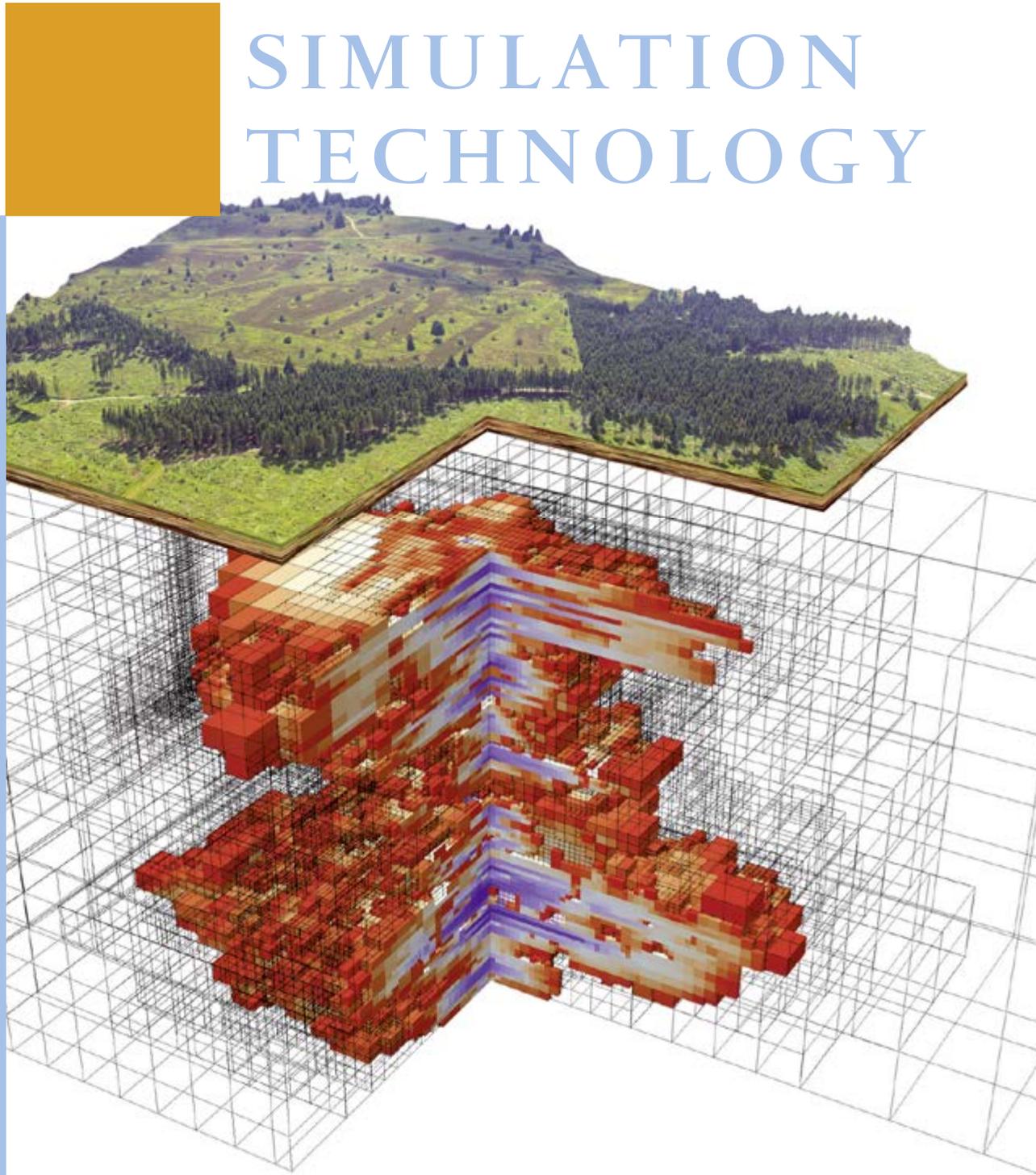


SIMULATION TECHNOLOGY

THEMENHEFT FORSCHUNG · N° 10 · 2014



Universität Stuttgart

THEMENHEFT FORSCHUNG

Simulation Technology

Universität Stuttgart • 2014

Editorial

Liebe Leserinnen und Leser!

Mit der vorliegenden Nummer 10 unseres **T H E M E N H E F T s F O R S C H U N G** schließt sich ein Kreis. Im Jahr 2003 publizierte die Universität das Heft „Simulation und Visualisierung“ mit Beiträgen aus allen zehn Fakultäten der Universität Stuttgart als ein Beleg für die interdisziplinäre Breite der Stuttgarter Simulationstechnik. Stuttgart war bereits damals, so schrieb der Rektor in seinem Grußwort, „die erste deutsche Universität mit einer weltweiten Ausstrahlung auf diesem Gebiet“. Heute hat die Universität nichts von diesem Glanz verloren; im Gegenteil. Der Exzellenzcluster „Simulation Technology“ wird bereits in der zweiten Phase des bundesweiten Exzellenzwettbewerbs gefördert, arbeitet in einem eigenen hoch modernen Forschungsgebäude und zieht Wissenschaftler und Studierende im internationalen Maßstab nach Stuttgart. 2005 startete die Universität eine neue Publikationsreihe, deren Ziel es war, weitere neue

fakultäts- und fachübergreifende Themen aufzunehmen und einem breiteren Publikum vorzustellen: das **T H E M E N H E F T F O R S C H U N G**. Die Redaktion des Themenhefts ist davon überzeugt, dass auch die inzwischen neun weiteren inter- und transdisziplinären Themen der Forschung, die seitdem hier vorgestellt wurden, vergleichbare Strahlkraft entfalten. Die Jubiläumsausgabe aber ist dem Start und Star der Reihe gewidmet – der „Simulation Technology“.

Viel Vergnügen beim Lesen wünscht



Ulrich Engler

Impressum

Das **T H E M E N H E F T F O R S C H U N G** wird herausgegeben im Auftrag des Rektorats der Universität Stuttgart.

Konzeption und Koordination Themenheft Forschung: Ulrich Engler, Tel. +49 (0) 711/685-82205, E-Mail: ulrich.engler@verwaltung.uni-stuttgart.de

Wissenschaftlicher Koordinator „Simulation Technology“: Wolfgang Ehlers

Redaktion „Simulation Technology“: Ulrich Engler, Britta Voß

Autoren „Simulation Technology“: Frank Allgöwer, Katherina Baber, Andreas Benzing, Christian Bleiler, Holger Class, Wolfgang Ehlers, Bernd Flemisch, Bernard Haasdonk, Bastian von Harrach, Angelika Haußer, Thomas Heidlauf, Rainer Helmig, Niels Henze, Marcel Hlawatsch, Johannes Kästner, Dimka Karastoyanova, Boris Koldehofe, Andrei Kramer, Karsten Kuritz, Frank Leymann, Christian Miehe, Catrin Misselhorn, Bernhard Mitschang, Monilola Olayoye, Ulrike Pompe-Alama, Nicole Radde, Peter Reimann, Oliver Röhrle, Christian Rohde, Kurt Rothermel, Tille Rupp, Carsten Scherer, Albrecht Schmidt, Syn Schmitt, Guido Schneider, Holger Schwarz, Kunibert G. Siebert, Karolina Vukojevic-Haupt, Arndt Wagner, Lena Walter, Patrick Weber, Daniel Weiskopf, Andreas Weiß, Markus Wolff

Titelseite und Grundlayout Themenheft Forschung: Zimmermann Visuelle Kommunikation, Haußmannstraße 103 B, D-70188 Stuttgart

Druck und Anzeigenverwaltung: Alpha Informationsgesellschaft mbH, Finkenstraße 10, D-68623 Lampertheim, Tel. +49 (0) 6206/939-0, Fax +49 (0) 6206/939-232, Internet: <http://www.alphapublic.de>, E-Mail: info@alphapublic.de, Verkaufsleitung: Peter Asel

© Universität Stuttgart 2014
ISSN 1861-0269

Das **T H E M E N H E F T F O R S C H U N G** wird gedruckt auf Recycling-Papier weiß matt oberflächengeleimt, aus 100% Altpapier, lebensmittelunbedenklich und alterungsbeständig.

Inhalt

Editorial, Impressum 2

Geleitwort des Rektors 7

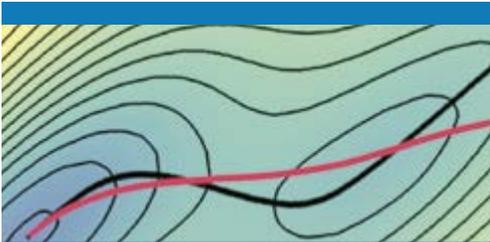
Simulation – 8
die dritte Säule der Wissenschaft
Wolfgang Ehlers



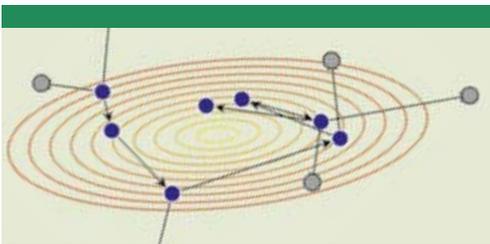
Computergestütztes Design 14
komplexer Materialsysteme
Arbeitsgruppe Christian Miehe



Der Tunneleffekt in der Chemie 24
Johannes Kästner



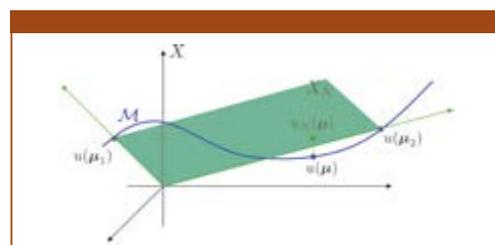
Mit Simulationstechnik
zu neuen Erkenntnissen
in der Systembiologie 32
*Frank Allgöwer, Nicole Radde,
Patrick Weber, Karsten Kuritz,
Andrei Kramer,
Monilola Olayioye, Angelika Haußer*



Muskelspiele 46
Wie biomechanische Simulationen helfen,
Belastungen im Körper sichtbar zu machen
*Oliver Röhrle, Syn Schmitt,
Arndt Wagner, Tille Rupp,
Thomas Heidlauf, Christian Bleiler,
Katherina Baber,
Rainer Helmig, Wolfgang Ehlers*



- Mathematik als Innovator der Simulationstechnik, Simulationstechnik als Innovator der Mathematik** 60
Bernard Haasdonk, Bastian von Harrach, Christian Rohde, Carsten Scherer, Guido Schneider, Kunibert G. Siebert



- DuMu^x** 72
 Ein Open-Source-Simulator zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in porösen Medien für komplexe Ingenieur Anwendungen
Bernd Flemisch, Holger Class, Markus Wolff, Lena Walter, Rainer Helmig



- Auf dem Weg zu einer Cyber-Infrastruktur für die Simulationstechnik** 84
Dimka Karastoyanova, Frank Leymann, Karolina Vukojevic-Haupt, Andreas Weiß, Boris Koldehofe, Andreas Benzing, Kurt Rothermel, Bernhard Mitschang, Peter Reimann, Holger Schwarz, Daniel Weiskopf, Marcel Hlawatsch



- Simulationstools für Mensch-Computer-Interaktionen** 96
Albrecht Schmidt, Niels Henze



- Philosophie der Simulation** 108
 Fragen – Themen – Problemfelder
Catrin Misselhorn, Ulrike Pompe-Alama



Simulationstechnologien

Simulationstechnologien sind im 21. Jahrhundert unentbehrlich geworden und durchdringen alle Bereiche unseres Lebens. Die Universität Stuttgart hat die Zukunftschancen der Simulationstechnologie als dritte Säule des wissenschaftlichen Erkenntnisgewinns neben Theorie und Experiment früh wahrgenommen und konsequent aufgegriffen. Die Universität Stuttgart war im Bereich des Wissenschaftlichen Rechnens die erste deutsche Universität mit weltweiter Ausstrahlung. Bereits in den fünfziger Jahren des letzten Jahrhunderts wurde in Stuttgart dazu beigetragen, die Finite-Elemente-Methode für Festigkeitsberechnungen von Tragflächen und Flugzeugrümpfen zu entwickeln. Die dazu erforderlichen Rechenläufe wurden damals allerdings noch auf Röhrencomputern (von Ferranti) durchgeführt und dauerten mindestens fünfzehn Stunden. Heutige Simulationen, ob auf Höchstleistungsrechnern oder eigens strukturierten Rechnerpools, benötigen oft vergleichbare Zeitspannen, allerdings für ungleich gewaltigere Datenmengen. In den neunziger Jahren wurde Stuttgart der Standort des ersten deutschen Bundeshöchstleistungsrechenzentrums. Zu dieser Zeit gehörten Modellierung, Simulation und Visualisierung bereits zum täglichen Handwerkzeug fast aller Fakultäten unserer Universität. Über die organisatorischen Meilensteine der Einrichtung einer Arbeitsgemeinschaft für Wissenschaftliches Rechnen und die Gründung eines interdisziplinären Zentrums für Simulationstechnik führte der Weg folgerichtig zum heutigen Research Centre for Simulation Technology (SRC SimTech). In dieses eingebunden ist der Exzellenzcluster Simulation Technology (Laufzeit der 2. Förderphase bis 2017), eine Graduiertenschule mit etwa 100 Doktoranden und ein Studiengang mit bis zu 30 Studierenden pro Jahrgang. SimTech bearbeitet heute insbesondere fünf visionäre Anwendungsbereiche, die vom computergestützten Materialdesign über das integrative virtuelle Prototyping und die Entwicklung komplexer und umfassender Methoden

in der Umwelttechnik bis hin zur simulationsbasierten Systembiologie und der Bearbeitung biomechanischer Fragestellungen zur Beschreibung eines ganzheitlichen Menschmodells reichen. Im Jahr 2011 konnte bereits ein neues Forschungsgebäude mit einer Nutzfläche von 1.221 Quadratmetern bezogen werden, das die Rahmenbedingungen für die SimTech-Forscher weiter verbesserte. Der Neubau basiert auf einer modularen Stahlbetonbauweise und realisiert ein klimatisches Gebäudekonzept, durch das weitgehend auf mechanische Kühlung und Lüftung verzichtet werden kann. Aktuell geplant ist die Einführung einer Stuttgart School of Simulation Technology.

Unser **THEMENHEFT FORSCHUNG** kann das wissenschaftliche Koordinatensystem der modernen Entwicklungen in der Simulationstechnik nur mit wenigen ausgewählten Beispielen skizzieren. Deutlich wird dennoch, dass es nicht mehr nur um neue und weitere Anwendungsfelder für die Simulationstechnik geht, sondern dass wie in den Anfängen methodische Erweiterungen und strukturelle Ansätze im Vordergrund stehen, denen die wissenschaftliche Aufmerksamkeit gilt.

