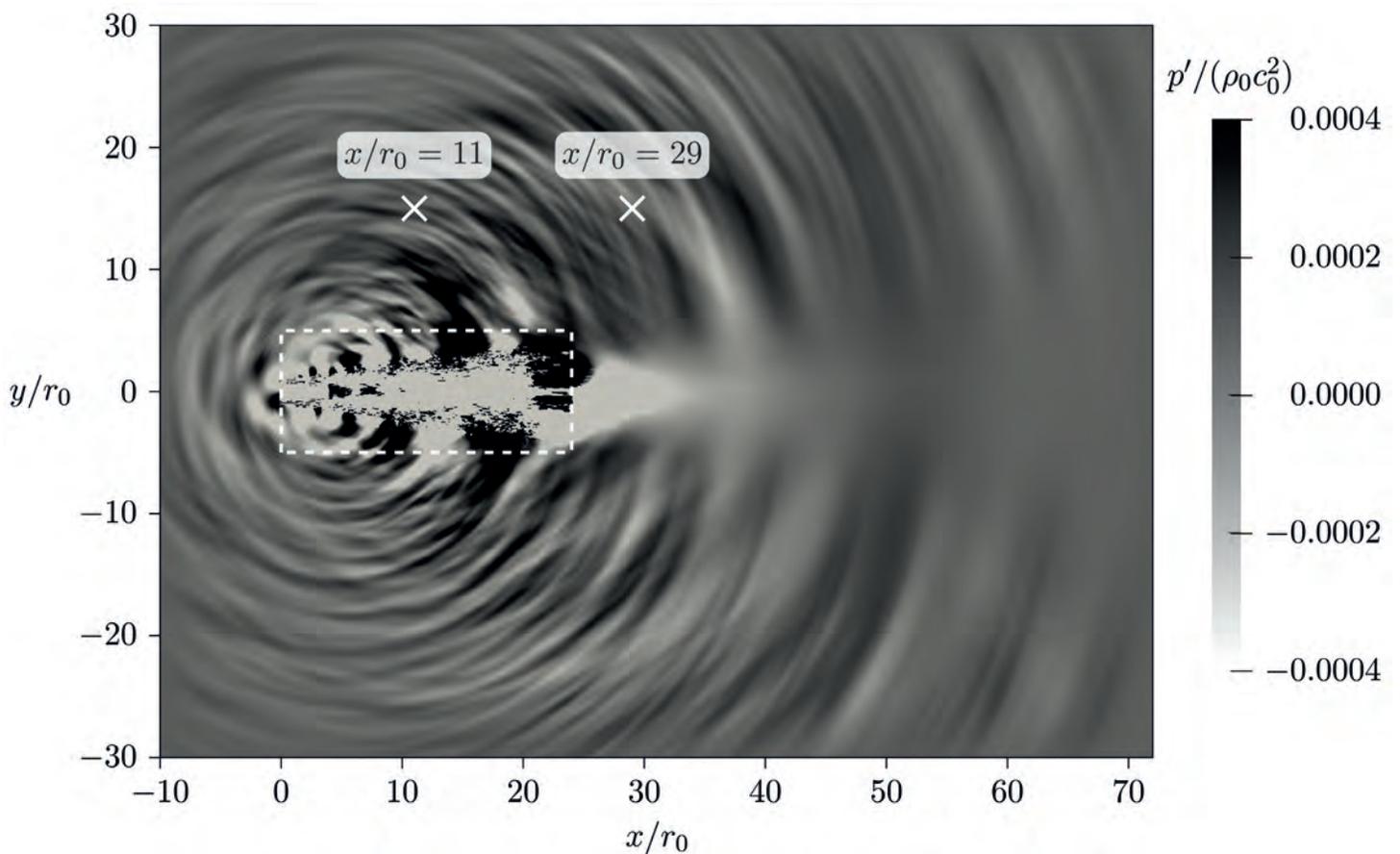


Bild 3: Akustisches Druckfeld des Freistrahls mit Quellgebiet (gestricheltes Rechteck) und Mikrofonstellen  $x/r_0 = 11$  (seitliche Richtung) und  $x/r_0 = 29$  (stromabwärts).

zuordnen. Um in den beiden Simulationen unterschiedliche Gitterauflösungen zuzulassen, nutzen die beiden Löser entsprechend ihren Anforderungen unterschiedliche stark verfeinerte Zellen. Über die gemeinsame Baumstruktur lassen sich die Quelldaten dennoch effizient von einer Simulation zur anderen übertragen, ohne dass ein zusätzlicher Austausch über Prozessorgrenzen hinweg nötig ist.

In einer ersten Anwendung wurden mit der direkt-hybriden Methode die Lärmemissionen eines Freistrahls bestimmt, dessen Ausströmgeschwindigkeit das 0,9-fache der Schallgeschwindigkeit beträgt. Der Freistrahл strömt hierbei von links nach rechts und liegt innerhalb des Gebietes, in dem auch die akustischen Quelldaten ausgetauscht werden. Während in Seitenrichtung die Ausbreitung von sehr breitbandigen Lärmemissionen zu finden ist, wird das Druckfeld weiter stromab vor allem von niederfrequenten Schallwellen dominiert. Diese Beobachtung wird bestätigt, wenn man die Drucksignale an den Mikrofonpunkten über die Zeit auswertet.

Für die Analyse des Freistrahls wurden in der Strömungssimulation 60 Millionen Zellen und in der Akustiksimulation 230 Millionen Zellen genutzt. Trotz des verhältnismäßig

kleinen Anwendungsfalls bestätigt der Vergleich zu einem klassischen hybriden Löser bereits die verbesserte Skalierbarkeit des neuen Verfahrens. Neben der Einsparung von 28 Terabytes Speicherplatz konnte weiterhin gezeigt werden, dass das direkt-hybride Verfahren auch bei Vernachlässigung der Datenspeicherung schneller arbeitet als die klassische Methode. Dies weist auf eine effizientere Parallelisierung in der neuen Methode hin, bei der Wartezeiten durch verbesserte simulationsinterne Kommunikation reduziert werden können.

#### Hochleistungsrechnen im Wandel

Der beschriebene Fall einer hybriden Akustiksimulation ist ein Beispiel für die gegenwärtige Entwicklung der angewandten Numerik in der Wissenschaft. Auf der einen Seite steigt die Rechenleistung der Höchstleistungsrechner beständig an. Die Spitzenleistung des aktuell auf Platz 50 der schnellsten Rechner weltweit platzierten Supercomputers übersteigt die aufsummierte Gesamtleistung der schnellsten 500 Rechner von vor zehn Jahren, die maximale Anzahl an Rechenkernen wurde von 32.000 auf über 10 Millionen gesteigert. Da mittlerweile das Potenzial durch die Nutzung von noch mehr Prozes-

soren fast ausgereizt ist, kommen zudem verstärkt Systeme zum Einsatz, bei denen die Leistungssteigerung durch den Einbau von Grafikkarten und ähnlichen Hardware-Komponenten erzielt wird. Diese heterogenen Rechnerarchitekturen erhöhen die Anforderung an die wissenschaftlichen Programme deutlich, da sie für eine effiziente Ausführung genau auf die entsprechende Hardware abgestimmt sein müssen.

Auf der anderen Seite wachsen auch die Möglichkeiten für die wissenschaftlichen Anwendungen selbst, da die gesteigerte Rechnerkapazität auch neue Arten von numerischen Untersuchungen zulässt. Vor allem in den ingenieurwissenschaftlichen Disziplinen geht der Trend in die Richtung von Multiphysik-Simulationen. So werden am Aerodynamischen Institut neben Akustikproblemen beispielsweise auch Partikelströmungen, Fluid-Struktur-Interaktionen oder Verbrennungsprobleme simuliert. Sie alle beinhalten die Verbindung von zwei oder mehr verschiedenen Lösungsverfahren. Dadurch erhöht sich die Komplexität bei der Methodenentwicklung deutlich, da neben einer mathematisch korrekten Verknüpfung verschiedener physikalischer Modelle auch immer die effiziente Kopplung für die parallele