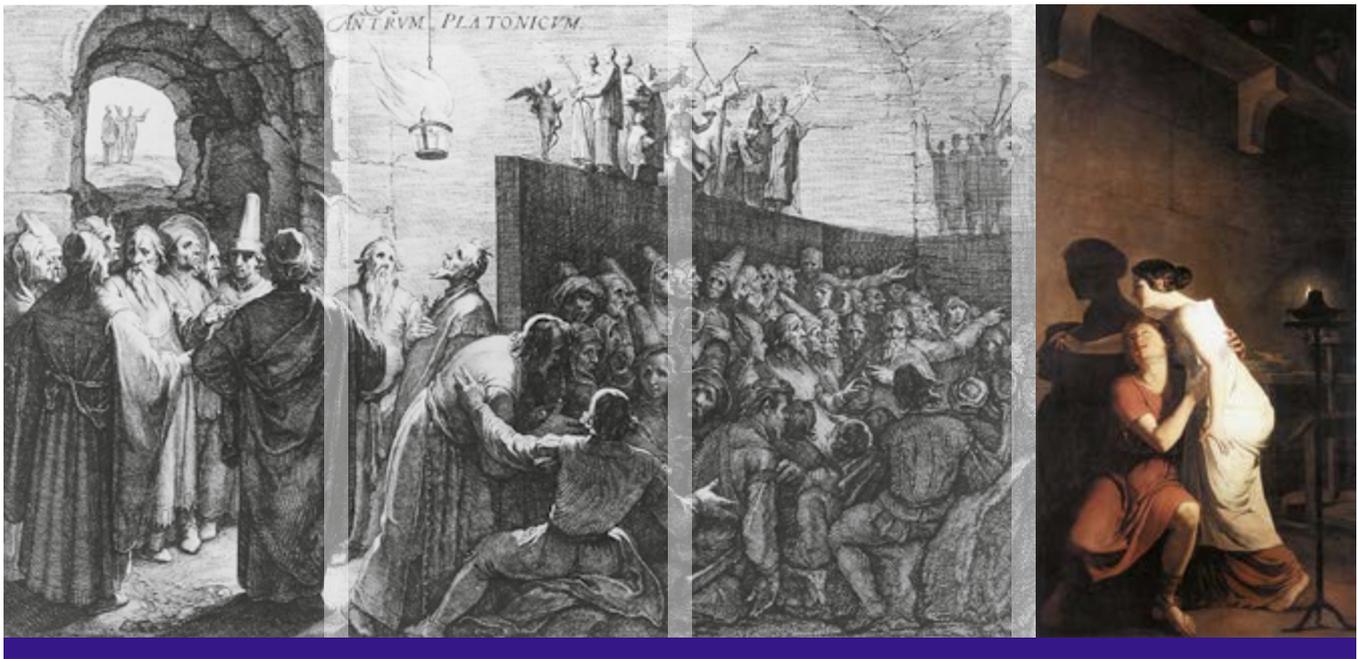
Mein Dank gilt allen Autorinnen und Autoren des Heftes, besonders aber dem wissenschaftlichen Koordinator Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Ehlers. Nicht nur die Gutachter der Exzellenzinitiative bescheinigen dem SRC SimTech und seiner Leitung eine wissenschaftliche Spitzenposition in der Welt. Die Studierenden des gleichnamigen Studiengangs besitzen hervorragende Berufsperspektiven und die Wissenschaftler und Juniorprofessuren des SRC werden zu national und international gesuchten Spitzenkräften und tragen damit wesentlich dazu bei, die Ausstrahlung der Stuttgarter Simulationstechnologie weiter zu stärken. Ihnen allen gilt mein Dank.



Prof.-Dr.-Ing. Wolfram Ressel, Rektor



Simulation – die dritte Säule der Wissenschaft



Links ein Ausschnitt aus dem Höhlengleichnis Platons, in dem sich die Höhlenbewohner nur zum Teil bewusst sind, statt der realen Welt lediglich ihre Schatten wahrzunehmen. Rechts das Bild „Die Erfindung der Kunst“ von Joseph-Benoit Suvée, in dem der Mythos vom Ursprung aller Kunst beschrieben wird. Ein korinthisches Mädchen zeichnet den Umriss ihres aufbrechenden Liebhabers an die Wand, um sein Bild so festzuhalten.

Ob es die Schatten in Platons Höhlengleichnis sind, die die Welt so nachbilden, wie wir zunächst nur glauben können, dass sie ist, oder das Ursprungsmotiv der Kunst, die das Flüchtige für unsere Sinne, allen voran das Auge, festzuhalten versucht – Abbilder prägen unsere Weltansicht seit Menschengedenken. In der Wissenschaft spricht man von Modellen, die wie Abbilder genutzt werden. Sie geben reale Prozesse und Systeme reduziert wieder und machen sie mit Hilfe moderner Simulationen „berechenbar“. So eröffnet sich die Chance, neue Erkenntnisse über die dahinter liegenden realen Problemstellungen zu gewinnen.

So tun als ob – wenn im Alltag vom Akt der Simulation gesprochen wird, ist damit meist wenig Positives verbunden. „Der simuliert nur“ heißt es etwa über den eingebildeten Kranken, der über die Simulation einzelner Symptome wie dem Husten auf einen Grundzustand – Erkältung – verweist, der bei ihm gar nicht vorliegt. Simu-

lation im umgangssprachlichen Gebrauch meint also einmal die bewusste Verstellung, die Vorspiegelung falscher Tatsachen mit dem Vorsatz, die Wirklichkeit – in diesem Fall: Gesundheit – zu verschleiern. Simulation in diesem Sinne verstellt den Blick auf die Wirklichkeit, statt ihn zu befördern.

Im landläufigen Verständnis der Simulation existiert neben der negativen Dimension der *Vor-Täuschung* aber auch die positive Assoziation der *Nach-Ahmung*. Wer sich einmal wie ein Rennfahrer fühlen will, kann in den dunklen Kabinen von Jahrmarkts-Simulatoren mit gefühlten 300 PS seine virtuellen Runden drehen; wer seine Flugangst bezwingen will, besucht Trainings, in denen einzelne Flugphasen simuliert werden. Auch die Planspiele auf Führungsebene oder die jährlichen UN-Vollversammlungen, die von Jugendlichen nachgestellt werden, beruhen auf dem Prinzip der Simulation: Reale Prozesse oder Systeme in einem vereinfachten Modell nachzubilden, um so ihre innere Dynamik beschreiben, erklären oder gar vorhersagen zu können.

Darum geht es auch im Kern der Simulationstechnologie, die sich als Instrument und Methode der Erkenntnisgewinnung in den vergangenen 50 Jahren in der Forschung durchgesetzt hat und heute neben Theorie und Praxis als dritte Säule moderner Wissenschaft gelten kann. Im Begriff *Simulationstechnologie* steckt bereits der Verweis auf den komplexen handwerklichen Charakter: Heutige Simulationen sind fast immer Computersimulationen, hinter denen immer komplexere Modelle, mächtige Algorithmen sowie leistungsfähige Rechen- und Speicherleistungen stehen.

1. Geschichte der Simulationstechnologie

Die mathematischen Anfänge der Modellbildung und damit auch der Simulation sind bereits im sogenannten Nadelproblem von Buffon und Laplace im 18. Jahrhundert zu finden. Dabei sollte die Wahrscheinlichkeit berechnet werden, mit der eine Nadel auf der Linie eines vorgezeichneten Gitternetzes landet. Das Grundprinzip dieser ersten „Simulation“ war die berechnende Schlussfolgerung von einer großen Zahl an Einzelfällen auf grundlegende Gesetzmäßigkeiten und die Ableitung ihrer Unsicherheiten und Wahrscheinlichkeiten. Auf Zufallsexperimenten gründet sich auch die erste und bis heute grundlegende Simulationstechnik: Der Mathematiker John von Neumann definierte 1946 gemeinsam mit Stanislaw Ulam ein Verfahren, mit dessen Hilfe sich partielle Differentialgleichungen numerisch lösen

lassen. Die sogenannte Monte-Carlo-Methode kalkuliert die Wahrscheinlichkeit oder aber Ungewissheit bestimmter Ergebnisse und ist damit bis heute wesentlich für die Modellierung und Simulation.

Eine weitere computergestützte Berechnungsmethode wurde in den 1960er Jahren maßgeblich an der Universität Stuttgart mitentwickelt: John Argyris, Begründer und langjähriger Leiter des Instituts für Statik und Dynamik der Luft- und Raumfahrtkonstruktionen, suchte nach einer Lösung zur Überprüfung von Festigkeit und Elastizität einzelner Flugzeugteile wie den Tragflächen. Herausforderung war es, partielle Differentialgleichungen zu lösen, also Gleichungen, die Prozesse mit mehr als einer unabhängig voneinander veränderlichen Variable beinhalten. Die Komplexität dieser partiellen Differentialgleichungen ergibt sich zudem aus der Regelmäßigkeit – Linearität – oder aber Unregelmäßigkeit – Nicht-Linearität – ihrer veränderlichen Funktionen. Für die Lösung linearer Berechnungen lieferte Argyris wesentliche Beiträge zur Entwicklung einer numerischen Methode, die zunächst vor allem in der Simulation von Festkörpern, heute aber auch in vielen weiteren physikalischen Fragestellungen, wie Wettervorhersagen oder Medizintechnik, Einsatz findet: die Finite-Elemente-Methode (FEM).

Neben den methodischen Verfahren waren es die bahnbrechenden technischen Entwicklungen der Computertechnologie, die entscheidend für die Durchsetzung der Simulationsverfahren waren. Erst durch die stetig gestiegene Speicher- und Rechenleistung wurde es möglich, Simulationen in einer Geschwindigkeit und in einer Komplexität zu rechnen, mit der sich heute dynamische Systeme vom Nanobereich bis zur Supernova in überschaubarer Zeit simulieren lassen.

Die technischen Grundlagen hierfür wurden bereits in den 1940er Jahre gelegt, als Konrad Zuse mit dem Z3 den ersten funktionsfähigen Computer baute. Dieser lief noch mit elektromagnetischen Relais und hatte eine entsprechend geringe Rechenleistung. Umso mächtiger war da bereits der erste vollelektronische digitale Universalrechner – ENIAC (Electronical Numerical Integrator and Computer) – der 1947 an der University of Pennsylvania vorgestellt wurde. Das Potenzial der Simulation machten sich dabei zunächst vorrangig



01

Der Mathematiker John von Neumann ist einer der Gründungsväter der modernen Simulationstechnologie.



02

Konrad Zuse ist einer der Gründungsväter der modernen Computertechnologie und entwickelte mit dem Z3 den ersten funktionsfähigen und frei programmierten Rechner. Foto: Wolfgang Hunscher



03

Mit den ersten Computern, wie dem hier abgebildeten Z1 von Konrad Zuse (links) sowie dem ersten vollelektronischen Universalrechner ENIAC (rechts), eröffneten sich für die moderne Simulationstechnologie erst die technischen Möglichkeiten, immer komplexere Modelle zu berechnen.

militärwissenschaftliche Projekte zunutze: So liefen auf dem ENIAC stochastische Simulationen zur Kernfusion, die der Wasserstoffbombe zu Grunde liegt. Hier zeigte sich bereits ein Vorteil der Simulation, der auch für die heutige zivilwissenschaftliche Verwendung entscheidend ist: Was im praktischen Experiment zu gefährlich oder ethisch bedenklich wäre, lässt sich in der Simulation erproben. Der virtuelle Testlauf erlaubt es, gezielt an einzelnen „Stellschrauben“ zu drehen und die Auswirkungen gefahrenfrei zu überprüfen.

Das machte die Simulationen nicht nur für militärische Zwecke attraktiv, sondern auch in all jenen Bereichen schnell unentbehrlich, in denen kostspielige oder aber risikoreiche Experimente ersetzt werden konnten – z. B. in den Entwicklungsabteilungen der Automobilindustrie oder der Luftfahrt. Simulationen dienten hier also bereits weniger der Beschreibung bereits vorhandener Systeme, sondern vielmehr dem gezielten Design einzelner Materialfunktionen oder der Prognose (un-) erwünschter Verhaltensweisen.

Mit der steigenden Leistungsfähigkeit der Computer seit den 1970er Jahren wurde es möglich, zunehmend komplexe Szenarien und Modelle zu simulieren – die prominentesten Anwendungsbereiche sind hier die Wettervorhersage, Wahlprognosen oder die Weiterentwicklung von Hochrisikotechnologien. Das Produkt dieser Simulationen war dabei lange bilderfrei, Ergebnisse wurden in Zahlenreihen und Diagrammen dargestellt. Abhilfe liefern inzwischen Visualisierungen, die die Er-

gebnisse der Simulationen quasi auf einen Blick sichtbar und damit erst interpretierbar machen. Gerade die heute möglichen Rechenleistungen erzwingen dabei die visuelle Fokussierung aufs Wesentliche – die bildhafte Darstellung hilft hier also, aus den immer größeren Datenmengen die entscheidenden Erkenntnisse hervorzuheben. So schaffen moderne Supercomputer wie der Hermit am Stuttgarter HLRS pro Sekunde durchschnittlich eine Billiarde Rechenoperationen. Es schlummern hier aber noch viele Möglichkeiten, Einblicke in zeitlich oder räumlich bislang unüberschaubare Gebiete zu werfen, wie die jüngst vorgestellte und bislang präziseste Simulation zur Entstehung unseres Universums deutlich macht.

2. Chancen und Herausforderungen

Die Erfassung realer Prozesse in Modellen, ihre numerische Simulation und anschließende Visualisierung wird heute standardmäßig überall da eingesetzt, wo Theorie und Experiment zu kurz greifen. Die offenkundigen Vorteile, die der Simulation den Vorrang vor einer rein theoretischen oder aber experimentellen Methode geben, liegen etwa in der Kosten- und Zeitersparnis. Weiterhin bieten die Simulationen in vielen Bereichen eine ethisch unbedenkliche Überprüfung bestimmter Annahmen und Szenarien, etwa in der Entwicklung neuer Arzneistoffe. Die Lösung theoretisch unlösbarer (partieller Differential-) Gleichungen lässt sich dank der numerischen

Methoden der Simulation annähern. Mit der Öffnung eines virtuellen Forschungsraums können erstmals auch Prozesse erfasst werden, die zu klein oder zu groß sind, um mit Messmethoden untersucht zu werden, oder aber die im Versuch zu lange dauern würden. Simulationen bieten darüber hinaus nicht nur Auskunft über das, was ist, sondern auch über das, was sein könnte oder sein wird. Wissenschaftliche Simulationen stellen eben nicht nur das bereits Bekannte nach, sondern ermöglichen die Ableitung von Vorhersagen oder die Berechnung von Wahrscheinlichkeiten.

Allerdings bedarf auch die moderne Simulation der Kontrolle: Insbesondere die Schwierigkeit, Unsicherheiten in bestimmten Systemen exakt zu bestimmen, macht es erforderlich, die simulierten Ergebnisse stetig zu hinterfragen oder mit begleitenden Experimenten abzugleichen. Auch entziehen sich manche Prozesse oder natürliche Systeme bislang der Beschreibung in mathematischen Formeln.

Dennoch kommt der Einzug der Simulationstechnologie als alternativer Weg zur Erkenntnis einer Revolution gleich, eröffnet er doch neuartige Schnittstellen zwischen realen und virtuellen Forschungswelten, die neue Formen der Wissensproduktion – vom Materialdesign bis zur Biomechanik – ermöglichen und erfordern.

3. Simulationstechnologie an der Universität Stuttgart

Mit dem Exzellenzcluster Simulation Technology (SimTech) hat die Universität Stuttgart der neuen Forschungsmethode eine Heimat gegeben: Im 2007 eingerichteten und 2012 für weitere fünf Jahre bewilligten Cluster werden die bisher nur isoliert entwickelten Simulationsmodelle und -methoden zu einer ganzheitlichen Systemwissenschaft gebündelt. Mit seinem Disziplinen übergreifenden Ansatz beschreitet der Cluster damit neue Wege, um Simulationen noch leistungsfähiger, Vorhersagen zuverlässiger und Visualisierungen noch präziser zu machen.