Bild 4: Vorbereitung eines Triebwerksmodells.  
Foto: Peter Winandy

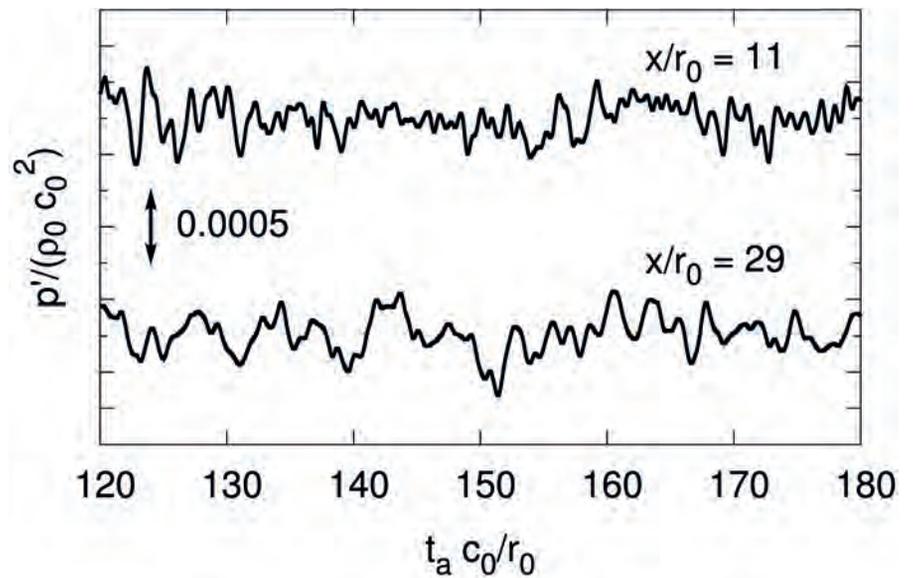
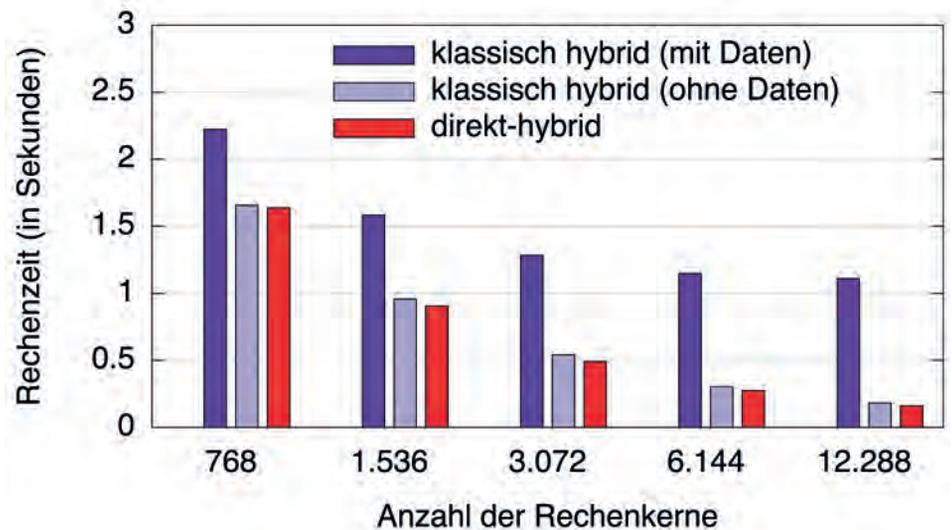


Bild 5: Zeitliche Analyse des akustischen Drucksignals an den Mikrofonstellen.

Bild 6: Vergleich der Rechenzeit zwischen dem klassischen und dem direkt-hybriden Verfahren.



Simulation auf tausenden von Prozessoren berücksichtigt werden muss. Diese miteinander verbundenen Entwicklungen führen dazu, dass in Zukunft die Anforderungen an Wissenschaftler im Bereich Numerik noch weiter wachsen werden. Neben dem Verständnis für verschiedene physikalische Modelle sind gute Kenntnisse im Bereich der Numerik und der paralle-

len Programmierung erforderlich. Erst die sinnvolle Kombination dieser Fachgebiete erlaubt es, die gegebenen Problemstellungen simulativ zu untersuchen. Entsprechende Schwerpunkte müssen daher auch in der Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses gesetzt werden, um relevante Forschungsthemen mit Hilfe von numerischen Simulationsverfahren bearbeiten zu können.

## Autoren

Dr.-Ing. Michael Schlottke-Lakemper ist wissenschaftlicher Mitarbeiter am Aerodynamischen Institut und im JARA-HPC SimLab „Highly Scalable Fluids & Solids Engineering“. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Schröder ist Inhaber des Lehrstuhls für Strömungslehre und Leiter des Aerodynamischen Instituts.

# Zum 3D-Modell und zurück

## Algorithmen zur Erzeugung von hochwertigen 3D-Darstellungen

Digital 3D models are nowadays a crucial ingredient in many work and production processes. While modern 3D laser scanners suggest that creating high-quality models is as simple as taking a picture, this is by no means the case. Laser scanners produce overly dense and unstructured point clouds which require sophisticated algorithms to be turned into compact and practically useful 3D models. The industrial standard are quadrilateral surface meshes, which encode smooth piecewise polynomial NURBS surfaces. Traditionally created through mostly manual workflows, novel algorithms based on mixed-integer optimization enable high-quality quadrilateral meshes in an automatic manner. The latest research targets the next major step of 3D models with semantic information by equipping digital geometry representations with a context. After the conversion of raw point clouds into such highly versatile 3D models containing structural information on various levels, work and production processes strongly benefit in terms of time efficiency and overall costs. And that's not all: recent 3D printing technology closes the cycle between real-world objects and digital 3D models by additionally offering the reverse direction from a digital 3D model to a real prototype. In this way algorithms for digital geometry processing are increasingly influencing our everyday life.

Digitale 3D-Modelle sind heutzutage ein wichtiger Bestandteil vieler Arbeits- und Produktionsabläufe. Ob es um Animationsfilme, Produktdesign, Wettervorhersage oder die Simulation eines neuen Autoprototypen geht, die Verfügbarkeit von digitalen 3D-Modellen der beteiligten Objekte ist in jedem dieser Beispiele eine Grundvoraussetzung. Aber woher stammen all diese 3D-Modelle und wie werden sie digital im Computer dargestellt?

### **Aufnahme der Rohdaten mittels 3D-Laserscanning**

Betrachten wir hier als Beispielfall die Erzeugung eines digitalen 3D-Modells von einem real existierenden Automobil. Moderne 3D-Rekonstruktionssysteme, welche 3D-Laserscanner nutzen, suggerieren, dass die Erzeugung von 3D-Modellen nicht schwieriger ist als das Aufnehmen eines Fotos. Bei genauerer Betrachtung wird allerdings schnell klar, dass der Prozess von einem realen Objekt zu einem hochwertigen, digitalen 3D-Modell deutlich komplexer und aufwändiger ist. Tatsächlich ist es erst in den letzten Jahren durch hohen Forschungsaufwand zunehmend gelungen, die kosten- und zeitintensiven (manuellen) Schritte der Erzeugung sukzessive durch (automatische) Algorithmen zu ersetzen.

Im Fall des Automobils, siehe Bild 1, liefert ein 3D-Laserscanner eine hochaufgelöste Punkt-

wolke, also Millionen von Punkten im Raum, die auf der Oberfläche der Autokarosserie liegen. Die Farben der einzelnen Punkte werden zusätzlich mit Hilfe einer hochauflösenden Kamera ermittelt. Möchte man Punktwolken-Darstellungen direkt in einer Anwendung nutzen, ergeben sich allerdings fundamentale Probleme.

Da der Laserscanner das Objekt gleichmäßig abtastet, sind die resultierenden Punktwolken in der Regel unnötig komplex. Für ein geometrisch einfaches Objekt, wie zum Beispiel einen Würfel, werden durch die millimetergenaue Abtastung Millionen von Punkten erzeugt, obwohl eine sehr kompakte Darstellung durch lediglich acht Eckpunkte und sechs quadratische Flächen problemlos möglich wäre. Die Verwendung einer unnötig komplexen Punktwolke wirkt sich im Allgemeinen sehr negativ auf die Rechenzeit aus. Es ist daher wünschenswert, die Punktwolke in eine kompaktere Darstellung umzuwandeln.

### **Von Punktwolken zu Oberflächen**

Wird eine Punktwolke aus der Ferne betrachtet, entsteht zwar der Eindruck einer Fläche, jedoch unterscheidet sich das physikalische Verhalten einer Menge von Punkten signifikant von dem einer geschlossenen Oberfläche. Bei einer Windkanalsimulation beispielsweise erzeugt die Punktwolke kaum einen



Bild 1: 3D-Laserscanner tasten ein Objekt ab und erzeugen Rohdaten in Form einer dichten Punktwolke.

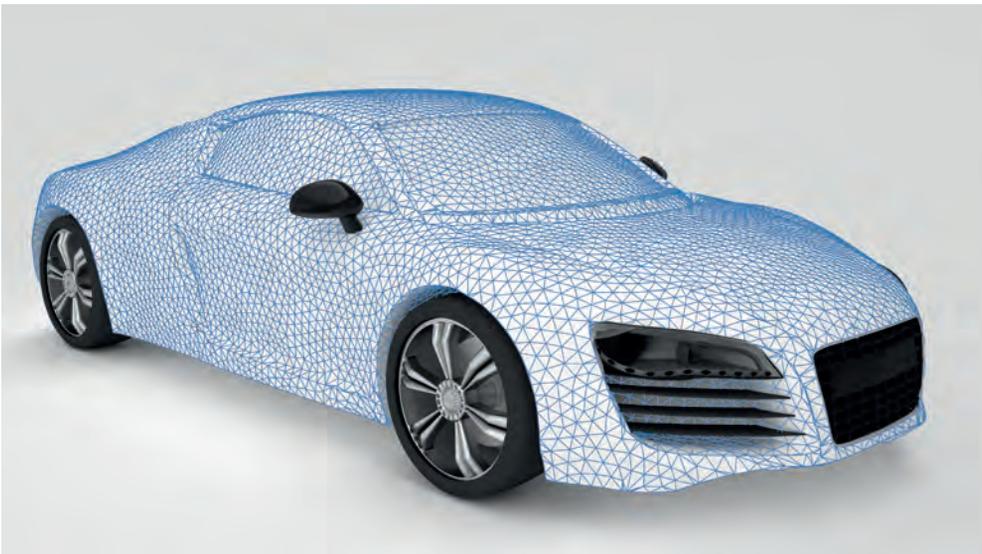


Bild 2: Topologisch korrekte Darstellung der Oberfläche als Dreiecksnetz.

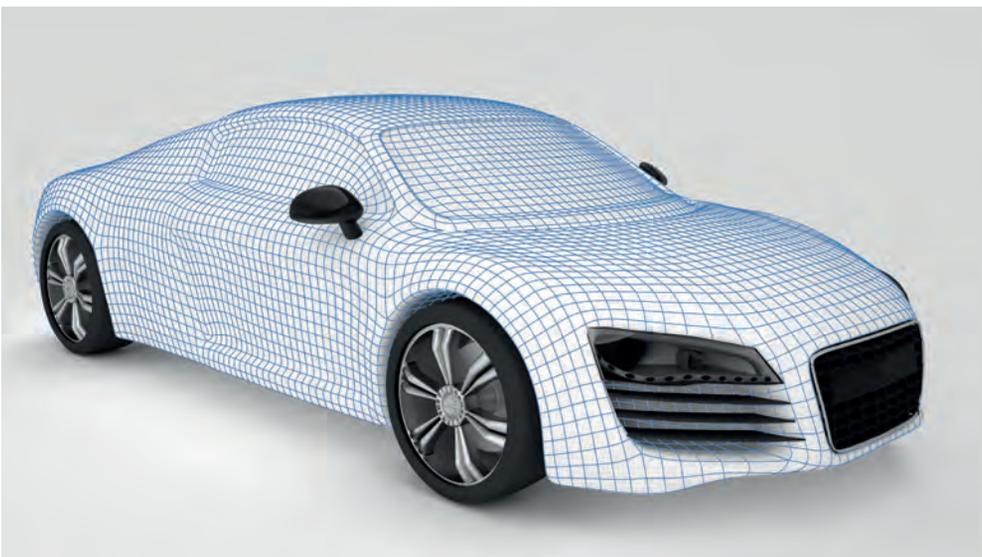


Bild 3: NURBS-Flächen repräsentiert durch Rechtecknetze mit „CAD-Qualität“ sind der heutige Industriestandard.

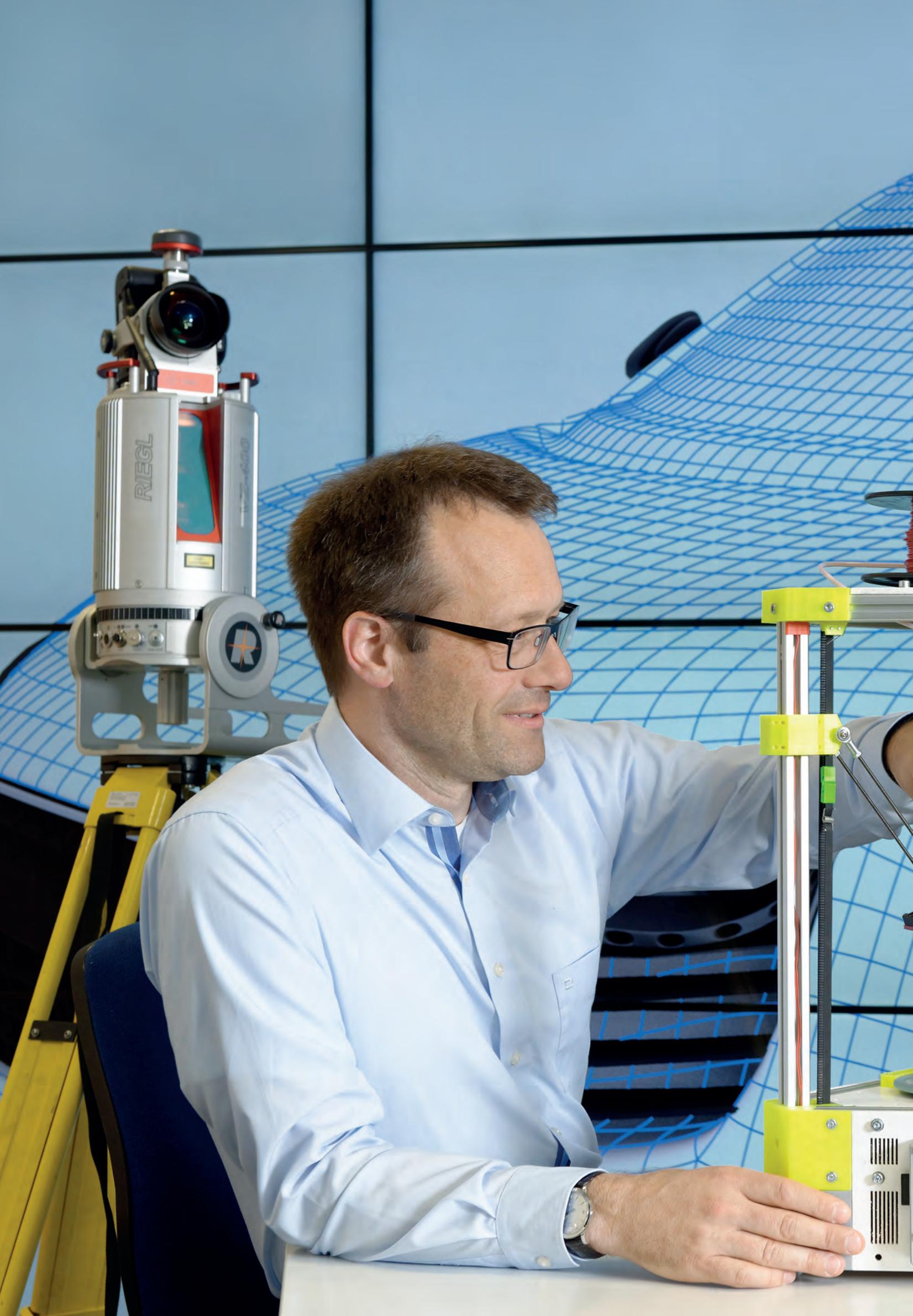
Widerstand, so dass ein Ergebnis basierend auf dem gescannten Auto keine Rückschlüsse auf das reale Strömungsverhalten der geschlossenen Oberfläche erlauben würde. Aus diesem Grund benötigen die meisten Anwendungen eine „wasserdichte“ Darstellung der Oberfläche, zum Beispiel in Form eines polygonalen Netzes, bei dem nicht nur isolierte Punkte, sondern zusätzlich auch Flächenelemente explizit erzeugt werden. In der Fachsprache spricht man dann von einer topologisch korrekten Darstellung der Oberfläche.

Die Nachteile einer Punktwolke wiegen in der Praxis so schwer, dass die Umwandlung in eine kompakte Flächendarstellung sehr häufig von essenzieller Bedeutung ist. Unter Annahme einer hinreichenden Punktdichte existieren bereits automatische Algorithmen, die sowohl Kompaktheit als auch topologische Korrektheit garantieren können. Die dabei am häufigsten verwendeten Flächenbausteine sind Dreiecke.

#### **Anspruchsvoller Industriestandard**

Die Darstellung der Oberfläche als Dreiecksnetz ist bereits deutlich brauchbarer als eine Punktwolke, allerdings erfüllt sie bei Weitem noch nicht die Anforderungen zahlreicher moderner Anwendungen an ein 3D-Modell. In vielen Bereichen werden Modelle mit so genannter „CAD-Qualität“ gefordert, welche den heutigen Industriestandard darstellen. CAD steht hier für „Computer-Aided Design“ und meint eine strukturierte Zerlegung der Oberfläche in ein Gitter von Rechteck-Elementen. Aus Qualitätssicht ist es dabei wichtig, dass sich die einzelnen Elemente sowohl an der Krümmung der Oberfläche ausrichten als auch ein möglichst reguläres und glattes Gitter bilden.

Wie der Name bereits suggeriert, wurden 3D-Modelle mit „CAD-Qualität“ in der Vergangenheit meist manuell erzeugt, indem ein Designer oder Ingenieur in mühsamer Arbeit das gewünschte Gitter auf die Oberfläche zeichnete. Bei der Komplexität heute benötigter Modelle ist ein manuelles Vorgehen längst nicht mehr praktikabel. Daher wurde in den letzten Jahren die Forschung zur automatischen Konvertierung von Dreiecksnetzen zu hochqualitativen Rechtecknetzen intensiviert. Bei diesem Vorgang müssen anspruchsvolle, gemischt-ganzzahlige Optimierungsprobleme gelöst werden, die sowohl kontinuierliche als auch diskrete Freiheitsgrade aufweisen. Dennoch ist es unter maßgeblicher Beteiligung von Forschungsgruppen der RWTH gelungen,