Im interdisziplinären Austausch begegnet SimTech so den drängenden Fragen aus Wissenschaft und Gesellschaft. Dafür stellen sich die Forscherinnen und Forscher aus den Ingenieur-, Natur-, Lebens- und Sozialwissenschaften fünf langfristigen



04

Am Ende einer Simulation stehen zunächst einmal unübersichtliche Datensätze, die erst durch die Visualisierung sichtbar – und wie hier in der Cave des Stuttgarter HLRS – begehbar werden.

Anwendungsszenarien, die sie in über 70 Projekten bearbeiten. Dazu zählt etwa das simulationsbasierte Design neuer Werkstoffe mit maßgeschneiderten Hightech-Eigenschaften, die vollständig virtualisierte Entwicklung von Prototypen oder die Simulation komplexer Methoden in der Umwelttechnik. Außerdem bietet SimTech eine Plattform zur stärkeren Verzahnung von Biomechanik und Systembiologie, um so der Vision eines ganzheitlichen Menschmodells näher zu kommen. Die Weiterentwicklung intelligenter Cyberinfrastrukturen begegnet der Herausforderung, die Rechen- und Speicherleistung der immer größeren Datenmengen zu stemmen sowie Simulationen schneller und flexibler zugänglich zu gestalten. Die Chancen und Risiken der noch jungen Simulationstechnologie werden in den Sozial- und Geisteswissenschaften gezielt reflektiert.

Der Erkenntnis, dass Simulationstechnologie als eine Wissenschaft *für sich* zu begreifen ist, tragen die Universität Stuttgart und SimTech auch in ihrem Engagement für eine nachhaltige Ausbildung des wissenschaftlichen Nachwuchses Rechnung: Eine eigene Graduiertenschule mit rund 150 Doktoranden sowie ein Studiengang garantieren, dass das in SimTech erarbeitete Wissen kontinuierlich weitergegeben und ausgebaut wird.

In diesem **THEMENHEFT FÜR SICHUNG** möchten wir Ihnen die Vielfalt und das Potenzial der Simulationstechnologie nahebringen und hoffen,



05

Im Exzellenzcluster SimTech kommen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus den unterschiedlichsten Disziplinen zusammen. Das 2010 erbaute Forschungsgebäude bietet darüber hinaus Raum für gemeinsame Veranstaltungen.

Ihnen mit den Einblicken in die nachfolgend vorgestellten Forschungsprojekten nicht nur die Simulation als Erkenntnis-

instrument näher bringen zu können, sondern auch etwas von der Faszination der Forschung. • *Wolfgang Ehlers*

DER AUTOR



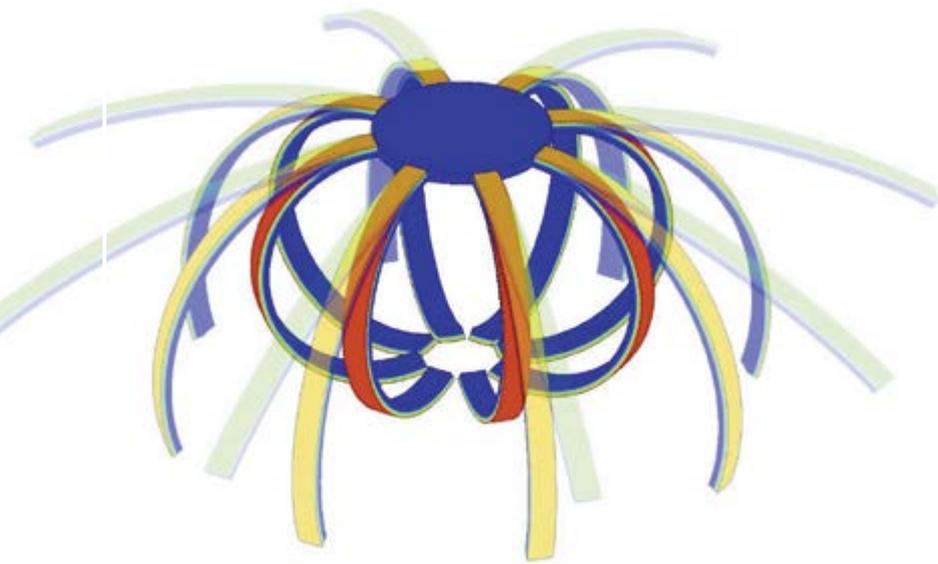
PROF. DR.-ING. WOLFGANG EHLERS

ist seit März 1995 als ordentlicher Professor für Kontinuumsmechanik an der Universität Stuttgart tätig. Seit 2007 ist er der Geschäftsführende Direktor des Stuttgart Research Centre for Simulation Technology (SRC SimTech) und Sprecher des Exzellenzclusters Simulation Technology. Seit 2013 ist er der Präsident der Internationalen Gesellschaft für Poröse Medien (InterPore) sowie seit 2014 Präsident der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM).

Kontakt

Universität Stuttgart
SRC SimTech
Pfaffenwaldring 5a
D-70569 Stuttgart
Tel.: +49 (0) 711/685-66346
Fax +49 (0) 711/685-66347
E-Mail: Ehlers@mechbau.uni-stuttgart.de
Internet: www.simtech.uni-stuttgart.de

Computergestütztes Design komplexer Materialsysteme



Unter den Errungenschaften des technischen Fortschritts in den letzten Jahrzehnten lassen sich zahlreiche Entwicklungen und Konzepte erkennen, die mit der Entwicklung neuartiger Materialien eng verwoben sind. Keramiken, Polymere, Legierungen sowie biokompatible und hybride Materialien haben in einem breiten Spektrum wissenschaftlicher Disziplinen Einzug gehalten und Innovationen vorangetrieben, wie z. B. in medizinischen oder informationstechnologischen Anwendungen. Die

systematische, computergestützte Entwicklung hoch komplexer Materialien und intelligenter Werkstoffsysteme wird – motiviert durch Herausforderungen wie Nachhaltigkeit, Energieeffizienz, Robustheit oder Kostenreduktion – eine Schlüsselrolle in Forschung und Entwicklung der nächsten Dekaden spielen.

1. Computergestütztes Design neuartiger Materialien

Viele wegweisende Fortschritte der Materialwissenschaften sind durch Ausprobieren oder glückliche Zufälle erzielt worden. Wenn auch die Trial-and-Error Methodik aus der Wissenschaft nicht wegzudenken ist, begrenzen diese empirischen Ansätze die Vielfalt möglicher neuer Materialien auf die Auswahl an Werkstoffen, deren Eigenschaften und Verhalten a priori bekannt sind oder zumindest abgeschätzt werden können. Eine der größten interdisziplinären wissenschaftlichen Herausforderungen des 21. Jahrhunderts stellt

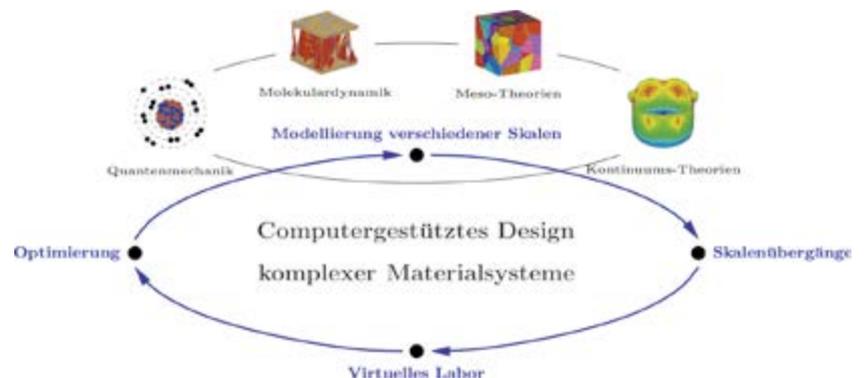
daher die Erforschung des immensen Potenzials noch unbekannter Materialsysteme dar. Das gezielte, computergestützte Design neuer Materialien sowie deren Optimierung hinsichtlich Funktionalität und Beständigkeit sind also entscheidende Faktoren auf dem Weg zu maßgeschneiderten und nachhaltigen Werkstoffsystemen. Um der Vielfalt theoretisch möglicher Materialien mit erforderlichen Eigenschaften sowie deren Konfigurationen, Zusammensetzungen und Verhalten unter verschiedenster Belastung Herr zu werden, ist die computergestützte Simulationstechnologie unverzichtbar und nimmt eine zentrale Rolle ein.

Eine Klasse an Materialien, die in diesem Kontext als Prototyp herangezogen werden kann, sind multifunktionale Materialien oder intelligente Werkstoffsysteme. Getreu dem Motto „Das Ganze ist mehr als die Summe seiner Teile“ weisen multifunktionale Materialien häufig integrierte elektrische, magnetische, optische oder Energie erzeugende Funktionalitäten auf, die erst im Zusammenspiel innovative Einsatzmöglichkeiten eröffnen, während die einzelnen Komponenten des Systems die Anwendbarkeit einschränken. Bekannte Beispiele multifunktionaler Materialien sind Formgedächtnislegierungen, piezoelektrische und magnetostruktive Materialien, die Anwendung als Aktoren und Sensoren finden. Multifunktionale Materialsysteme wie Lithium-Ionen-Batterien sind herausragende Beispiele der Energiespeichertechnik, deren Potenzial noch bei weitem nicht ausgeschöpft ist und die in naher Zukunft Personen- und Gütertransport revolutionieren werden. Wenn die Funktionalitäten solcher Materialien systematisch simulationsgestützt entworfen und bei voller Berücksichtigung der Kopplung von Effekten optimiert werden können, eröffnet sich hier ein außergewöhnliches Potenzial. Maßgeschneiderte Systeme ebnen den Weg für kurzzeitige, fortschrittliche Innovationszyklen und wegweisende Reduktion von Gewicht, Größe, Kosten oder Energieverbrauch bei gleichzeitiger Verbesserung der Sicherheit, Effizienz und Einsatzflexibilität. Grundlage solcher Entwicklungen ist die in vollem Umfang gekoppelte Simulation funktionaler Materialien.

Mit seinem Fokus auf der interdisziplinären Weiterentwicklung neuer Methoden der Simulationstechnologie bündelt der Exzellenzcluster Simulation Technology (SimTech) Kapazitäten und Bestrebungen, um diese Herausforderungen anzunehmen und die bisher vorhandene Limitierung qualitativer Vorhersagen komplexer Materialsysteme zu durchbrechen. Forscherinnen und Forscher aus verschiedensten Feldern wie Physik, Mathematik, Materialwissenschaft, Kontinuumsmechanik und Informatik tragen spezifische interdisziplinäre Kompetenzen bei, um die Vision des computergestützten Designs innovativer Materialsysteme voran zu bringen. Dies umfasst die Kopplung folgender methodischer Komponenten (01):

SUMMARY

The article addresses aspects related to the SimTech vision “Towards Computational Material Design”. It provides a descriptive overview about fundamental tasks in this area of research, such as complex multi-field modeling approaches of coupled problems on different scales, the construction of scale bridging and homogenization tools for computational multi-scale models, high performance simulations of virtual test laboratories as well as ingredients of optimal material design. The aspects considered focus on continuum-physical top down descriptions, with an emphasis on high-performance functional materials. Three model problems are sketched: First, the construction of innovative continuum models for material micro-structures with size effects, induced by grain boundaries or domain walls. Next, ingredients of hybrid multi-scale and multi-field simulations are considered, with application to electro-magneto-mechanical coupling in smart materials. Finally, the design of innovative phase field models for complex fracture phenomena in coupled multi-scale and multi-field problems is addressed, applied to transport processes in lithium ion battery storage systems, ceramics and soils.

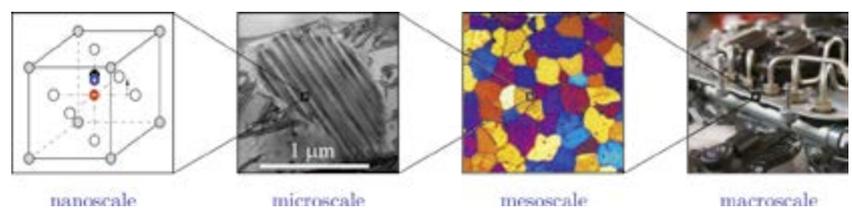


01

• Mehrfeldmodellierung auf unterschiedlichen Skalen:

Die *physikalischen Phänomene*, die das Gesamtverhalten von Materialien bestimmen, finden auf einem breiten Spektrum von *Zeit- und Längenskalen* statt. Das Verständnis

Interdisziplinäre Elemente des computergestützten Designs neuartiger Materialsysteme. Die Entwicklung komplexer Mehrskalen-Mehrfeld-Simulationswerkzeuge zur prädiktiven Materialmodellbildung und gezielten Optimierung ist eine Kernvision des SimTech Clusters.



02

solcher Mehrfeldphänomene auf den einzelnen Skalen ist daher die Grundvoraussetzung für die Mehrskalenmodellierung von komplexen Materialverhalten mit thermo-chemo-elektro-magneto-mechanischen Kopplungen. Beispiele sind die

Hierarchische Mehrskalen-Mehrfeldprobleme. Die prädiktive Beschreibung und Optimierung einer komplexen Materialstruktur, z.B. für elektromechanisch aktive Keramiken, erfordert Ansätze zur Modellbildung, die Nano- bis Makroskalen durch modellintrinsic Skalenübergänge koppeln.

Clusterbildung von Leerstellen, die Nukleation von Versetzungen, Phasentransformationen, die Reorientierung von Polymernetzwerken sowie das Wachstum von Rissen. SimTech erarbeitet *Simulationswerkzeuge* für die verschiedenen Zeit- und Längenskalen. Diese reichen von Methoden der Dichte-Funktional-Theorie zur Berechnung von Elektronenstrukturen über molekulardynamische Methoden für atomistische Simulationen bis hin zu Finite-Element-Methoden für makroskopische Kontinuumsprobleme.

- **Skalenübergänge und Homogenisierung:**

Um das Gesamtverhalten eines Materialsystems vorherzusagen, muss das Zusammenspiel der Phänomene auf den *unterschiedlichen Skalen* verstanden werden. Dies wird durch eine Vielzahl hochkomplexer Methoden für *Skalenübergänge* ermöglicht. Längen- und Zeitskalen werden dabei durch innovative Simulationstechniken basierend auf Konzepten der Multiskalen-Materialmodellierung gekoppelt, sogenannte *Top-Down-* und *Bottom-Up-Zugänge*. Gewöhnlich modellieren Ingenieure Materialien auf der Kontinuums-skala und berücksichtigen dabei Informationen von kleineren Skalen, während Chemiker und Physiker meist den umgekehrten Zugang wählen. Indem sie gemeinsam ihre Zugänge kombinieren und Längen- und Zeitskalen überbrücken, tragen die verschiedenen SimTech-Wissenschaftler dieser traditionell getrennten Gebiete zum Ziel unserer Vision bei, komplexe Materialien computergestützt zu designen.

- **Hochleistungsrechnensysteme für virtuelle Labore:**

Mit Hilfe von gekoppelten Mehrfeld-Multiskalen-Simulationsmodellen kann nicht nur das Gesamtverhalten existierender Materialien mit bereits bekannter Mikrostruktur vorhergesagt werden. Darüber hinaus können auch *neue Materialien* mit virtueller Mikrostruktur auf atomistischer, mikroskopischer oder mesoskopischer Skala untersucht werden. Die Konstruktion solcher „virtuellen Labore“ ermöglicht *virtuelle Experimente* mit gänzlich neuen Materialien und Molekülen, deren Simulation enorme Rechenleistung erfordert. Hochleistungsfunktionsmaterialien mit bisher unbekanntem Eigenschaften können dann durch systematische Mikrostrukturmodifikationen im Rahmen von

Multiskalen- und Mehrfeldproblemen mit thermo-elektro-chemo-mechanischer Kopplung erforscht werden.

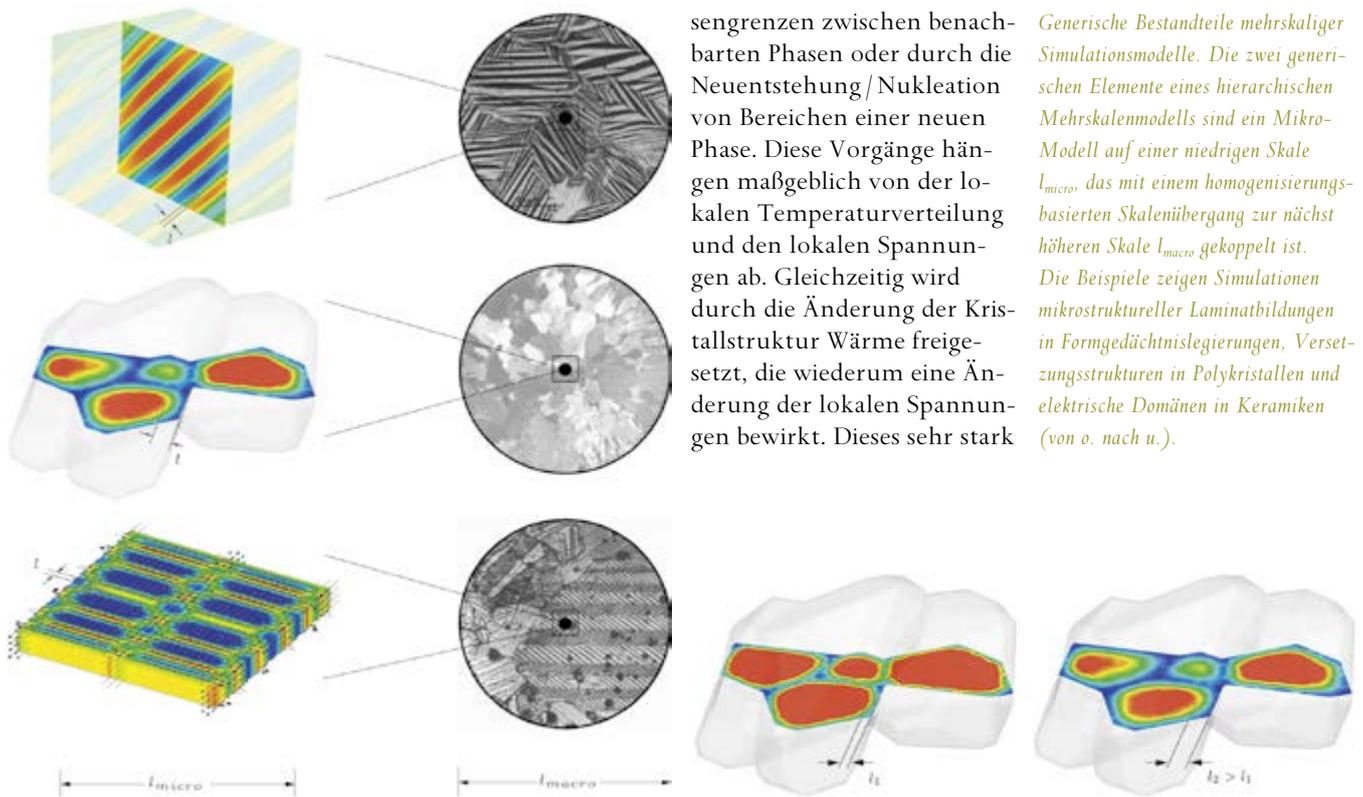
- **Optimierung und Materialdesign:**

Der letzte Schritt zur Vision des computergestützten Materialdesigns ist die *Optimierung* der Mikrostruktur von Materialien mit Blick auf gewünschte Eigenschaften und Funktionalitäten. Die Lösung dieses inversen Problems mit Hilfe virtueller Experimente und einer stetig wachsenden Datenbank erlaubt schließlich das Design neuer, „maßgeschneiderter Materialien und Moleküle“. Das Gesamtverhalten neu entwickelter hybrider Materialsysteme kann nun kontrolliert und optimiert werden.

Der Weg zum integrativen Design von Materialsystemen ist vielschichtig. Unsere Arbeitsgruppe fokussiert sich auf *kontinuumsphysikalische* Formulierungen mehrskaliger Top-Down-Modelle für Materialien im Mehrfeld-Kontext, sowie deren robuster und numerisch effizienter Implementierung. Kernkompetenzen umfassen die *makroskopische Materialtheorie* und deren numerische Durchdringung, die in hohem Maße mit Konzepten der mathematischen Analysis und Numerik gekoppelt ist. Ein übergeordneter methodischer Aspekt ist die Entwicklung *kanonischer Variationsprinzipien für Materialklassen*, die umfassende mathematische Analysen ermöglichen und einen intrinsischen Zugang zur Konstruktion numerischer Algorithmen bieten. Wir zeigen im folgenden, welche Anwendungen für einige funktionale Materialien denkbar sind, wo die physikalischen Ursprünge des Materialverhaltens liegen sowie die innovativen Aspekte der Modellbildung und Simulation, die alle auf Grundlage von Variationsprinzipien entwickelt wurden.

2. Komplexe Modelle für Mikrostrukturen mit Größeneffekten

Von besonderem Interesse in Hinblick auf Optimierung und Design sind Materialien, deren makroskopisches Verhalten sehr eng mit ihrer – sich möglicherweise zeitlich entwickelnden – Mikrostruktur verbunden ist. Ein faszinierendes Beispiel sind in diesem Zusammenhang Formgedächtnislegierungen wie NITINOL oder CuAlNi. Diese Materialien haben außerordentliche thermomechanische Eigenschaften und zeigen besonderes makroskopisches Ver-



03

04

halten wie Superelastizität oder den Formgedächtniseffekt, die ihre Bezeichnung als „intelligent“ oder „funktionale“ Materialien rechtfertigen. Aufgrund ihres Verhaltens finden sie unter anderem Anwendung im Bereich der Aktuatorik oder im biomedizinischen Bereich, z.B. für Stents.

Um das ungewöhnliche Verhalten von Formgedächtnislegierungen zu verstehen, muss man ihre Kristallstruktur betrachten: Je nach Temperatur bilden unbelastete Einkristalle entweder Austenit (bei höheren Temperaturen und mit höherer Symmetrie) oder Varianten von Martensit (bei niedrigeren Temperaturen und mit niedrigerer Symmetrie). Abhängig von der thermischen und mechanischen Belastung bilden sich charakteristische Mikrostrukturen wie Laminare oder geschachtelte Laminare. Polykristalline Formgedächtnislegierungen können damit aus vielen unterschiedlich orientierten Kristallkörnern mit einer Vielfalt an komplexen Mikrostrukturen bestehen.

Wenn Formgedächtnismaterialien einer thermischen und/oder mechanischen Belastung ausgesetzt werden, führt dies zu lokalen Änderungen der Kristallstruktur, entweder durch die Bewegung von Pha-

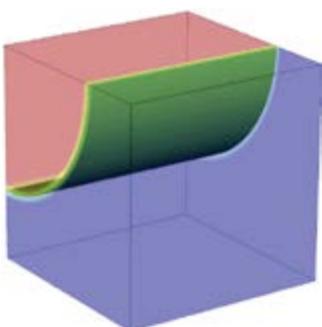
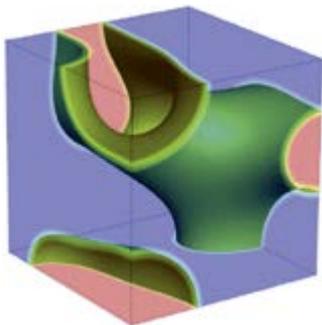
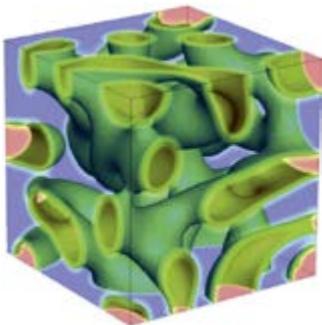
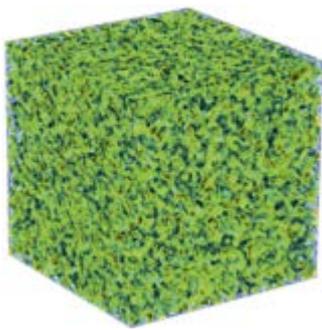
sengrenzen zwischen benachbarten Phasen oder durch die Neuentstehung/Nukleation von Bereichen einer neuen Phase. Diese Vorgänge hängen maßgeblich von der lokalen Temperaturverteilung und den lokalen Spannungen ab. Gleichzeitig wird durch die Änderung der Kristallstruktur Wärme freigesetzt, die wiederum eine Änderung der lokalen Spannungen bewirkt. Dieses sehr stark

Generische Bestandteile mehrskaliger Simulationsmodelle. Die zwei generischen Elemente eines hierarchischen Mehrskaligen Modells sind ein Mikro-Modell auf einer niedrigen Skala l_{micro} , das mit einem homogenisierungs-basierten Skalenübergang zur nächst höheren Skala l_{macro} gekoppelt ist. Die Beispiele zeigen Simulationen mikrostruktureller Laminatbildungen in Formgedächtnislegierungen, Versetzungsstrukturen in Polykristallen und elektrische Domänen in Keramiken (von o. nach u.).

gekoppelte Verhalten aus mechanischer Verformung, Wärmeleitung und Phasenumwandlung ist verantwortlich für das „intelligente“ Verhalten auf der Makroebene. Es überrascht nicht, dass das Verständnis, die Modellierung und die Simulation dieses diffizilen Verhaltens seit geraumer Zeit ein sehr aktives Forschungsgebiet in der Mathematik, der Materialwissenschaft, der Physik und der Kontinuumsmechanik ist. Dies hat zur Entwicklung einer Vielzahl von Modellen für ganz unterschiedliche Aspekte des Materialverhaltens geführt, die grob in „einskalige“ und „mehrskalige“ Ansätze eingeteilt werden können, je nachdem, ob sie das Materialverhalten nur auf einer Skala betrachten, oder verschiedene Skalen verbinden.

Ein Beispiel für einen einskaligen Ansatz sind molekulardynamische Modelle, die die Bewegung der einzelnen Atome vorausbestimmen, und damit die Vorhersage von mechanischem Verhalten, thermischen Prozessen und Phasentransformationen erlauben. Leider lassen diese Simulationen nur die Vorhersage extrem kleiner Längen- und Zeitskalen zu und eignen sich daher nicht für technische Anwendungen.

Beschreibung von Größeneffekten in Mehrskaligen Modellen. Die Versetzungsbewegungen in plastisch deformierten Mikrostrukturen metallischer Polykristalle werden durch komplexe Mehrfeld-Kontinuumsmodelle beschrieben, die z.B. Größeneffekte an Korngrenzen der Mikrostruktur beschreiben.



05

High-Performance Simulation der Entstehung optimaler Mikrostrukturen. Zeitliche Entwicklung der Phasentrennung eines homogen vermengten binären Gemischs, umgesetzt durch innovative Finite-Elemente Implementierung der Cahn-Hilliard Gleichung.

Am anderen Ende der Riege einskaliger Ansätze finden sich makroskopische Modelle, die oft auf den Strukturen der Plastizität basieren und rein phänomenologisch das Materialverhalten beschreiben. Diese Modelle können teils nur vereinzelte Aspekte des Materialverhaltens vorhersagen, für die ihre Parameter zuvor angepasst wurden und lassen oft eine tiefe physikalische Motivation vermissen.

Vom physikalischen Standpunkt betrachtet, sind daher die Modelle besser motiviert, die die mehrskalige Struktur von Formgedächtnislegierungen berücksichtigen. Je nachdem, welche Phänomene auf welcher Skala berücksichtigt werden und inwieweit deren Kopplung betrachtet wird, ergeben sich hier die verschiedensten Möglichkeiten. Sehr interessant und vielversprechend sind dabei sogenannte Relaxierungsansätze. Diese verwenden Konvexitätsbetrachtungen aus der modernen Mathematik, um die Uneindeutigkeit der Existenz verschiedener Phasen makroskopisch aufzulösen. Dabei erlauben sie die für Formgedächtnislegierungen charakteristischen, laminatartigen Mikrostrukturen.

Diese Ansätze vernachlässigen jedoch die dissipativen Mechanismen der Phasentransformation ebenso wie Energien an den Schnittstellen der Phasengrenzen. Diese Phänomene können mit sogenannten *Phasenfeldmodellen* berücksichtigt werden, die in der Lage sind, Größeneffekte abzubilden. In Phasenfeldmodellen werden Ordnungsparameter als zusätzliche Felder eingeführt, die lokal der Beschreibung von Kristallstrukturen dienen. Im Rahmen der hier vorliegenden Formulierung entsprechen die Phasengrenzen Diskontinuitäten des Phasenfelds. Um diese Diskontinuitäten zu vermeiden, werden die Phasengrenzflächen durch geglättete Ansätze approximiert, wodurch zusätzliche Gradiententerme in die Energie Einzug halten. Letztere sind verantwortlich für die daraus folgende klassische Ginzburg-Landau Struktur der Problemstellung.