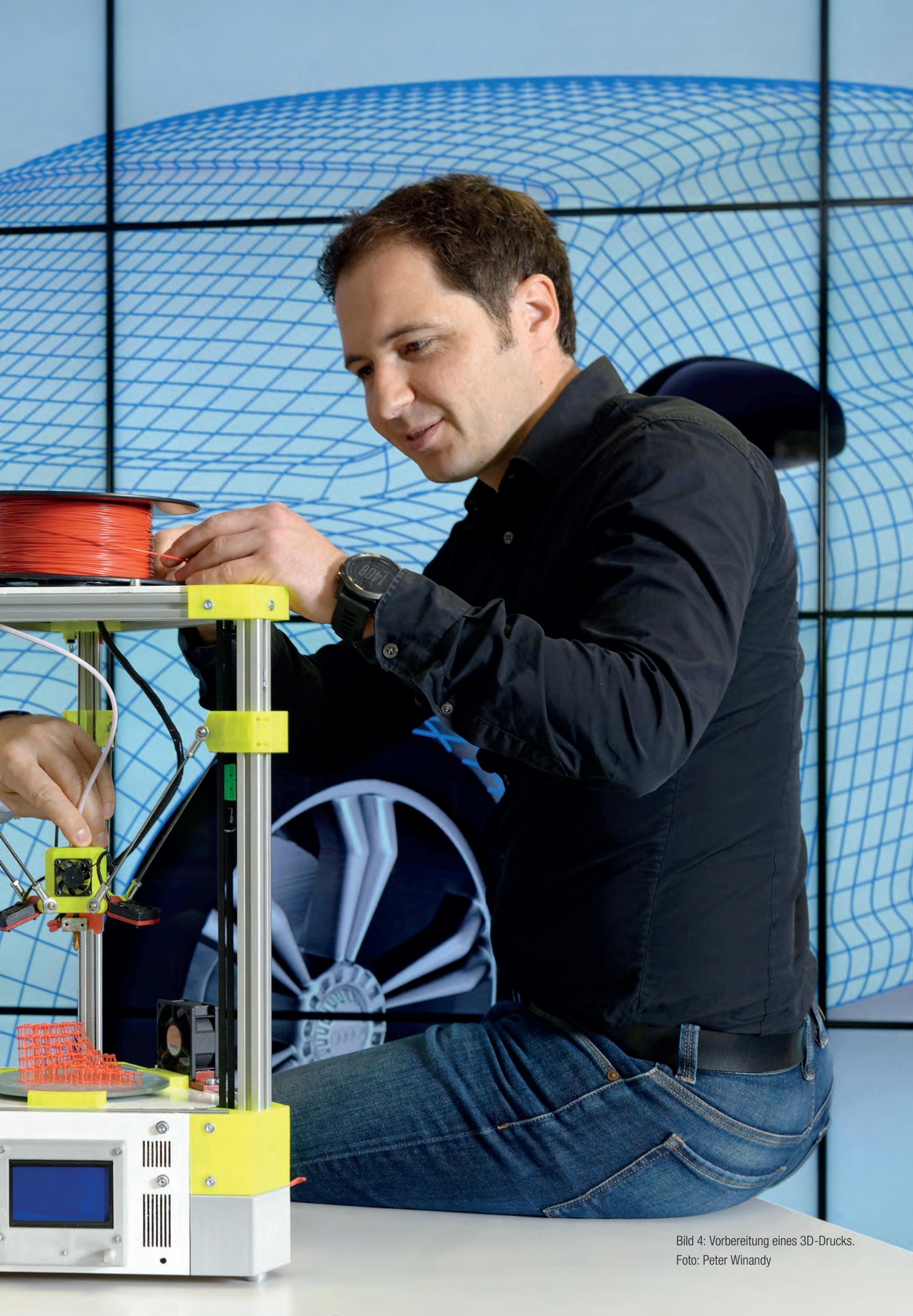


Bild 4: Vorbereitung eines 3D-Drucks.  
Foto: Peter Winandy

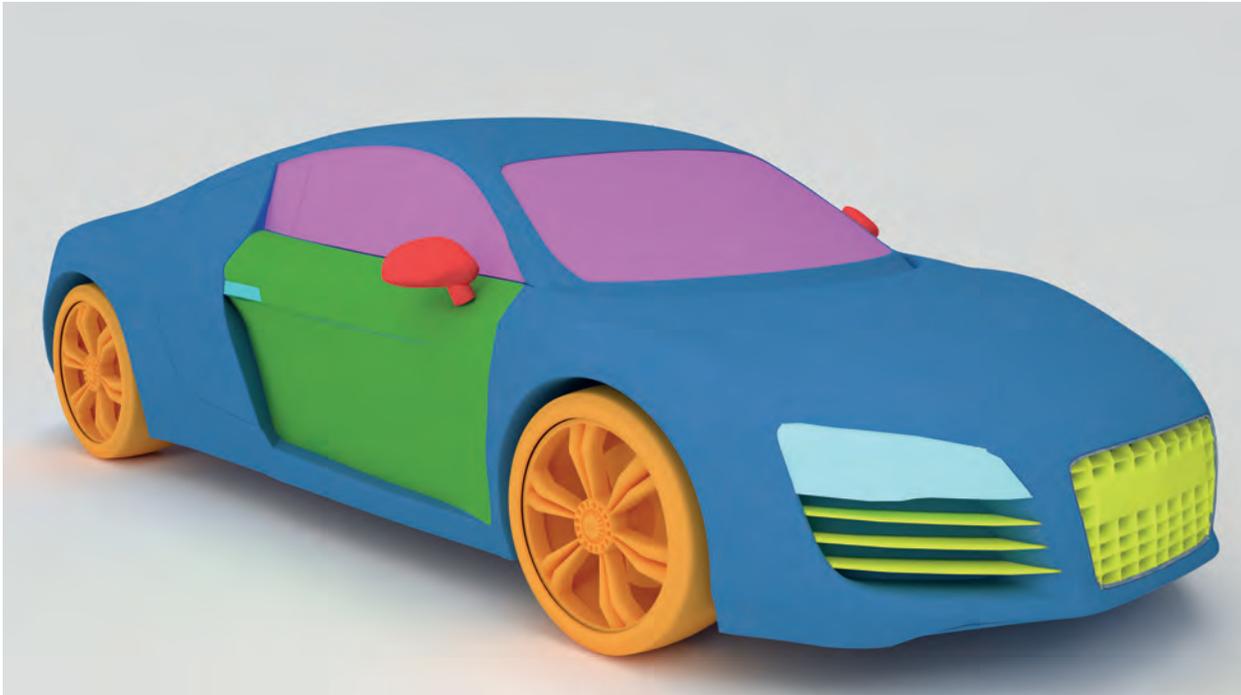


Bild 5: Kontextsensitive Zerlegung der Oberfläche in ihre Einzelteile.

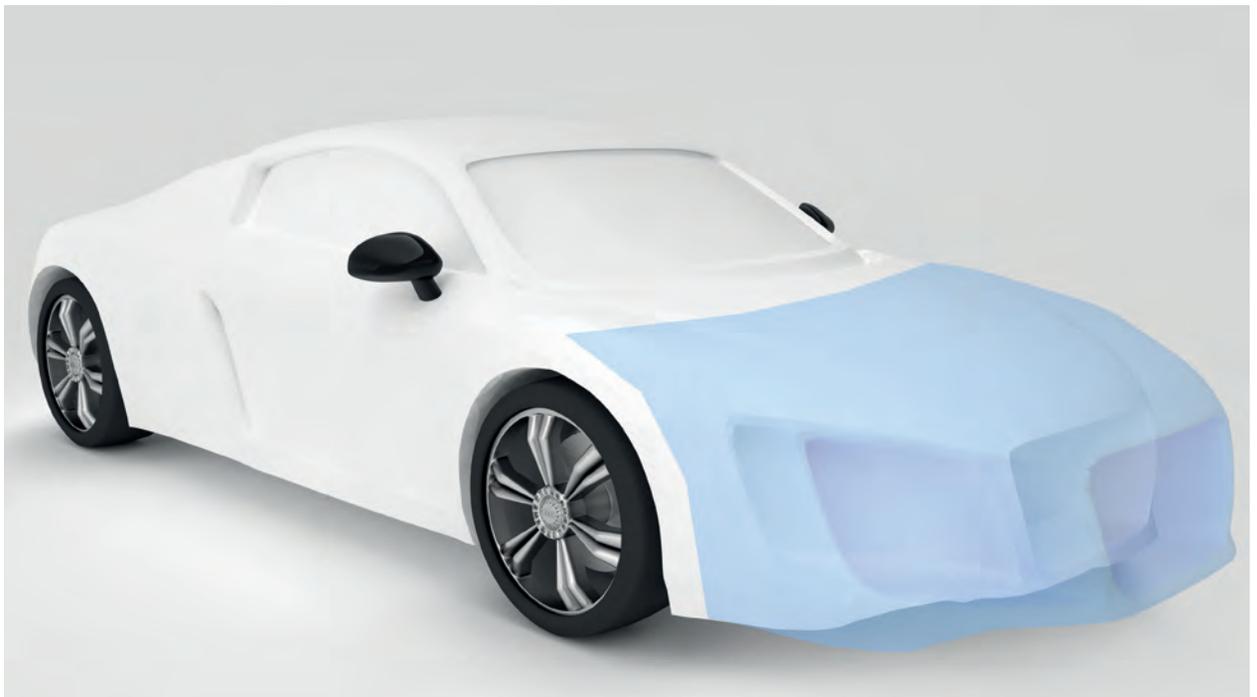


Bild 6: Ein hochwertiges 3D-Modell mit Strukturinformation ermöglicht einfache Modifikationswerkzeuge.

effiziente Algorithmen zu entwickeln, die eine vollautomatische Konvertierung sozusagen „auf Knopfdruck“ ermöglichen.

Rechtecknetze ermöglichen eine qualitativ hochwertige Darstellung der Oberfläche als NURBS-Fläche, NURBS steht für Non-Uniform Rational B-Spline. Die höhere Glattheit dieser stückweise polynominalen Flächen ist nicht nur bei der Beleuchtungsberechnung in der Computergrafik vorteilhaft, sondern ermöglicht darüber hinaus auch deutlich präzisere und effizientere Simulationen. Mittlerweile gibt es einen schnell wachsenden

Forschungszweig im Bereich Computational Engineering – die so genannte Isogeometric Analysis (IGA) – der sich intensiv mit den Vorteilen von NURBS-Modellen für die Simulation beschäftigt.