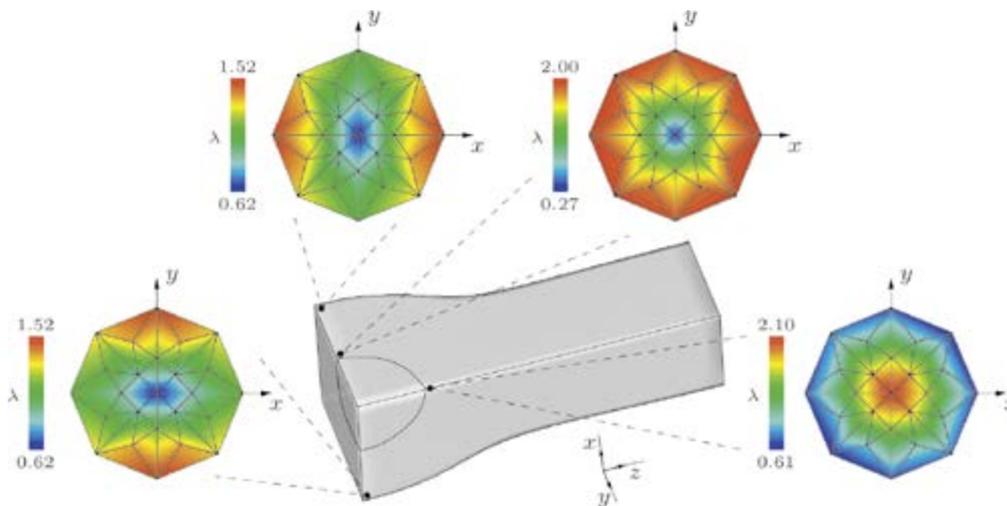
Unsere Forschungsaktivitäten im Bereich der Phasentransformationen konzentrieren sich in letzter Zeit auf die Verbesserung der Modellbildung und Entwicklung konsistenter Variationsprinzipien für Phasenfeldmodelle. Wir konnten ein Phasenfeldmodell für martensitische Formgedächtnislegierungen entwickeln, das die Kohärenzabhängigkeit der Grenzflächen-

energie berücksichtigt und somit eine präzise Trennung von Grenzflächen- und Festkörperenergie ermöglicht. Mit diesem Modell lassen sich die energetischen Zustände von Laminat-Mikrostrukturen im Detail untersuchen und die damit verbundenen Größeneffekte voraussagen. Von den Strukturen der Ginzburg-Landau Gleichung inspiriert, entwickelten wir einen neuen variationellen Zugang zur Cahn-Hilliard Theorie diffusiver Phasentrennung (05). Beide Modelle gehören zur Klasse der standard-dissipativen Materialien mit erweiterten Gradiententermen, für die wir Variationsprinzipien entwickelt haben. Diese können auch zur Beschreibung von Gradientenplastizität verwendet werden. (03) und (04) zeigen Simulationen plastischer Deformationen von Polykristallen mit Größeneffekten.

3. Hierarchische Mehrskalensmodelle für Mehrfeldprobleme

Die zunehmende Miniaturisierung von Alltagsgegenständen führt zu einer erhöhten Nachfrage von fortschrittlichen und robusten Materialien, die einer Verwendung innerhalb der Informationstechnologie oder des Chemie- und Bioingenieurwesens gewachsen sind. Dabei orientiert man sich vermehrt an biologischen Systemen und deren optimaler struktureller Anpassung an ihre Funktion, um neue Materialklassen mit aktiven Eigenschaften zu entwickeln. Ein typisches Merkmal natürlicher Strukturen und Systeme ist die Auswertung von Stimuli mit unmittelbarer systemimmanenter Reaktion, wie sie etwa bei belastungsinduziertem Knochenwachstum vorkommen. Die Übertragung dieser Funktions- und Verhaltensweise in die Technik entspricht dem gezielten Design und Einsatz von Aktoren und Sensoren.

Beispiele für diese sogenannten intelligenten oder funktionalen Werkstoffe sind u. a. elektrostriktive und magnetostruktive Materialien, Piezoelektrika sowie Piezomagnetika oder Formgedächtnislegierungen. Industrielle Anwendungen finden sich in vielen Bereichen, etwa in der Luft- und Raumfahrt oder in der Automobilindustrie. Hier sind bereits intelligente Materialien im Einsatz, jedoch besteht großes Potenzial für Verbesserungen. So rücken hochflexible funktionale Materialien wie elektroaktive Polymere (EAPs) und

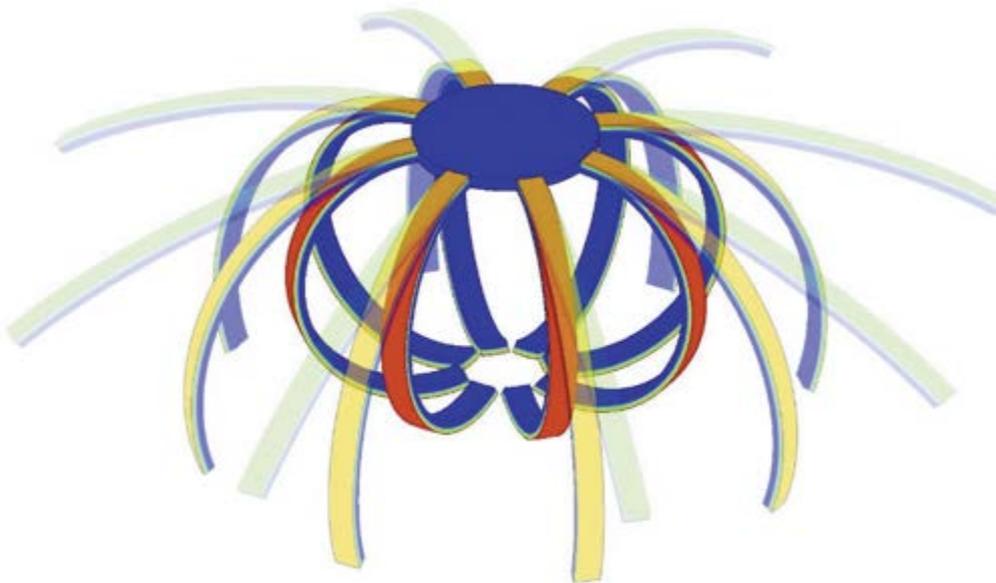


06

magnetorheologische Elastomere (MREs) in vielen Bereichen in den Fokus. Der grundlegende Mechanismus solcher Materialien liegt in der Erzeugung elektrischer Ladungen und magnetischer Dipole als Folge einer mechanischen Beanspruchung – der inverse Effekt ist gleichfalls möglich. Solche Materialien maßgeschneidert und in optimierter Form neu oder weiterzuentwickeln, ist Kernanliegen unserer Arbeit. Die in spezifischen Funktionalitäten ver-

die Konstruktion *hierarchischer Mehrskalensmodelle*, welche charakteristische mikrostrukturelle Mechanismen beinhalten. Dies erfordert die Entwicklung numerischer Homogenisierungskonzepte für gekoppelte Mehrfeldprobleme und deren numerische Durchdringung durch beispielsweise FEM² Methoden. Wie erwähnt stellen solche numerischen Mehrskalensmodelle wegen ihrer hohen Dimensionalität enorme Anforderungen an die Rechenleistung.

Mehrskalensimulation magnetorheologischer Elastomere (MREs): Das makroskopische Materialverhalten wird durch Reorientierungen von Polymerketten in einer Mikrostruktur bestimmt. Dargestellt ist die mechanische Deformation infolge eines externen Magnetfeldes.



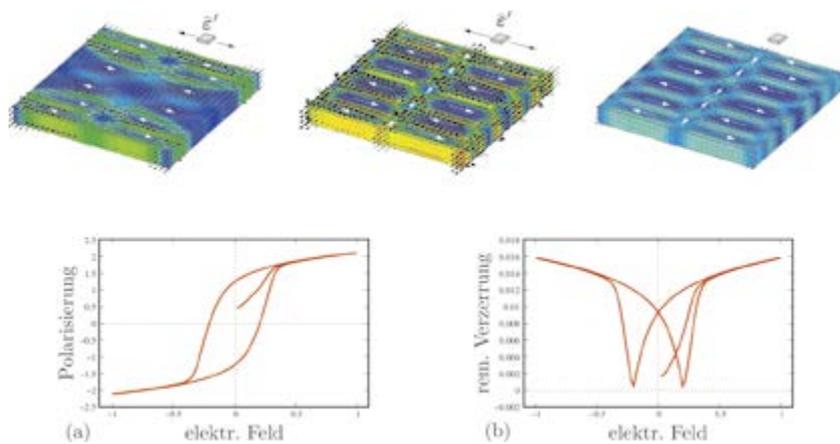
07

besserten Materialien lassen sich so in die diversen Einsatzbereiche bestmöglich einpassen.

Die prädiktive Simulation sowie die simulationsbasierte Optimierung von magneto- und elektro-mechanischen Kopplungseffekten in Funktionsmaterialien erfordern

Simulationen hierarchischer Mehrskalensmodellen sind in (06) und (07) skizziert. Ein typischer Bestandteil einer solchen Modellbildung mit intrinsischen Skalensübergängen für die Analyse dissipativer Ferroelektrika ist ein *Phasenfeldmodell*, das die Entwicklung von Domänen gleicher

Mehrskalensimulation elektroaktiver Polymere (EAPs): Das makroskopische Materialverhalten, hier eine zweischichtige Polymerstruktur als „starfish gripper“, wird durch Reorientierungen von Polymerketten in einer Mikrostruktur bestimmt.



08

Mehrskalen-Mehrfeld-Simulation ferroelektrischer Keramiken. Mechanisch induzierte Evolution von Domänen elektrischer Polarisierung auf der Mikroebene, modelliert durch ein innovatives Phasenfeldmodell. Das homogenisierte mikroskopische Verhalten der Domänenevolution des elektro-mechanisch gekoppelten Modells zeigt auf der Makroebene a) dielektrische und b) Schmetterlings-Hysteresen.

elektrischer Polung auf der Mikroskala beschreibt. Dieses berücksichtigt u.a. charakteristische Größeneffekte wie die Dicke der Domänenwände im Rahmen einer komplexen mathematischen Modellstruktur. Mechanisch induzierte, elektrische Polarisierungszustände sind in (08) dargestellt. Diese mikroskopische Evolution der elektrisch polarisierten Domänen verursacht auf der Makroskala typische Hystereseeffekte, welche sich durch den intrinsischen Homogenisierungsansatz des Mehrskalensmodells ergeben (typische Kennkurven: s. (08)). Durch Struktur-Design auf der Mikroskala kann eine Optimierung dieser makroskopischen Effekte erzielt werden, z.B. in Hinblick auf eine Minimierung der Hysterese, die durch simulationsbasierte virtuelle Tests auf Grundlage des skizzierten Mehrskalens-Mehrfeld-Modells ermöglicht wird.

3. Hierarchische Mehrskalensmodelle für Mehrfeldprobleme

Die Kopplung von Mehrskalens-Mehrfeld-Modellen für Funktionsmaterialien mit der Beschreibung mannigfaltiger Versagensmechanismen kann am Beispiel von Lithium-Ionen-Akkumulatoren dargestellt werden. Die Industrie hat großes Interesse an der Weiterentwicklung wiederaufladbarer Batterien mit *höherer Energiekapazität und verlängerter Lebensdauer* für Elektroautos, tragbare elektrische Geräte sowie medizinische Implantate. Wir haben ein chemo-mechanisches Mehrfeldmodell für die Li-Ionen-Diffusion mit einem innovativen Phasenfeldmodell für komplizierte Mikrobruchphänomene kombiniert.

Ein typischer Lithium-Ionen-Akkumulator besteht aus Anode, Kathode, Trennschicht und Stromabnehmer (s. Prinzipskizze in (09)). Die Anode besteht aus Graphit, Silizium oder Kohlenstoff, wobei letzteres in der Regel von einem polymeren Bindemittel gebunden wird. Als Kathode wird eine Oxid-Verbindung in einer polymeren Matrix verwendet, welches den Elektronentransfer zum Stromabnehmer ermöglicht. Die Trennschicht setzt sich aus Elektrolyt, wie zum Beispiel Lithiumsalz, und einem porösen Polymer zusammen. Während des Ladevorgangs werden Lithium-Ionen von der positiven Elektrode durch Oxidation gelöst, welche dann von der Kathode zur Anode durch die Trennschicht wandern und sich an der Anode zusammen mit den durch die Aufladung einströmenden Elektronen einlagern. Diese Reaktion kehrt sich während des Entladevorganges um. Von großem Interesse ist die Analyse des Zusammenspiels zwischen Lade- und Entladezyklen und den sich daraus entwickelnden mechanischen Deformationen, die zu Mikrorissen führen und eine verminderte Leistungsfähigkeit und Lebensdauer der Batterie bewirken. Das Problem ist die Interaktion zwischen chemischem, elektrischem, thermischem sowie mechanischem Verhalten. Besonders hervorzuheben sind die Wechselwirkungen der chemischen Diffusion mit der Mechanik. Sie führen zu Kontraktion und Expansion der Elektroden an Anode und Kathode. Eine entscheidende Rolle für die Spannungsentwicklung, die zu einem mechanischen und elektrochemischen Abbau aufgrund von Mikrorissen in Elektrode und Bindemittel führt, nehmen die Partikelform der Elektrode sowie die Lade- und Entladeraten ein.

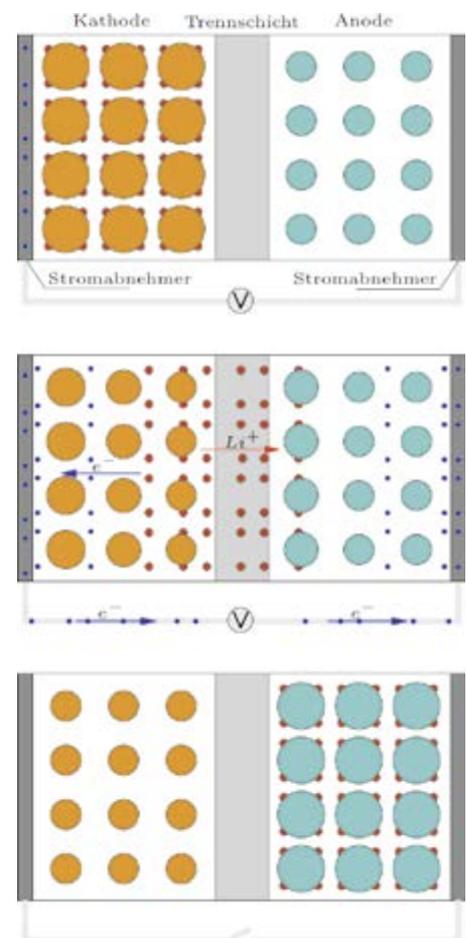
Das simulationsbasierte Design einer optimalen Mikrostruktur der Batterie auf der Nanoskala ist eine besondere Herausforderung der aktuellen Forschung mit dem Ziel, die Anzahl der Mikrorisse zu verringern. Hier hat sich Silizium, dank seines, im Vergleich zu konventionellen Materialien, hohen Leistungsvermögen, als wichtiger Kandidat für die Anode herauskristallisiert. Jedoch existieren bisher keine kommerziellen Lithium-Silizium-Anoden auf dem Markt. Der hohen Speicherkapazität des Siliziums steht das stark ausgeprägte Quellen und Schwinden des Materials gegenüber. Die derzeitige Forschung fokussiert sich auf ein optimales topo-

Dieser Artikel beleuchtet Aspekte der SimTech-Vision „Towards Computational Material Design“. Er gibt einen qualitativen Überblick über grundlegende Aufgaben in diesem Forschungsbereich, wie z.B. Mehrfeld-Modellierungsansätze gekoppelter Probleme auf verschiedenen Skalen, die Konstruktion von Skalenübergängen und Homogenisierungsmethoden für numerische Mehrskalen-Modelle, High Performance Simulationen virtueller Testumgebungen sowie Aspekte optimalen Materialdesigns. Die Darstellung fokussiert auf kontinuums-physikalische top-down Modellbildungen für komplexes Verhalten von Funktionsmaterialien. Drei Modellprobleme werden skizziert: Zunächst wird auf die Konstruktion innovativer Kontinuumsmodelle für Mikrostrukturen mit Größeneffekten eingegangen. Anschließend werden Elemente hybrider Mehrskalen- und Mehrfeldsimulationen mit einem Fokus auf elektro-magneto-mechanischer Kopplung in intelligenten Werkstoffsystemen aufgezeigt. Schließlich wird das Design von Phasenfeldmodellen für komplexe Bruchprozesse in gekoppelten Mehrfeld- und Mehrskalen-Problemen beleuchtet, angewandt auf Transportprozesse in Lithium-Ionen-Akkumulatoren, Keramiken und Böden.