#### **Modelleigenschaften jenseits der Geometrie**

Eine rein geometrische Darstellung von 3D-Modellen ist nicht immer ausreichend. Immer häufiger benötigen Anwendungen zusätzliche Informationen, welche Objektbereiche mit einem Kontext versehen. Gerade im Zeitalter

des Internets und der immensen verfügbaren Datenmengen ist eine Verknüpfung von Geometrie und Kontext von hohem Interesse. Sobald diese so genannte Semantik bekannt ist, können Teile der Geometrie zum Beispiel vollautomatisiert mit Materialeigenschaften versehen oder anhand von Objektdatenbanken durch Alternativen ausgetauscht werden. Beim Automobil könnte ein Designer so beispielsweise mit sehr wenig Aufwand Varianten von Scheinwerfern erproben.

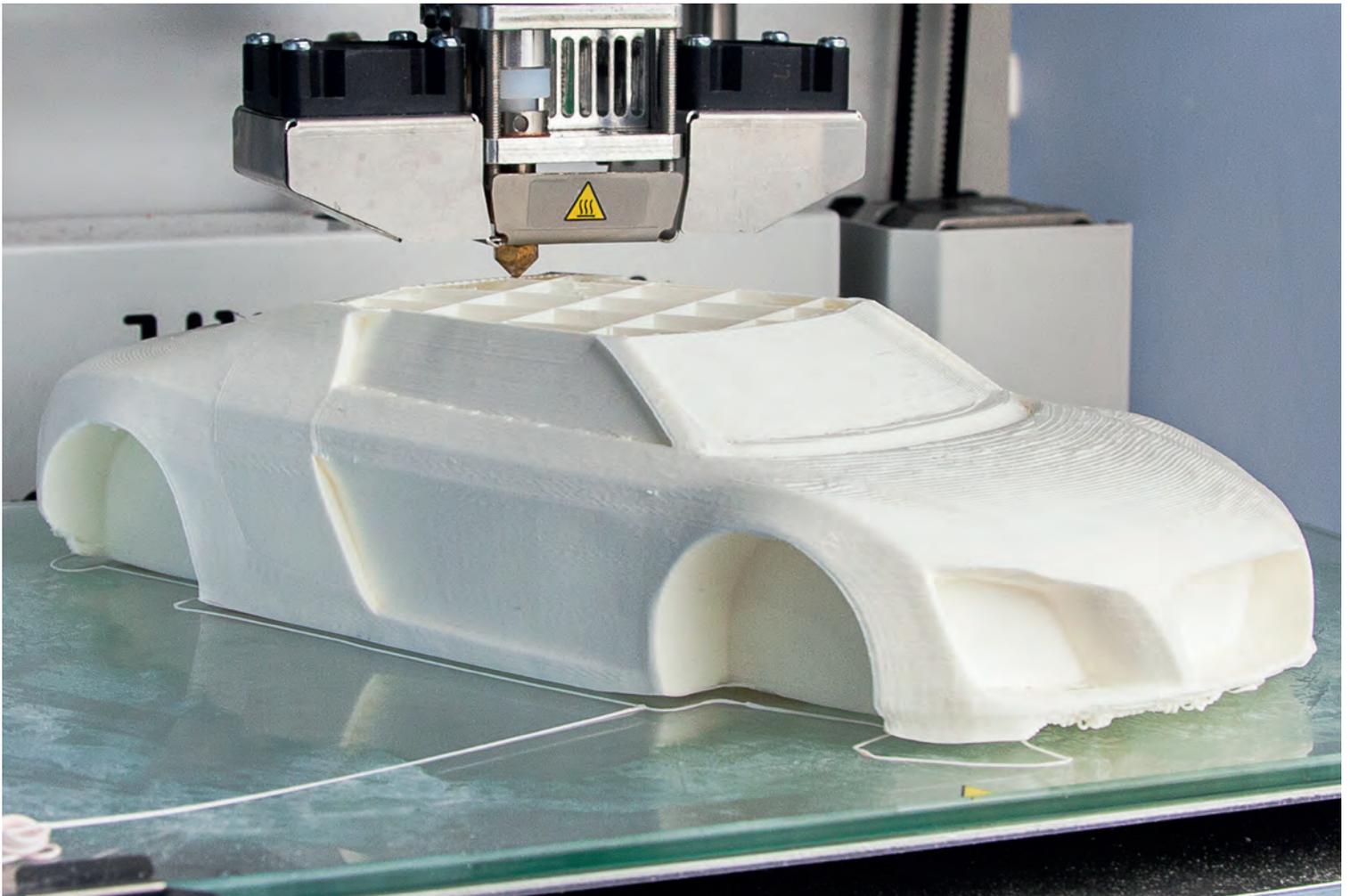


Bild 7: Erzeugung eines realen Prototyps mittels 3D-Druck.

Umgekehrt können die mit Information gefütterten 3D-Datenbanken auch verwendet werden, um neue Objekte automatisch mit semantischer Information zu versehen. Durch Techniken des maschinellen Lernens ist es möglich, ein gegebenes 3D-Modell zu klassifizieren und die einzelnen Teile, wie zum Beispiel Räder, Glasscheiben, Seitenspiegel oder Kühlergrills, algorithmisch zu identifizieren. Im Gegensatz zu Punktwolken können hochwertige 3D-Modelle in einer Vielzahl von Anwendungen eingesetzt werden. Ein typisches Beispiel für das genannte Automobil ist die Formoptimierung. Die Form kann sowohl aus Ingenieur- als auch aus Designersicht verbessert werden. Im ersten Fall besteht das Ziel darin, die messbaren Eigenschaften des Autos zu verbessern, zum Beispiel durch die Verringerung des Luftwiderstands der Karosserie, um Kraftstoff einzusparen oder durch die Vergrößerung des Innenraums, wodurch der Komfort gesteigert würde. Solche Formoptimierungen werden heutzutage meist automatisch durch Algorithmen durchgeführt, die den Einfluss der Form auf ein Simulationsergebnis analysieren.

Im zweiten Fall nimmt ein Designer manuelle Änderungen vor, um die Form ästhetischer zu gestalten. Auch in diesem Szenario ist ein hochwertiges 3D-Modell wichtig, um dem Designer leicht benutzbare Werkzeuge zur Verfügung stellen zu können. Typischerweise durchläuft ein 3D-Modell viele solcher Optimierungsschritte, bevor es allen praktischen Anforderungen genügt. Durch das hier skizzierte digitale Design kann heutzutage beim Einsatz von hochwertigen 3D-Modellen neben hohen Kosten auch viel Zeit eingespart werden.

#### **Vom digitalen 3D-Modell zurück in die Realität**

Moderne 3D-Drucker ermöglichen eine günstige und effiziente Produktion neuer Prototypen. Im Prozess des 3D-Drucks wird ein Objekt schichtweise aufgebaut, indem der Druckkopf geschmolzenes Material entlang der Schnittkurven von 3D-Modell und der jeweiligen Schichtebene aufträgt. Freischwebende Teile werden mit selbstlöslichem Stützmaterial unterbaut. Ein großer Vorteil gegenüber herkömmlichen Produktionstech-

niken besteht darin, dass beliebig komplexe Formen, sogar bis hin zu funktionierenden Mechaniken, in einem Produktionsschritt erzeugt werden können. Kosten und Dauer hängen maßgeblich nur von der benötigten Menge Material ab, nicht aber von der Komplexität der Struktur. Somit ist heutzutage nicht nur die Digitalisierung von 3D-Modellen, sondern darüber hinaus auch der umgekehrte Weg von einem digitalen zu einem realen Modell effizient „auf Knopfdruck“ möglich.

---

#### **Autoren**

Prof. Dr. rer. nat. David Bommes ist Juniorprofessor für Algorithmen zur Gittergenerierung und -Optimierung.

Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Leif Kobbelt ist Inhaber des Lehrstuhls für Informatik 8 (Computergraphik und Multimedia) und Leiter des Visual Computing Instituts (VCI).

---

### **Auszeichnung für Tobias Beck**

Dr. Tobias Beck vom Institut für Anorganische Chemie ist mit dem Wissenschaftspreis 2017 des Industrie-Clubs Düsseldorf ausgezeichnet worden. Dieser wird in Zusammenarbeit mit der Nordrhein-Westfälischen Akademie der Wissenschaften und der Künste jährlich an junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler verschiedener Fachgebiete für praxisrelevante und anwendungsorientierte Forschung vergeben. Der Preis ist mit 20.000 Euro dotiert.

Der 35-jährige Beck wurde für seine Arbeiten im Bereich der Nanotechnologie geehrt. Beck ist es gelungen, Nanopartikel räumlich präzise im Material anzuordnen. Möglich wird dies durch Proteincontainer, die eine genau definierte Größe und Form haben. So lassen sich künftig neuartige Nanomaterialien mit vielfältigen und vielversprechenden Anwendungsmöglichkeiten von der Optoelektronik bis zur biomedizinischen Technik herstellen. Anwendung und Weiterentwicklung der Forschungsergebnisse erfolgen jetzt in Kooperation mit dem Forschungszentrum Jülich und der Uniklinik RWTH Aachen.