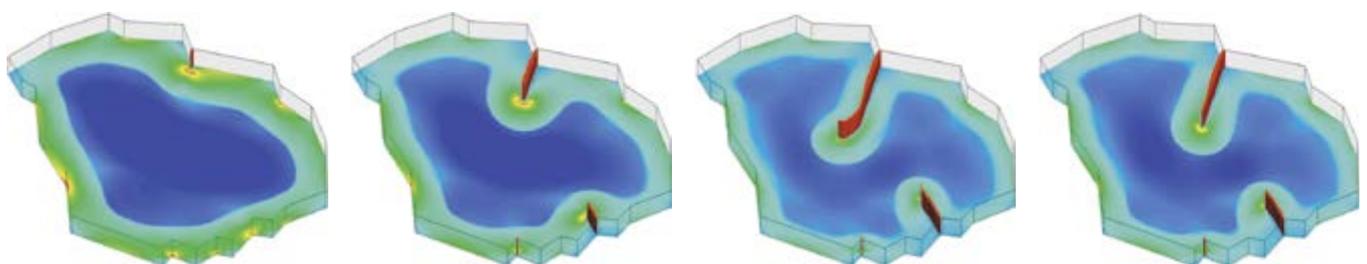
logisches Design der Mikrostrukturen, die auch bei großer Volumenänderung keine Rissbildung aufzeigen und nicht fragmentieren.

Silizium besitzt die höchste bekannte theoretische Ladekapazität. Obwohl diese viel höher als bei jedem anderen herkömmlichen Anodenmaterial (Graphit, Metalloxid) ist, kann die volle Kapazität des Siliziums aufgrund der Problematik des Bruchversagens nicht ausgenutzt werden. So zeigt eine Siliziumanode während des Aufladens eine Volumenexpansion von rund 300 Prozent sowie hohe punktuelle Spannungen, welche Mikrorisse bewirken und maßgeblich verantwortlich für den Verlust der elektrischen Leitfähigkeit und Batteriekapazität sind. Um dieses Problem zu beheben, wird weltweit an optimalem Design für Nanostrukturen geforscht, welche die negativen Einflüsse der Ladevorgänge von Siliziumanoden mindern.

Das Simulationsmodell zur Kopplung eines chemomechanischen Deformations-Transport-Modells mit den in der Arbeitsgruppe entwickelten innovativen Phasenfeldmodellen der Bruchmechanik beschreibt erstmals die durch diffusions-induzierte Spannungsspitzen entstehende Rissbildung. Dabei werden Riss-Diskontinuitäten durch ein Phasenfeld approximiert. Dieser Ansatz ist sehr vorteilhaft gegenüber konventionellen numerischen Techniken zur Beschreibung des Rissfortschritts, da er auch hochkomplexe Rissmuster mit Verzweigungen beschrei-



Ladevorgang einer Lithium-Ionen-Batterie



Nanostrukturen aus dünnen Filmen, Nanodrähte und hohle Nanosphären wurden bereits erfolgreich entwickelt und zeigen verbesserte Ermüdungseigenschaften bezüglich zyklischer Belastungen.

ben kann. Die Rissbildung und Ausbreitung in einer realistischen Lithium-Mangan-Oxid (LMO) Kathode unter schneller elektrischer Aufladung ist in (10) dargestellt. Ähnliche Konzepte zur

High-Performance Mehrskalen-Mehrfeld-Simulation von Lithium Ionen Batterien. Evolution von Mikrorissen in Partikeln der Elektrode bei fortschreitendem Ladeprozess, modelliert mit einem innovativen Phasenfeldmodell für Bruchfortschritt.

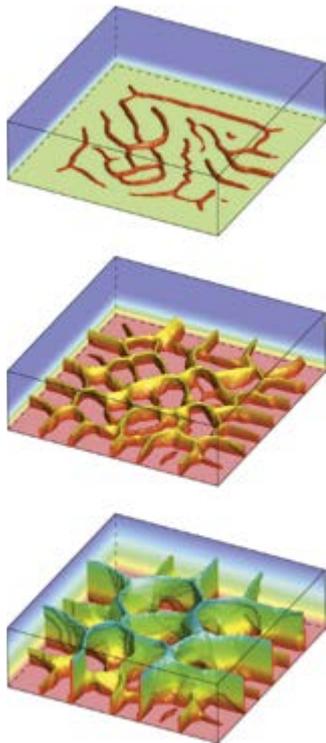
Rissausbreitung und Verzweigung sind in (11) zu sehen. Hier lassen sich die Schwindrissbildungen in abkühlenden Keramiken und austrocknenden Böden erkennen.

Die entwickelten numerischen Simulationen eröffnen neue Wege für computerorientiertes Design und Optimierung

von Batterie-Mikrostrukturen mit verbesserter Haltbarkeit und geringeren Materialkosten. Sie sind von entscheidender Bedeutung im Hinblick auf eine Steigerung der Attraktivität dieser Technologie und stehen im Mittelpunkt zukünftiger Forschungsarbeiten des SimTech Clusters.

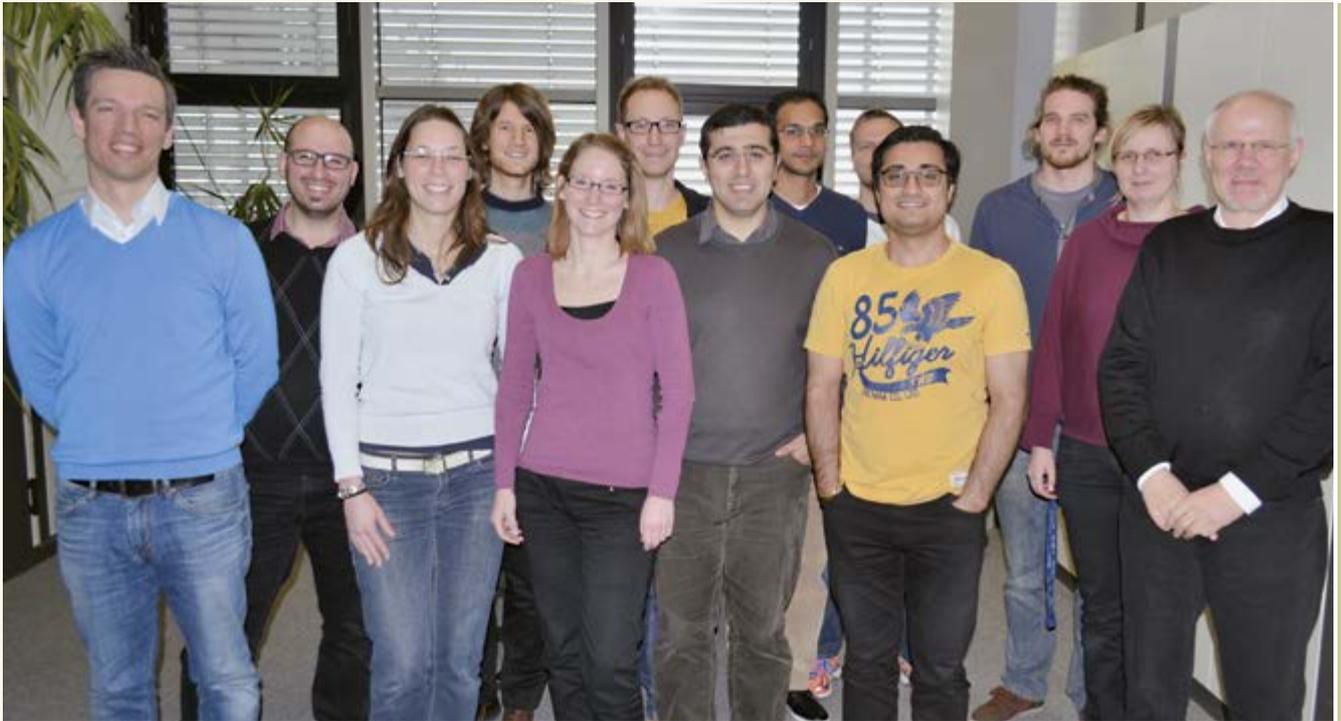
• Christian Miehe et al.

Literatur



- BHATTACHARYA, K. AND JAMES, R.D. [2005]: *The Material is the Machine*. *Science*, 307: 53–54.
- EHRENSTEIN, W., MATHUR, N.D. AND SCOTT, J.F. [2006]: *Multiferroic and Magneto-electric Materials*. *Nature*, 442: 759–765
- JAMES, R. D. [2000]: *New materials from theory: Trends in the Development of Active Materials*. *International Journal of Solids and Structures*, 37: 239–250.
- MIEHE, C., ALDAKHEEL, F. AND MAUTHE, S. [2013]: *Mixed Variational Principles and Robust Finite Element Implementations of Gradient Plasticity at Small Strains*. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 94: 1037–1074.
- HILDEBRAND, F.E. AND MIEHE, C. [2012]: *A Phase Field Model for the Formation and Evolution of Martensitic Laminate Microstructure at Finite Strains*. *Philosophical Magazine*, 92: 4250–4290.
- MIEHE, C. [2011]: *A Multi-Field Incremental Variational Framework for Gradient-Extended Standard Dissipative Solids*. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 59: 898–923.
- MIEHE, C., ROSATO, D. AND KIEFER, B. [2011]: *Variational Principles in Dissipative Electro-Magneto-Mechanics: A Framework for the Macro-modeling of Functional Materials*. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 86: 1225–1276.
- MIEHE, C., WELSCHINGER, F. AND HOFACKER, M. [2010]: *Thermodynamically Consistent Phase-field Models of Fracture: Variational Principles and Multi-field FE Implementations*. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 83: 1273–1311.
- MIEHE, C., ZÄH, D. AND ROSATO, D. [2012]: *Variational-based Modeling of a Micro-electro-elasticity with Electric Field-driven and Stress-driven Domain Evolutions*. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 91, 115–141.
- ROSATO, D. AND MIEHE, C. [2014]: *Dissipative Ferroelectricity at Finite Strains*. *Variational Principles, Constitutive Assumptions and Algorithms*. *International Journal of Engineering Science*, 74: 162–189.
- ZÄH, D. AND MIEHE, C. [2013]: *Computational Homogenization in Dissipative Electro-Mechanics of Functional Materials*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 267: 487–510.

DIE AUTOREN UND MITARBEITER



DIE ARBEITSGRUPPE VON PROF. MIEHE entwickelt Simulationsmethoden für ingenieurwissenschaftliche Problemstellungen mit komplexem Materialverhalten von Festkörpern. Ansporn und Leitgedanke ist die Konzeption prädiktiver Analysen und die Optimierung makroskopischen Materialverhaltens unter mechanischen und nicht-mechanischen Einflüssen, d.h. bei Berücksichtigung thermo-chemo-elektro-magneto-mechanischer Kopplungseffekte.

Methodisch umfasst dies die rigorose mathematische Formulierung theoretischer und algorithmischer Modelle mit einem Fokus auf die in die Kontinuumsphysik eingebettete Materialtheorie. Von großer Bedeutung ist dabei die Berücksichtigung der Evolution von Mikrostrukturen und die Überbrückung von Längenskalen mit modernen Homogenisierungstechniken und Mehrskalenmodellen. Dieser Prämisse folgend werden Mehrskalenkonzepte für mikro-mechanisch basierte Materialmodelle entwickelt. Ein Schwerpunkt der Arbeitsgruppe ist die Formulierung variationeller Methoden für diese Problemstellungen, die tiefgreifende mathematische Analysen sowie robuste und effiziente Implementierung ermöglichen.

Die Gruppe koordiniert den internationalen Masterstudiengang „Computational Mechanics of Materials and Structures (COMMAS)“ und das Erasmus Mundus Masterprogramm „Computational Mechanics“ in Zusammenarbeit mit der Universität Politècnica de Catalunya, Swansea University, Ecole Centrale Nantes und Tsinghua Universität Peking.

Hinten von links nach rechts:
M.Sc. Fadi Aldakheel, M.Sc. Daniel Vallicotti, Dipl.-Ing. Steffen Mauthe, M.Sc. Gautam Ethiraj, Dipl.-Ing. Dominic Züh, Dipl.-Ing. Lukas Böger;

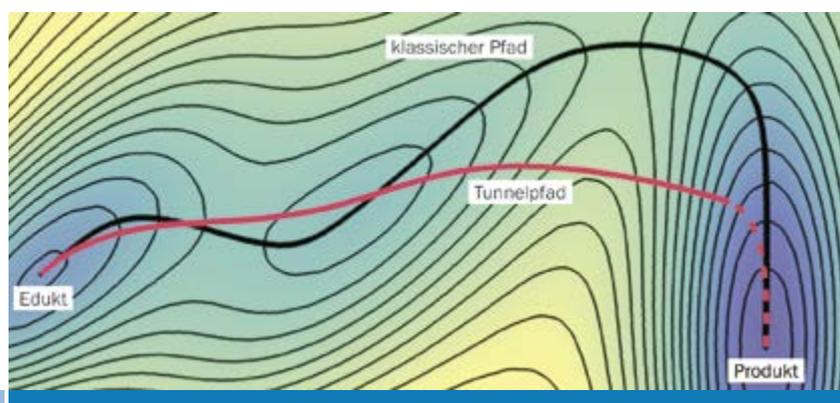
vorne von links nach rechts:
Jun. Prof. Dr.-Ing. Marc-André Keip, Dipl.-Ing. Lisa Schünzel, Dipl.-Ing. Heike Ulmer, Dr.-Ing. Hüsnü Dal, M.Sc. Arun Raina, Prof. Dr.-Ing. habil. Christian Mieke

Kontakt

Universität Stuttgart
Institut für Mechanik (Bauwesen)
Lehrstuhl I – Prof. Dr.-Ing. habil. Christian Mieke
Pfaffenwaldring 7, D-70569 Stuttgart
Tel. +49 (0) 0711/685-66378
Fax +49 (0) 0711/685-66347
Email: christian.mieke@mechbau.uni-stuttgart.de
Internet: www.mechbau.uni-stuttgart.de/lsl

Der Tunneleffekt in der Chemie

Wirft man einen Ball gegen eine Wand, dann prallt er zurück. Das gilt für Bälle und Wände, die der klassischen Mechanik gehorchen. Macht man, bildlich gesprochen, den Ball jedoch ganz leicht und klein und die Wand dünn, dann folgen beide den Regeln der Quantenmechanik. Und nun kann Erstaunliches passieren: Nicht jeder Ball prallt auch von der Wand ab, einige „fliegen“ förmlich durch die Wand, als wäre sie nicht vorhanden. Die Bälle verlieren dabei weder an Impuls noch an Energie. Kurios ist dabei, dass Wand und Ball trotz des glatten „Durchschusses“ gänzlich unversehrt bleiben.



01

Tunnelpfad (Instanton) im Vergleich zum klassischen Pfad beim Übergang von einem Eduktminimum zum Produktminimum in einem Energiehöhenliniendiagramm des Müller-Brown-Potentials. Niedrige Energie ist blau dargestellt, hohe Energie gelb. Der Instantonpfad ist kürzer als der klassische Pfad, aber teils höher in der Energie. Seine Fortsetzung als klassischer Pfad in Bereiche unterhalb der Reaktandenenergie ist gestrichelt dargestellt.

1. EINLEITUNG

Was hier nun etwas salopp beschrieben wurde, nennt man den quantenmechanischen Tunneleffekt. Dieser wurde in den 1920er Jahren von zwei Forschern unabhängig voneinander beschrieben: einmal von Friedrich Hund in Bezug auf chemische Reaktionen und einmal von George Gamow zur Erklärung des radioaktiven Zerfalls. Das eigentlich Erstaunliche an dem Effekt ist nun, dass ein Teilchen auch dann eine Barriere überwinden kann, wenn es im Grunde gar nicht die Energie dafür hätte, diese zu bezwingen.

Quantenmechanik

Objekte in unserem Alltag bewegen sich nach den Gesetzen der klassischen Physik. Leichte und kleine Körper, wie zum Beispiel Atome und Moleküle, weichen davon ab. Sie werden durch die Quantenmechanik beschrieben. Position und Geschwindigkeit eines Teilchens können beispielsweise nicht gleichzeitig exakt bestimmt werden, was in Heisenbergs Unschärferelation zusammengefasst ist. Man kann Wahrscheinlichkeitsaussagen über die Bewegung solcher Teilchen machen, aber keine spezifischen Bahnen angeben. Alle quantenmechanischen Objekte haben Teilchen- und Welleneigenschaften. Letztere bedingen unter anderem, dass sich Atome mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit sowohl vor als auch hinter einer Energiebarriere aufhalten können. Das ergibt den Tunneleffekt.

SUMMARY

Quantum tunneling, the penetration of energy barriers, is an important alternative in many areas of chemistry to classical, thermally activated processes. Despite its main effect on hydrogen transfer reactions at low temperature, cases are known in which tunneling plays a role even above room temperature and / or including heavy elements. The calculation of tunneling probabilities or rates requires more computational effort than the determination of classical rates. Instanton theory is an accurate and efficient method to calculate tunneling rate constants even for system with several dozen quantized atoms. The implementation in the flexible quantum chemical program ChemShell makes the instanton method accessible to the scientific community. The discovery of further reactions, which are altered or even enabled by the tunneling effect, is to be expected.

Dem leichten, kleinen Ball entsprechen in der Natur die Atome, die sich gemäß der quantenmechanischen Gesetzmäßigkeiten bewegen und somit beim Überwinden von chemischen Reaktionsbarrieren den beschriebenen Tunneleffekt ausnutzen können. Eine klassische, „normale“ chemische Reaktion, bei der diese quantenmechanischen Effekte der Atombewegung vernachlässigt werden, benötigt thermische Energie zur Überwindung einer Reaktionsbarriere. Je höher die Temperatur, desto mehr thermische Energie steht zur Verfügung und desto höher ist die Reaktionsgeschwindigkeit. Im Gegensatz dazu verläuft das Durchtunneln einer Energiebarriere temperaturunabhängig. Im Prinzip wird jede chemische Reaktion bei ausreichend tiefer Temperatur durch den Tunneleffekt dominiert. Die Reaktionsgeschwindigkeit wird durch die sogenannte Geschwindigkeitskonstante charakterisiert. Wie der Name schon andeutet, hängt die thermische Geschwindigkeitskonstante von der Temperatur, der Barrierenhöhe (genaugenommen: der Barrierenhöhe der freien Energie) und geringfügig von der Masse ab. Die Geschwindigkeitskonstante für Tunnelvorgänge ist temperaturunabhängig, sinkt aber mit steigender:

- Höhe der Barriere,
- Breite der Barriere (also der Länge des Tunnelpfades) und
- Masse der beteiligten Atome.

Aufgrund der Massenabhängigkeit ist der Tunneleffekt hauptsächlich für solche Reaktionen relevant, bei denen Wasserstoff, das leichteste aller Atome, involviert ist. Bei schwereren Atomen sind die Quanteneffekte weniger ausgeprägt.

Experimentell ist der Tunneleffekt nur indirekt nachweisbar: Einerseits durch eine temperaturunabhängige Reaktionsgeschwindigkeit bei niedriger Temperatur, andererseits durch einen besonders großen kinetischen Isotopeneffekt. Die Massenabhängigkeit der Tunnelrate ist bedeutend größer als die der klassischen Rate. So fanden wir beispielsweise Reaktionen, die mit leichtem Wasserstoff (Protium) über 3000 mal schneller ablaufen als mit dem chemisch äquivalenten Wasserstoffisotop Deuterium, also schwerem Wasserstoff [1]. In Simulationen ist der Tunneleffekt hingegen bedeutend leichter nachzuweisen, da Reaktionsgeschwindigkeiten mit und ohne Tunnelbeitrag berechnet werden können.

Es gibt viele Methoden um Geschwindigkeitskonstanten für Tunnelvorgänge zu berechnen. Die rigoroseste Herangehensweise ist dabei die Quantendynamik, die die Kerndynamik des Atoms durch die zeitabhängige Schrödingergleichung löst. Dies ist im Allgemeinen nur für Systeme mit wenigen Atomen möglich, bei denen man sich der globalen Potentialenergieoberfläche durch eine analytische Funktion annähern kann. Da quantenmechanische Effekte bei der Bewegung von Atomen deutlich weniger Bedeutung haben als beispielsweise bei Elektronen, ist eine semiklassische Beschreibung (Wentzel-Kramers-Brillouin-Methode (WKB) o. ä.) der Atombewegung oft ausreichend. Kurz zusammengefasst wird dabei ein konkreter Tunnelpfad verwendet, Abweichungen davon werden lediglich genähert betrachtet. Dabei ergeben sich Wahlmöglichkeiten für den Pfad, der eine möglichst

Feynmanpfade

Es gibt einige unabhängige Verfahren, die Gesetze der Quantenmechanik mathematisch zu formulieren. Der bekannteste Ansatz ist die Schrödingergleichung, eine Differentialgleichung, deren Lösungen die Wellenfunktion der betreffenden Systeme darstellt. Die Heisenbergsche Matrixformulierung ist eine Alternative, eine weitere ist Feynmans Pfadintegralverfahren. Es erlaubt auf Grund einer mathematischen Äquivalenz, die quantenmechanische Bewegung eines Teilchens durch die rein klassische Bewegung einer Kette von identischen Teilchen, die durch Federn verbunden sind, zu beschreiben. Während sich die Schrödingergleichung gut zur numerischen Simulation der Elektronen eignet, findet Feynmans Pfadintegralverfahren häufig, so wie hier, zur Beschreibung quantenmechanischer Atombewegung Verwendung.

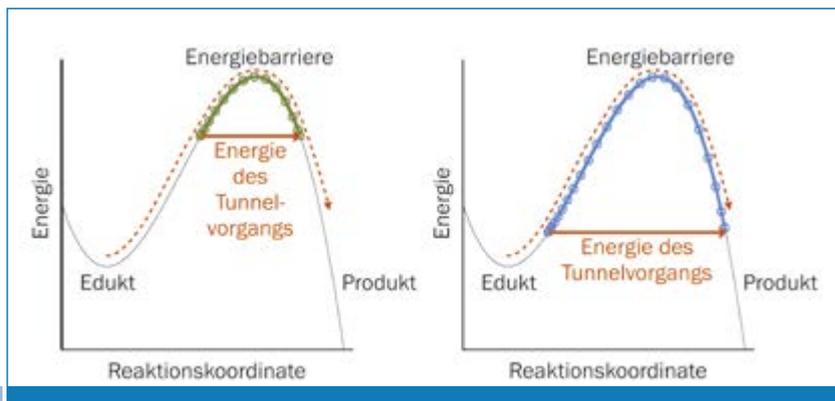
hohe Tunnelwahrscheinlichkeit ergeben soll. Die hier vorgestellte Instantonmethode optimiert die Tunnelrate, wählt also den Pfad – Instanton genannt – der die Tunnelrate maximiert.

2. THEORIE

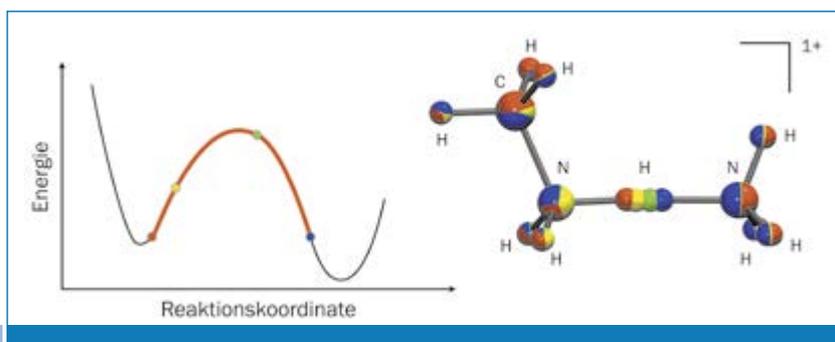
Die Instantontheorie basiert auf der Pfadintegralmethode des Physikers Richard P. Feynman. Diese Methode ermöglicht eine besonders effiziente Formulierung der

Quantenmechanik, um mit Hilfe einer semiklassischen Näherung Geschwindigkeitskonstanten zu berechnen. In der Quantenchemie wird die Pfadintegralmethode häufig zusammen mit der Molekulardynamik verwendet. Die Instantontheorie verwendet jedoch Geometrieoptimierung in Kombination mit Pfadintegralen: Mathematisch lässt sich das Instanton als Sattelpunkt erster Ordnung im Raum der Feynmanpfade beschreiben. Wir konnten zeigen, dass Suchalgorithmen, die in der theoretischen Chemie schon lange zur Lokalisierung von Sattelpunkten genutzt wurden, sich auch hervorragend zur Bestimmung des Instantonpfades eignen [2]. Damit kann mit Hilfe unseres Geometrieoptimierers DL-FIND, der u. a. im Programm ChemShell zum Einsatz kommt, die Berechnung der Geschwindigkeitskonstante unter Berücksichtigung des Tunneleffekts effizient durchgeführt werden. Der Instantonpfad erstreckt sich vom Bereich des Eduktminimums – also der Geometrie der Ausgangsstoffe – über die Energiebarriere zum Produkt (02). Je tiefer die Temperatur, desto länger ist der Instantonpfad, da die Bedeutung des Tunneleffekts für die chemische Reaktion stetig zunimmt. Bei steigender Temperatur wird der Instantonpfad immer kürzer, bis er schließlich bei der Übergangstemperatur T_C auf einen Punkt kollabiert, nämlich den klassischen Übergangszustand, ein Sattelpunkt auf der Potentialenergieoberfläche. Alle Größen, die zur Ermittlung von T_C benötigt werden, sind bei klassischen Berechnungen eines Übergangszustands bekannt. Damit kann T_C verwendet werden, um abzuschätzen, ab welcher Temperatur der Tunneleffekt für eine gegebene Reaktion eine signifikante Rolle spielt.

In der technischen Berechnung der Geschwindigkeitskonstante bestimmt man zuerst die Strukturen und die harmoni-



Instanton in einem eindimensionalen Potential für eine höhere Temperatur (links) und eine niedrigere Temperatur (rechts). Die gestrichelte Linie entspricht dem klassischen thermischen Übergang.



Instantonpfad für die Protonenübertragung von Methylammonium (links) zu Ammoniak (rechts). Links: Energie gegen Reaktionskoordinate (schematisch), das Instanton ist rot dargestellt. Die rechts gezeigten Bilder sind jeweils als Kreise markiert. Rechts: Der Instantonpfad in vier Bilder zerlegt, die überlagert dargestellt sind. Das rote Molekül liegt am Beginn des Pfades (Edukt), das blaue am Ende (Produkt) und das gelbe und grüne dazwischen.

02

03

Quantenchemie / Elektronenstrukturtheorie

In der Quantenchemie, auch Elektronenstrukturtheorie genannt, wird die Schrödinger-Gleichung für die Elektronen eines Moleküls näherungsweise gelöst. Häufig verwendete Verfahren sind die Hartree-Fock-Methode und darauf aufbauende Elektronenkorrelationsmethoden oder Dichtefunktionaltheorie (DFT). Neben Molekülorbitalen und Elektronendichten (s. das Beispiel in (04)), erhält man daraus die Kräfte, die zwischen den Atomen wirken, bzw. die Potentialenergiefläche, auf der sich die Atome bewegen. Elektronen- und Atombewegungen werden häufig entkoppelt betrachtet, man nennt das die Born-Oppenheimer-Näherung. Oft kann die Bewegung der Atome klassisch beschrieben werden. Sollen jedoch rein quantenmechanische Phänomene, wie der Tunneleffekt, simuliert werden, ist auch für die Atombewegung eine quantenmechanische Herangehensweise erforderlich.

schen Schwingungsfrequenzen der Edukte und Produkte, sowie des Übergangszustandes der Reaktion. Damit erhält man auch T_c . Anschließend wählt man einen Startpfad um davon ausgehend den Instantonpfad zu optimieren. Dazu muss man den Instantonpfad in eine diskrete Anzahl von Bildern (Replikas des Moleküls, also Punkte auf der Potentialoberfläche) zerlegen, das ergibt oft zwischen zehn und hundert Stück. Dann wird ein Sattelpunkt des Pfades gesucht (Beispiele in (02) und (03)). Bei der Suche müssen an jedem einzelnen Bild die Energie und die Kraft auf alle Atome berechnet werden, was quantenchemische Berechnungen der Elektronenstruktur erforderlich macht. Wir verwenden dazu meist die sogenannte Dichtefunktionaltheorie. Nachdem der Instantonpfad optimiert wurde, wird die Geschwindigkeitskonstante berechnet. Für jede Temperatur ist eine erneute Optimierung des Instantonpfades erforderlich. Dabei ist es günstig, einen Pfad bei ähnlicher Temperatur als Ausgangspunkt für die Optimierung zu verwenden. Vor allem bei niedriger Temperatur sammeln sich viele Bilder an einem Ende des Pfades. Dieser Bereich des Pfades ist zwar von besonderer Bedeutung, um die Geschwindigkeitskonstante zu berechnen, jedoch führt diese ungleichmäßige Verteilung zu einer ungenauen Beschreibung anderer Teile des Pfades, vor allem dem Bereich in der Nähe des Energiemaximums. Uns ist es gelungen, eine Formulierung mit adaptiver Schrittweite herauszufinden [3], mit der sich eine gleichmäßigere Verteilung der Bilder gewährleisten lässt.

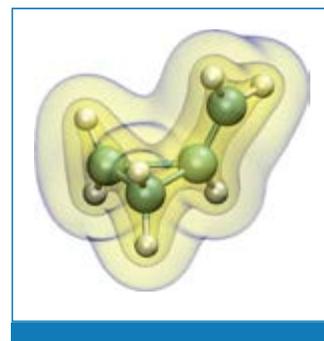
Die Genauigkeit der Instantontheorie kann durch Vergleich zu analytisch löslichen Problemen getestet werden. So stimmt die Transmissionsrate beispielsweise der Eckart-Barriere bei tiefen Temperaturen, im Bereich reiner Tunnelvorgänge ohne Temperatureinfluss, gut mit der exakten

Rate überein [1]. Bei höheren Temperaturen, speziell nahe der Übergangstemperatur überschätzt die Instantontheorie jedoch die Rate aber häufig. Sobald der Instantonpfad zu einem Punkt kollabiert ist, ist die Methode mithin nicht mehr anwendbar. Der Temperaturbereich in dem die Anwendung möglich ist, ist also nach oben systemspezifisch auf den Bereich begrenzt, in dem Tunneln eine signifikante Rolle spielt. Auch können so spezielle Quantenphänomene, wie Kohärenz und Resonanzen durch die Instantontheorie auf Grund des statistisch-probabilistischen Ansatzes nicht beschrieben werden. Der Vergleich mit experimentellen Daten ist schwieriger, da hierbei zum Fehler der Instantontheorie auch unvermeidlich der Fehler des zugrundeliegenden Potentials, im Allgemeinen der zugrundeliegenden Elektronenstrukturtheorie, hinzu kommt.