Beck studierte Chemie an der RWTH und an der Georg-August-Universität Göttingen. Nach seiner Promotion forschte er an der ETH Zürich mit Förderung durch die Europäische Union im Rahmen eines Marie-Curie Fellowships. Seit 2014 ist der Chemiker am RWTH-Institut für Anorganische Chemie als eigenständiger Nachwuchsgruppenleiter tätig, gefördert durch ein Liebig-Stipendium des Fonds der Chemischen Industrie. Innerhalb der RWTH wurde bereits ein Antrag von Beck im Rahmen der Projektförderung für unkonventionelle und interdisziplinäre Ideen bewilligt. Zudem erhielt er für sein RWTH Start-up „Protein“ Forschungsgelder.

### **Netzwerk mit University of California**

Seit 2013 arbeitet die RWTH im Bereich der Katalyse und der Kernspinresonanz im Aachen-California Network (ACalNet) mit den drei Standorten der University of California in Berkeley, Santa Barbara und Los Angeles. Beteiligt sind außerdem das Forschungszentrum Jülich, das CAT-Catalytic Center in Aachen, das Lawrence Berkeley National Laboratory und das Schlumberger-Doll Research Center in Cambridge, Massachusetts. Diese Zusammenarbeit wurde nun bis Ende 2018 verlängert und erfährt durch Bewilligung des dreijährigen IRES-Programms seitens der US-amerikanischen National Science

Foundation weiteren Aufschwung. IRES steht für International Research Experiences for Students und ermöglicht es, dass jedes Jahr Doktoranden aus Kalifornien an die RWTH kommen, um dort jeweils zwei Monate an einem Forschungsprojekt zu arbeiten. Gefördert wird das Netzwerk durch den Deutschen Akademischen Austauschdienst DAAD. Beteiligt sind aktuell 22 RWTH-Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler sowie 22 der Partner in Kalifornien, die Koordination liegt am RWTH-Center for Molecular Transformations (CMT).

### **EBUS-Award für Dirk Uwe Sauer**

Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Dirk Uwe Sauer, Inhaber des Lehrstuhls für Elektrochemische Energiewandlung und Speichersystemtechnik, wurde mit dem EBUS-Award ausgezeichnet. Der Umweltpreis für Elektrobusse im Öffentlichen Personennahverkehr, kurz EBUS-Award, wird für Verdienste für die Entwicklung und Förderung von umweltfreundlichen Innovationen im ÖPNV vergeben. Neben fünf Unternehmen wurden Bundesumweltministerin Dr. Barbara Hendricks und Sauer persönlich ausgezeichnet. Er erhielt den Preis für seine langjährigen Arbeiten zur Anwendung der Batterietechnik für mobile Anwendungen.

# Namen & Nachrichten

### **Ehrendoktorwürde für Joost-Pieter Katoen**

Univ.-Prof. Dr. ir. Joost-Pieter Katoen vom Lehrstuhl für Informatik 2 (Softwaremodellierung und Verifikation) wurde die Ehrendoktorwürde der Universität Aalborg in Dänemark verliehen. Katoen, der zudem in der Gruppe „Formale Methoden und Werkzeuge“ der Universität Twente in den Niederlanden forscht, wurde für seine wissenschaftlichen Aktivitäten in der Informatik, vor allem im Bereich der Softwaremodellierung und computergestützten Verifikation, ausgezeichnet. Seine Forschungsbeiträge reichen von theoretischen und algorithmischen Leistungen bis hin zur Softwareentwicklung im industriellen Bereich, insbesondere auf dem Gebiet der Luft- und Raumfahrt. Er entwickelt Modelle zur Prüfung komplexer Systeme, bevor diese tatsächlich gebaut und programmiert werden. Somit ermöglicht seine Arbeit eine Vorhersage der Reaktionen eines Systems auf bestimmte Szenarien. Katoen studierte und promovierte an der Universität Twente und arbeitet seit 2004 an der RWTH. Als Postdoc war er zudem an der Universität Erlangen-Nürnberg tätig.

### **Novartis Chemistry Lectureship**

Univ.-Prof. Dr. Franziska Schönebeck, Inhaberin des Lehrstuhls für Organische Chemie I, wurde mit der „Novartis Chemistry Lectureship“ ausgezeichnet. Diese wird an Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler „in recognition of out-standing contributions to organic and computational chemistry, including applications to biology“ verliehen. Als Teil der Auszeichnung wird Schönebeck die Forschungsergebnisse ihrer Gruppe in wissenschaftlichen Vorträgen an drei Novartis Standorten weltweit vorstellen. Mit dem „Programm zur Förderung der Rückkehr des hoch qualifizierten Forschungsnachwuchses aus dem Ausland“ des Landes Nordrhein-Westfalen kam Schönebeck 2013 an die RWTH. 2014 erhielt sie einen ERC Starting Grant des European Research Council, kurz ERC, und damit ein Fördergeld von 1,5 Millionen Euro. Seit 2016 hat sie den Lehrstuhl für Organische Chemie I inne. Ihr Forschungsschwerpunkt ist die Untersuchung von Reaktionsmechanismen, insbesondere im Bereich der organometallischen Katalyse. Sie entwickelt neuartige Umwandlungen auf der Grundlage dieser Erkenntnisse. Dabei verknüpft sie experimentelle Ansätze und computergestützte Simulationsverfahren.

### **Studentisches Team gewinnt**

Fünf Studierende haben das Deutschland-Finale der „CFA Institute Research Challenge“ gewonnen. Sie beeindruckten mit ihrer Finanzanalyse und Unternehmensbewertung der ProSiebenSat1 Media SE. Das CFA Institute ist der globale Non-Profit-Berufsverband für Investment Manager, Finanzanalysten und professionelle Anleger. Die jährlich organisierte Research Challenge ist ein weltweit stattfindender Wettbewerb. Studentische Teams erstellen dabei einen Equity Report für ein börsengehandeltes Unternehmen. Bisher nahmen mehr als 15.000 Studierende von über 1.000 Hochschulen teil.

In der nationalen Endausscheidung traten die Studierenden Tanja Küpper, Anna Lenzen, Lina Wurdack, Ronis Issa und Xiang Li gegen die Teams der TU München und der Frankfurt School of Finance & Management an. Die drei Teams konnten ihre Analyse vor einer Fachjury aus Investmentexperten präsentieren. Beratend standen Viktor Strauch aus dem Kreis der deutschen CFA Chartholder und Dr. rer. pol. Astrid Salzmann vom RWTH-Lehrstuhl für Betriebswirtschaftslehre zur Seite.

### **Kooperation mit University of Alberta**

Rektor Ernst Schmachtenberg und die Vize-Präsidentin der University of Alberta, Britta Baron, unterzeichneten ein Memorandum of Understanding. In Aachen wurden gemeinsame Ziele und Visionen in den Forschungsschwerpunkten Medizintechnik, Biokraftstoffe und Energieversorgung formuliert. Auch die Studierenden sollen profitieren, ein Austausch auf allen Ebenen der Studienphasen ist im Aufbau.

Die RWTH pflegt bereits Kooperationen mit der Tsinghua University in Peking und dem IIT Madras im indischen Chennai – zwei Hochschulen, die in internationalen Rankings unter den besten Asiens aufgeführt werden. Die University of Alberta in Edmonton wurde jüngst im Rahmen einer kanadischen Förderinitiative ausgewählt, die ähnlich der Deutschen Exzellenzinitiative strukturiert ist.

### **Erfolgreich in Architekturwettbewerb**

Die Studierenden Maike Hunds und Konstantin Greune haben erfolgreich am Nachwuchswettbewerb „wa award“ der Fachzeitschrift wettbewerb aktuell teilgenommen. Die 26-jährige Hunds gehört zu den drei

Siegern. Unter die zehn Finalisten schaffte es auch Greune mit seiner Masterarbeit. Die studentischen Entwürfe wurden am Lehrstuhl für Wohnbau und Grundlagen des Entwerfens erarbeitet und von Univ.-Prof. ir. Wim van den Bergh für die Teilnahme nominiert. Insgesamt waren 98 studentische Arbeiten im Wettbewerb zum Thema „Gemeinsam wohnen“. Hunds stellte ihren Entwurf „Transformation im ländlichen Raum – Gemeinschaftliches Wohnen und Arbeiten im Alten Sägewerk“ vor. Ein Sägewerk im ostbelgischen Weywertz soll nach einem Umbau gemeinschaftliches Wohnen in Verbindung mit Arbeiten ermöglichen und so neue Bewohner in die ländliche Region ziehen. Der Entwurf lässt Nutzungsmöglichkeiten als Hostel für Fahrradtouristen, Wohnungen für Studierende und Familien, Werkstatt sowie Akademie und Ausstellungsfläche zu. In den großzügigen Wohnungen wird die Privatheit der Bewohner gewahrt, eine Vielzahl von gemeinschaftlich genutzten Flächen lädt zum Miteinander ein. Sowohl die Gesamtkonzeption als auch Umsetzung und Ausarbeitung im Detail überzeugten die Jury.

### **Julia Kowalski wurde ins Junge Kolleg aufgenommen**

Dr. Julia Kowalski wurde in das Junge Kolleg der Nordrhein-Westfälischen Akademie der Wissenschaften und der Künste aufgenommen. Die Aufnahme ins Junge Kolleg gehört zu den bedeutendsten Auszeichnungen für junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in Nordrhein-Westfalen. Bis zu 30 Vertreter und Vertreterinnen aller Fachrichtungen können für die Dauer von maximal vier Jahren berufen werden. Sie erhalten ein jährliches Stipendium in Höhe von 10.000 Euro und nehmen am Akademieleben teil. Voraussetzung für die Mitgliedschaft sind neben der Promotion herausragende wissenschaftliche Leistungen an einer Hochschule oder Forschungseinrichtung in NRW. Zum Zeitpunkt der Aufnahme dürfen die Mitglieder nicht älter als 36 Jahre sein. Im Jungen Kolleg haben sie die Möglichkeit, ihre Projekte in interdisziplinären Arbeitsgruppen zu diskutieren. Kowalski studierte Mathematik und Physik in Augsburg und an der ETH Zürich, wo sie auch promovierte. Sie ist Nachwuchsgruppenleiterin im Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science (AICES) und assoziiertes Mitglied der Fakultät für Georesourcen und Materialtechnik. Sie forscht an mathematischen Modellen und Simulationsmethoden für Fragestellungen aus

dem geowissenschaftlichen Bereich und beschäftigt sich unter anderem mit der Modellierung und Simulation von Naturgefahren durch Massenbewegungen. Herausforderungen sind die heterogene, unsichere Zusammensetzung des rutschenden Materials und der Einfluss realer Topographie auf dessen Dynamik. Ein weiteres Thema ist die Modellierung von Mehrphasensystemen und Phasenübergängen, um damit Schmelz- und Erstarrungsprozesse im Eis zu beschreiben. Ihr besonderes Interesse gilt gekoppelten Prozessen, welche neben Konduktion und Konvektion auch Kräfte berücksichtigen. Als Teilprojektleiterin im Rahmen der Enceladus Explorer Initiative der DLR Raumfahrtagentur setzt sie diese Modelle ein, um innovative Technologien für die Eisexploration zu entwickeln.

### **Projekt zum Architekten Leo Hugot**

Das Lehr- und Forschungsgebiet Denkmalpflege und Historische Bauforschung hat sich erfolgreich an einer Ausschreibung des Bundesministeriums für Bildung und Forschung beteiligt. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Christian Raabe wird gemeinsam mit seinem Team ein Konzept zur Digitalisierung von Objekten des kulturellen Erbes entwickeln. Der Nachlass des Aachener Architekten, Bauforschers, Dombaumeisters und Stadtkonservators Leo Hugot (1925-1982) steht dabei im Mittelpunkt. Sein Nachlass ist eine bedeutende Quelle für die Erforschung des Wiederaufbaus in der Nachkriegszeit im Köln-Aachener Raum. Projektpartner sind das Fraunhofer-Institut für Graphische Datenverarbeitung Darmstadt (IGD), das LVR-Landesmuseum Bonn, das Stadtarchiv Aachen, die Stadtarchäologie Aachen, die Dombauverwaltung Aachen und der RWTH-Lehrstuhl für Informatik 5 (Informationssysteme und Datenbanken). Im Rahmen des Projekts sollen die in unterschiedlichen Institutionen untergebrachten zwei- und dreidimensionalen Objekte des Nachlasses virtuell zusammengeführt werden. So kann ein Objekt mit den digitalen Daten der zugehörigen schriftlichen und zeichnerischen Quellen am Computer oder auch mit einer VR-Brille in 3D verglichen werden. Eine derartige Zusammenführung verschiedener Quellenarten gibt es bisher nicht, das Projekt kann daher auch unabhängig vom Nachlass Hugots wegweisend sein.

### **Projekte zur digitalen Hochschullehre**

RWTH-Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler haben sich erfolgreich an einer gemeinsamen Ausschreibung des Ministeriums für Innovation, Wissenschaft und Forschung des Landes Nordrhein-Westfalen und des Stifterverbandes für die Deutsche Wissenschaft beteiligt. Im Rahmen der Programmlinie „Fellowship für Innovationen in der digitalen Hochschullehre“ konnten sich Lehrende aller Disziplinen um ein Fellowship mit einer Laufzeit von einem Jahr bewerben. Für ihre Projekte erhalten 14 RWTH-Angehörige insgesamt 630.000 Euro. Mit der Ausschreibung soll die Entwicklung digital gestützter Lehr- und Prüfungsformate angeregt, die Neugestaltung von Modulen und Studienabschnitten, der Austausch über Hochschullehre und die Verstärkung bestehender digitaler Lehrkonzepte ermöglicht werden. Die erfolgreichen Antragsteller sind Dr. Okay Altay, apl. Prof. Martin Baumann, Dr. Tim Clarner, Markus Dammers, AK Rätin Hannah Groninger, Dr. Stefan Hegemann, Dr. Sebastian Kuhlen, Bastian Küppers, Dr. Stefan Lankes, Anne Lausberg, Univ.-Prof. Bernd Markert, Univ.-Prof. Simone Paganini, Prof. Anja Richert und Univ.-Prof. Karen Veroy-Grepl.

### **Kooperationsvertrag mit Covestro**

Die RWTH und die Covestro AG aus Leverkusen werden weiterhin im Rahmen des CAT Catalytic Center zusammenarbeiten. Rektor Ernst Schmachtenberg und Dr. Markus Steilemann, Vorstand Innovation bei Covestro, unterzeichneten eine Vereinbarung zur Weiterführung der Kooperation. In den nächsten sieben Jahren unterstützt Covestro die Forschung in Aachen mit rund zwölf Millionen Euro.

Ein erster Kooperationsvertrag wurde bereits 2007 geschlossen. Wissenschaftlicher Leiter des CAT Catalytic Center ist seit Beginn Univ.-Prof. Dr. Walter Leitner, Inhaber des RWTH-Lehrstuhls für Technische Chemie und Petrochemie. Aktuell arbeiten 25 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter an der Umsetzung von Grundlagenforschung in Innovation. Im Mittelpunkt stehen langfristige, fundamentale Fragen der Katalyse-Forschung. Erste Erfolge wurden bereits im Projekt „Dream Production“ realisiert: Kohlendioxid konnte als Rohstoff für Polyurethan-Schaumstoff genutzt werden und damit einen Teil des bislang erforderlichen Erdöls ersetzen. Eine Anlage, die mit diesem Verfahren 5.000 Tonnen pro Jahr herstellen kann, wurde 2017 bei Covestro am

Standort Dormagen feierlich eröffnet. Für ihre erfolgreiche Zusammenarbeit erhielten die Forscher von RWTH und Covestro bereits mehrere gemeinsame Auszeichnungen, etwa den ICIS Innovation Award in der Kategorie „Innovation with the best benefit for environment and sustainability“ oder eine Nominierung unter die Finalisten für den Deutschen Nachhaltigkeitspreis 2011.

### **Aachen-Maastricht Institute for Biobased Materials**

Das „Aachen-Maastricht Institute for Biobased Materials“ (AMIBM) wurde in Geleen eröffnet und steht für eine neue Form der Zusammenarbeit der Universität Maastricht, der RWTH und dem in Aachen ansässigen Fraunhofer-Institut für Molekularbiologie und angewandte Ökologie. Rund 50 Mitarbeiter untersuchen in den Laboren neue Biomaterialien. Dabei wird an der Entwicklung innovativer, nachhaltiger Materialien gearbeitet, beispielsweise auf Basis des Abfalls mechanisch geschälter Garnelen mit Hilfe von Tiefseebakterien. „Ich sehe hier eine große Zukunft für herausragende Forschung“, sagte RWTH-Rektor Professor Ernst Schmachtenberg bei der Eröffnung. Biologen, Chemiker, Ingenieure und Mediziner aus 16 Ländern arbeiten im AMIBM zusammen.

### **Digitales Wissen langfristig sichern**

Digitale Daten sind heute Produkt und Gegenstand der Forschung, sie werden täglich in großen Mengen und in großer Vielfalt erstellt. Diese Daten nachhaltig zu sichern und zu archivieren ist eine strategische, organisatorische und technische Herausforderung. Die RWTH hat daher ein „Team Forschungsdaten“ gebildet, in dem Fachleute aus dem IT Center, der Universitätsbibliothek und der Abteilung Forschungsförderung der Verwaltung eng zusammenarbeiten.

Das Land Nordrhein-Westfalen hat im Rahmen der Offensive „Digitale Hochschule NRW“ das Projekt „Langzeitverfügbarkeit für Hochschulen“ gestartet. Federführend ist das Hochschulbibliothekszentrum (hbz) in Köln, das im Bereich digitaler Publikationen über langjährige Erfahrung und Expertise verfügt. Das Land finanziert Beschaffung, Aufbau und Inbetriebnahme einer landesweiten Lösung, die auf der Software Rosetta der Firma Ex Libris basiert. Geschaffen werden Angebote zur Langzeitverfügbarkeit für unterschiedliche Fächer. Um die sehr unterschiedlichen Be-

darfe der Hochschulen des Landes bedienen zu können, kann das System als lokales Modul ergänzend zu vorhandenen Lösungen oder im Rahmen des zentralen Hostings genutzt werden. Die Rechenzentren und die Universitätsbibliotheken der RWTH und der Universität zu Köln werden das neue Angebot mit dem hbz zunächst gemeinsam aufsetzen und für ihre Hochschulen nutzbar machen.

### **Bundesförderung für nachhaltige Gebäudemodellierung**

Im Rahmen des Forschungsprojekts „GREENbimlabs“ hat ein internationales Team aus Ingenieuren, Softwareentwicklern und Betriebswirten eine Gründungsförderung des Bundesministeriums für Wirtschaft und Energie erhalten. Unter Projektleitung von Dipl.-Ing. Stanimira Markova soll am Lehr- und Forschungsgebiet Bauplanung und Bau-realisation ein Konzept zum ökologischen Wandel der Bauwirtschaft entworfen werden. Dazu entwickelt die Forschergruppe eine experimentelle Software, mit der erstmals die Wiederverwertung und Ressourceneffizienz von Baumaterialien vom Design bis zum Abbruch modelliert werden kann. Ziel ist, sich nach der Forschungsphase an der RWTH innerhalb von 18 Monaten als Unternehmen auszugründen. Das Ministerium fördert das Gründungsvorhaben im Rahmen seines selektiven Programms „EXIST-Forschungstransfer“ mit rund einer halben Million Euro.

### **Delegation aus Äthiopien**

Die RWTH wird das TVET-Institut Addis Ababa bei der Ausbildung äthiopischer Berufsschullehrer für den gewerblich-technischen Bereich unterstützen. Eine Kooperationsvereinbarung wurde von Rektor Ernst Schmachtenberg, dem äthiopischen Staatsminister Teshome Lemma Wodajo und dem Rektor des TVET-Instituts Sahle Teka Tedla unterzeichnet. Das so genannte Twinning-Programm umfasst Mobilität, Forschung und Qualifikation. Unterstützt wird es durch die Deutsche Gesellschaft für Internationale Zusammenarbeit. Seitens der RWTH beteiligen sich die Fachdidaktiken der gewerblich-technischen Lehramtsausbildung, das Zentrum für Lehrerbildung und das Institut für Erziehungswissenschaft in koordinierender Funktion. Die Hochschulleitung ist Teil eines Steering-Komitees.

In den nächsten zwei Jahren wird am TVET-Institut ein Forschungszentrum etabliert

und das Personal durch Teilnahme am Studiengang „Empirische Bildungsforschung“ in Aachen qualifiziert. Auch werden Promotionsprojekte und ein Austausch von Lehrenden, Studierenden und Verwaltung unterstützt. Nach Ablauf der zweijährigen Förderphase wird das Projekt evaluiert, dann sollen die Weichen für eine längerfristige Zusammenarbeit gestellt werden.

#### **Covestro Science Award für André Bardow**

Univ.-Prof. Dr.-Ing. André Bardow, Inhaber des Lehrstuhls für Technische Thermodynamik, wurde mit dem „Covestro Science Award“ ausgezeichnet. Der Award wird in Form eines dreijährigen Doktoranden-Stipendiums vergeben, welches eine Promotion ermöglicht. Damit fördert Covestro herausragende Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler unter 45 Jahren im Bereich der Materialforschung.

#### **Neubau in der Aachener Soers**

Auf dem Gelände der Kläranlage Aachen-Soers entsteht ein modernes Laboratorium mit Seminar- und Büroräumen sowie einer Versuchshalle für das Institut für Siedlungswasserwirtschaft. Der Neu- und Ersatzbau dient Forschung und Lehre auf dem Gebiet der Siedlungswasser- und Abfallwirtschaft sowie der Umweltforschung. Die direkte Anbindung an Europas modernste Kläranlage bietet dabei ideale Standortvoraussetzungen. Das Gebäude mit einem Projektvolumen von sieben Millionen Euro wird als Massivbau in Stahlbeton errichtet.

#### **Neuer Hochleistungsrechner**

Der neuer Hochleistungsrechner „Cluster Aix la Chapelle“, kurz Claix, bietet Rechenkapazität für High Performance Computing in den Ingenieur- und Naturwissenschaften. Die RWTH Aachen gehört – gemessen an HPC-Ressourcen – damit zu den TOP 10 der deutschen Universitäten. Claix wurde von der NEC Deutschland GmbH geliefert und besteht aus Rechenknoten der NEC LX-Serie, basierend auf der neuen Intel Xeon E5-2600 Produktfamilie. Das System hat über 750 Rechenknoten, darunter Large-Memory-SMP-Knoten und Dual-Sockel-MPI-Knoten mit insgesamt mehr als 19.000 Cores, und weist eine Gesamtperformance von mehr als 600 TeraFLOPS auf. Die Rechenknoten sind

über das Hochgeschwindigkeitsnetzwerk Intel Omni-Path miteinander verbunden. Die Topologie erlaubt eine stetige Erweiterung des Systems für künftige Anforderungen. Zusätzlich ist die neue Anlage umweltfreundlich.

#### **Zwei neue Graduiertenkollegs**

Die Deutsche Forschungsgemeinschaft hat zwei Anträge der RWTH bewilligt. Die Hochschule kann zum Oktober 2017 die Graduiertenkollegs „UnRAVeL – Uncertainty and Randomness in Algorithms, Verification, and Logic“ sowie „Energy, Entropy, and Dissipative Dynamics“ einrichten. Ziel eines Graduiertenkollegs ist die Ausbildung besonders qualifizierter Doktorandinnen und Doktoranden. Die RWTH erhält in den nächsten viereinhalb Jahren insgesamt 8,8 Millionen Euro.

#### **Auf Talentsuche**

RWTH und FH Aachen haben ein gemeinsames Projekt zur Förderung motivierter Jugendlicher gestartet: Fünf so genannte Talentscouts sind jetzt in den Schulen – mit Unterstützung der dort tätigen Lehrer und Lehrerinnen – der Region aktiv. Junge Menschen, die das Potenzial und die Motivation für ein Studium haben, aber aus Familien kommen, in denen bisher niemand studiert hat oder wenig finanzielle Ressourcen vorhanden sind, stehen im Fokus. Das Talentscouting, entwickelt an der Westfälischen Hochschule in Gelsenkirchen, soll zu mehr Bildungsgerechtigkeit und Chancengleichheit führen. Die Aachener Hochschulen werden vom Land NRW für das Projekt bis 2020 mit jeweils einer Million Euro gefördert.

#### **Weitere Förderung für „Oxyflame“**

Der Bewilligungsausschuss der Deutschen Forschungsgemeinschaft hat die Förderung für den Sonderforschungsbereich/Transregio „Oxyflame – Entwicklung von Methoden und Modellen zur Beschreibung der Reaktion fester Brennstoffe in einer Oxyfuel-Atmosphäre“ um eine weitere Förderperiode von vier Jahren verlängert.

Sonderforschungsbereiche (SFB) sind langfristige, auf die Dauer von bis zu zwölf Jahren angelegte Forschungseinrichtungen der Hochschulen, in denen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler im Rahmen eines fächerübergreifenden Forschungsprogramms zusammenarbeiten. Damit dienen sie der

institutionellen Schwerpunkt- und Strukturbildung. Ein Sonderforschungsbereich/Transregio wird von zwei oder drei Hochschulen gemeinsam getragen. Im SFB/Transregio „Oxyflame“ arbeiten die RWTH, die Ruhr-Universität Bochum und die Technische Universität Darmstadt zusammen. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Reinhold Kneer vom RWTH-Lehrstuhl für Wärme- und Stoffübertragung ist Sprecher des Transregio. Für die Fortführung wurden 9,6 Millionen Euro beantragt, die auf die drei beteiligten Hochschulen verteilt werden.

# Die nächste Ausgabe WS/2017

## Lehramt im Fokus Hochschule für Schulen

Lehramtsausbildung in Aachen  
Geschichte und Gegenwart

Qualitätsoffensive Lehrerbildung  
Das Aachener Projekt LeBiAC

Verzahnung der Ausbildungsphasen  
Gesamtstruktur und Praxissemester

Heterogenität in Bildung und Forschung  
„Gemeinsam verschieden sein“

Praxisbezug und Professionalisierung  
Lehr-Lern-Gelegenheiten, Schulkooperationen, Softskills

Gesamtheit der Lehrerbildung an der RWTH  
Fachdidaktikforum, MINT-L<sup>4</sup>, BeLEK & Co.

## Impressum

Herausgegeben im Auftrag des Rektors  
der RWTH Aachen  
Dezernat 3.0 - Presse und Kommunikation  
Templergraben 55  
52056 Aachen  
Telefon +49 241 80 - 93687  
pressestelle@rwth-aachen.de  
**www.rwth-aachen.de**

Redaktionsleitung:  
Angelika Hamacher  
Renate Kinny

Redaktionelle Mitarbeit:  
Rauke Xenia Bornefeld  
Nora Tretau

Titelbild: Diskussion der Struktur eines Gitter-  
modells für das Perth Basin in Australien.  
Foto: Peter Winandy

Anzeigen:  
print'n'press, Aachen  
jh@p-n-p.de

Anzeigenberatung:  
Liz Rüster – Telefon +49 6132 43 44 38  
liz.ruester@web.de

Gestaltung:  
Kerstin Lünenschloß, Aachen

Druck:  
Vereinte Druckwerke, Neuss

Gedruckt auf chlorfrei gebleichtem Papier

Das Wissenschaftsmagazin  
RWTH THEMEN erscheint einmal  
pro Semester.

Nachdruck einzelner Artikel, auch auszugs-  
weise, nur mit Genehmigung der Redaktion.  
Für den Inhalt der Beiträge sind die Autoren  
verantwortlich.

Sommersemester 2017  
ISSN-Nummer 0179-079X





# Ruckzuck ist einfach.



Weil man Geld schnell  
und leicht per Handy  
senden kann. Mit Kwitt,  
einer Funktion unserer App.\*

\*Gilt nur zwischen deutschen Girokonten.