3. TUNNELREAKTIONEN

3.1 Organische Chemie

Schon seit Jahrzehnten ist die Bedeutung des Tunneleffekts in chemischen Reaktionen bekannt. In vielen Fällen beschleunigt er die Reaktion bei tiefen Temperaturen, ohne die Umsetzung qualitativ zu verändern. Dabei ist dem Tunnelbeitrag experimentell nur schwer beizukommen, lässt er sich doch nur indirekt, beispielsweise über einen hohen kinetischen Isotopeneffekt oder eine temperaturunabhängige Geschwindigkeitskonstante, nachweisen. Allerdings konnten in jüngster Zeit plakatative Beispiele, bei denen der Tunneleffekt Reaktionen qualitativ verändert, aufgezeigt werden. Das wohl eindrucksvollste Beispiel ist der Zerfall von Methylhydroxycarben bei sehr tiefen Temperaturen (11 K), der von Prof. P.R. Schreiner und seiner Gruppe an der Universität Gießen entdeckt und experimentell sowie theoretisch

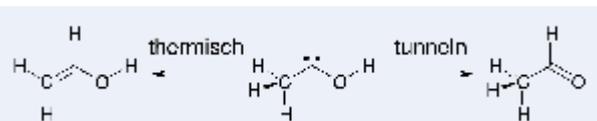


04

Die Atome des Cyclopropylcarbinyl-Radikals als Kugeln und Stäbchen mit der Elektronendichte als semitransparente Konturflächen.

untersucht wurde [4]: Während der thermische Zerfall zu Vinylalkohol führt, da die Barrierenhöhe für diese Reaktion kleiner ist, führt der Tunnelzerfall bei niedrigen Temperaturen zu Acetaldehyd (s. (05)). Die Reaktion zu Acetaldehyd weist zwar eine höhere Barriere auf, wir fanden jedoch heraus, dass der nötige Tunnelpfad um 34 Prozent kürzer ist als der Pfad für den Zerfall zu Vinylalkohol [5]. Hier zeigt sich deutlich, wie die unterschiedliche Abhängigkeit von Barrierenhöhe und Barrierebreite (bzw. Länge des Pfades) zu qualitativen Unterschieden zwischen thermischen und tunneldominierten chemischen Reaktionen führt. In diesem Fall wurden die Geschwindigkeitskonstanten mit der Instantontheorie innerhalb des engen experimentellen Fehlerbalkens erhalten [5]. Auch für andere substituierte Carbene wurde der tunneldominierter Zerfall experimentell gefunden oder theoretisch vorhergesagt, andere hingegen erwiesen

sich als metastabil, da der zu lange Tunnelpfad die Zerfallswahrscheinlichkeit stark verringert.

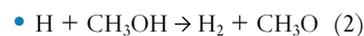
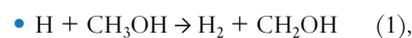


Methylhydroxycarben (Mitte) wird thermisch in Vinylalkohol umgewandelt (links), durch Tunneln in Acetaldehyd (rechts).

3.2 Astrochemie

Auch in astrochemischen Fragestellungen spielt der Tunneleffekt häufig eine Rolle, so etwa im interstellaren Raum, in den photonendominierten Regionen zwischen den Sternen und den molekularen Wolken werden chemische Reaktionen beobachtet, obwohl die Temperatur teilweise sehr niedrig ist. Auf Grund der Zeitskalen, die für solche Bereiche relevant sind, kann häufig nur indirekt auf die ablaufenden Reaktionen geschlossen werden. Beispielsweise wurde festgestellt, dass viele Moleküle im interstellaren Medium stark deuteriert sind, dass also überproportional viele Wasserstoffatome durch Deuterium ersetzt sind. Beispielsweise gab es spektroskopische Nachweise von Methanol in der Nähe des sonnenähnlichen Protosterns IRAS 16293-2422 im Sternbild Schlangenträger, bei dem CH_2DOH fast so häufig auftrat wie CH_3OH . Aber auch zweifach (CHD_2OH , 6%) und dreifach deuteriertes Methanol (CD_3OH , 1,4%) wurden in stark erhöhten Konzentrationen gemessen. Das atomare Verhältnis von Deuterium (D) zu leichtem Wasserstoff (D/H-Verhältnis) beträgt

im gesamten Kosmos etwa $1,5 \times 10^{-5}$. Um diese starken Deuterierungsgrade zu erklären, wurde postuliert, dass das D/H-Verhältnis in der Umgebung von IRAS 16293-2422 um Größenordnungen höher, bei etwa 0,1 bis 0,3 liegen müsste. Abgesehen von dieser eher gewagten Annahme erklärt dies nicht, warum Methanol offenbar nur am Kohlenstoffatom, nicht aber am Sauerstoffatom deuteriert wird. Auch das gelegentlich vorgebrachte Argument der geringeren Nullpunktsenergie des deuterierten Moleküls kann diesen Unterschied nicht begründen. Hinweise wurden gefunden, dass ein H/D-Austausch in gefrorenem Methanol stattfinden könnte. Wir untersuchten die Geschwindigkeitskonstante unter Berücksichtigung des Tunneleffekts für die Reaktionen



sowohl mit leichtem Wasserstoff als auch mit Deuterium [1]. Dabei stellten wir fest, dass Reaktion (1) über den gesamten im interstellaren Raum relevanten Temperaturbereich viel schneller abläuft als Reaktion (2). Ein H/D-Austausch in der Gasphase passiert also am Kohlenstoff des Methanolmoleküls. Der Tunneleffekt führt in Reaktion (1) zu einem extrem starken kinetischen Isotopeneffekt: H wird bei einer Temperatur von 30 K etwa 3000-mal schneller abgespalten als D [1]. Das führt im stationären Grenzfall zu einer deutlichen Anreicherung von Deuterium am Kohlenstoffatom von Methanol, auch bei einem realistischen D/H-Verhältnis. Zwar enthält dieses Gasphasenmodell einige grobe Näherungen – ein komplettes astrochemisches Modell, das alle Gas- und Oberflächenreaktionen enthält, würde sicherlich mehr Vorhersagekraft bieten – aber es erlaubt dennoch die wesentlichen Messergebnisse mit Hilfe einfacher Annahmen und unter Berücksichtigung des Tunneleffekts zu erklären.

Die Massenabhängigkeit des Tunneleffekts bedingt, wie erwähnt, dass dieser hauptsächlich für Reaktionen von Bedeutung ist, die durch Wasserstoff dominiert sind. Indes können auch schwerere Atome tunneln – wie bereits beschrieben. Wir untersuchten u. a. kinetische Isotopeneffekte bei der Ringöffnung des Cyclopropylcarbinylradikals [6]. Auch dort beteiligen sich die Kohlenstoffatome signifikant an der Tunnelbewegung.

3.3 Biochemie

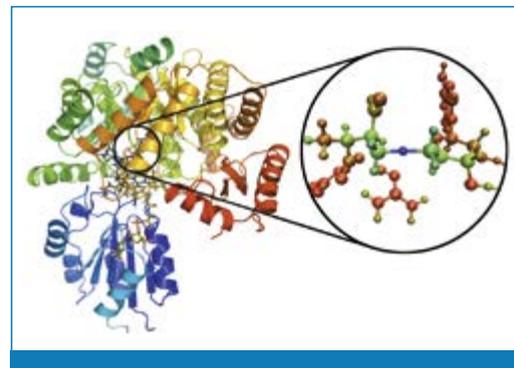
Die bisher aufgeführten Beispiele bezogen sich hauptsächlich auf niedrige Temperaturen. Allerdings spielen Wasserstoffübertragungsreaktionen in vielen Bereichen der Chemie, vor allem in der Biochemie, eine große Rolle. Wie bereits erwähnt, ist es experimentell schwierig, den Tunneleffekt direkt nachzuweisen. In vielen enzymatischen Umsetzungen verläuft jedoch die Reaktion mit leichtem Wasserstoff mehr als fünf- (und bis zu 80-) mal so schnell wie mit Deuterium – was allgemein als signifikanter Tunnelbeitrag gedeutet wird.

Klare Nachweise des Tunneleffekts und vor allem seine Quantifizierung in Bezug auf die katalytische Wirkung können aber nur durch Simulationen erfolgen, in denen der Tunneleffekt „einfach“ an- und abgeschaltet werden kann. Aus der Vielzahl der inzwischen durchgeführten Rechnungen soll hier nur eine kleine Auswahl herausgegriffen werden. Mittlerweile kann kein Zweifel daran bestehen, dass viele biochemische Reaktionen durch den Tunneleffekt erleichtert und beschleunigt werden. Quantitativ beträgt diese Beschleunigung aber oft nur ein bis zwei Größenordnungen. Da die gesamte katalytische Wirkung vieler Enzyme die Reaktionen um bis zwölf Größenordnungen beschleunigt, ist der Tunneleffekt hier in der Relation zwar nicht zu vernachlässigen, aber keinesfalls dominierend. Es wurde postuliert, dass die Evolution manche Enzyme sogar darauf hin optimiert habe, den Tunneleffekt auszunutzen.

Wir untersuchten den Mechanismus und den Tunnelbeitrag im Enzym Glutamatmutase [7,8]. Dieses bakterielle Radikalenzym wandelt mit Hilfe des Cofaktors Adenosylcobalamin Glutamat in Methylaspartat um. Wir verwendeten QM/MM (Quantenmechanik/Molekularmechanik) um die chemisch aktiven Bereiche mit quantenmechanischen Methoden, die Enzymumgebung wiederum mit klassischen Kraftfeldern zu beschreiben. Obwohl die Tunnelbewegung in diesem Enzym, wie in den meisten Systemen, durch die Bewegung eines Wasserstoffatoms dominiert wird (sobald mehrere oder schwerere Atome involviert sind, wird der Tunnelpfad im Allgemeinen zu lang) haben die Beiträge der Umgebungsatome einen Einfluss auf die Geschwindigkeitskonstante. Wir

haben dazu systematisch untersucht, für wie viele Atome die Bewegung quantenmechanisch beschrieben werden muss und stellten fest, dass nicht weniger als 78 Atome nötig waren, um konvergierte Geschwindigkeitskonstanten zu erhalten [8]. Die Beiträge der einzelnen Atome sind in (06) dargestellt.

Bei der Berechnung der Tunnelrate steigt der Rechenaufwand vieler Methoden mit der Anzahl der Freiheitsgrade deutlich an. Auch in der Instantonmethode wird das Optimierungsproblem in diesem Fall größer und es müssen größere Hesse-Matrizen berechnet werden. Der Aufwand bleibt jedoch auch bei einigen Dutzend quantisierten Atomen beherrschbar. In Glutamatmutase stellte sich heraus, dass selbst bei 0°C der Tunneleffekt die Reaktion nur um einen Faktor 12 beschleunigt. Ähnliche Untersuchungen laufen derzeit für die Enzyme Peptidylglycin- α -hydroxylierende Monoxygenase (PHM) und Monoaminoxidase (MAO). In diesen erscheint der Tunneleffekt noch weniger wichtig als in Glutamatmutase. Insgesamt kann also festgehalten werden, dass das Tunneln von Atomen wohl in vielen biochemischen Systemen vorkommt, jedoch wohl kaum eine dominierende Rolle für den Reaktionsmechanismus oder die Reaktionsgeschwindigkeit einnimmt. • Johannes Küstner



06

Das Enzym Glutamatmutase. Der vergrößerte Ausschnitt zeigt die Atome des aktiven Zentrums, farbcodiert nach ihrem Tunnelbeitrag von blau (stark) bis rot (schwach).

Interdisziplinarität

Der Tunneleffekt ist ein rein physikalisches Phänomen, das schon seit fast hundert Jahren bekannt ist. Jedoch werden Chemiker gebraucht, um seine Auswirkungen auf chemische Reaktionen zu untersuchen, Mathematiker um die Instantontheorie rigoros zu formulieren und Optimierungsalgorithmen zu entwickeln, Informatiker um diese effizient zu implementieren und schließlich Biochemiker, um die Bedeutung des Tunneleffekts in enzymatischen Reaktionen zu berechnen. Das erklärt, warum der Exzellenzcluster SimTech so ideale Voraussetzungen für dieses Projekt bietet.

ZUSAMMENFASSUNG

Der Tunneleffekt, das quantenmechanische Durchdringen von Reaktionsbarrieren als Alternative zum klassischen thermisch-aktivierten Überschreiten von Reaktionsbarrieren, spielt in vielen Bereichen der Chemie eine wichtige, noch genauer zu erforschende Rolle. Obwohl er besonders bei Wasserstoffübertragungsreaktionen und bei niedriger Temperatur von Bedeutung ist, sind auch Fälle über Raumtemperatur und mit Beteiligung schwerer Atome bekannt. Die Berechnung der Tunnelwahrscheinlichkeit oder -rate erfordert mehr Aufwand als die Bestimmung einer klassischen Rate. Die Instantonmethode ist eine genaue und effiziente Methode, Geschwindigkeitskonstanten unter Berücksichtigung des Tunneleffekts auch in Systemen mit mehreren Dutzend quantisierten Atombewegungen zu berechnen. Durch ihre Implementierung im flexiblen Quantenchemieprogramm ChemShell ist sie der wissenschaftlichen Allgemeinheit zugänglich. Für die Zukunft ist die Entdeckung von weiteren Reaktionen, die durch den Tunneleffekt verändert oder erst ermöglicht werden, zu erwarten.

DER AUTOR


**JUN.-PROF.
DR. JOHANNES KÄSTNER**

studierte technische Chemie an der TU Wien, Österreich und promovierte 2003 in theoretischer Physik an der TU Clausthal. Nach einem Postdoc-Aufenthalt am Max-Planck-Institut für Kohlenforschung in Mülheim an der Ruhr war er wissenschaftlicher Angestellter am Daresbury Laboratory in Daresbury, Großbritannien. Seit 2008 ist er Juniorprofessor am Institut für theoretische Chemie der Universität Stuttgart. Seine Forschungsschwerpunkte decken verschiedene Bereiche der theoretischen Chemie ab, von der Berechnung der freien Energie mit Molekulardynamiksimulationen über enzymatische Reaktionsmechanismen bis zur Untersuchung des Tunnel-effekts.

Kontakt

Universität Stuttgart, Institut für theoretische Chemie
Pfaffenwaldring 55, D-70569 Stuttgart
Tel. +49 (0) 711/685-64473, Fax +49 (0) 711/685-64442
E-Mail: kaestner@theochem.uni-stuttgart.de
Internet: www.theochem.uni-stuttgart.de/kaestner

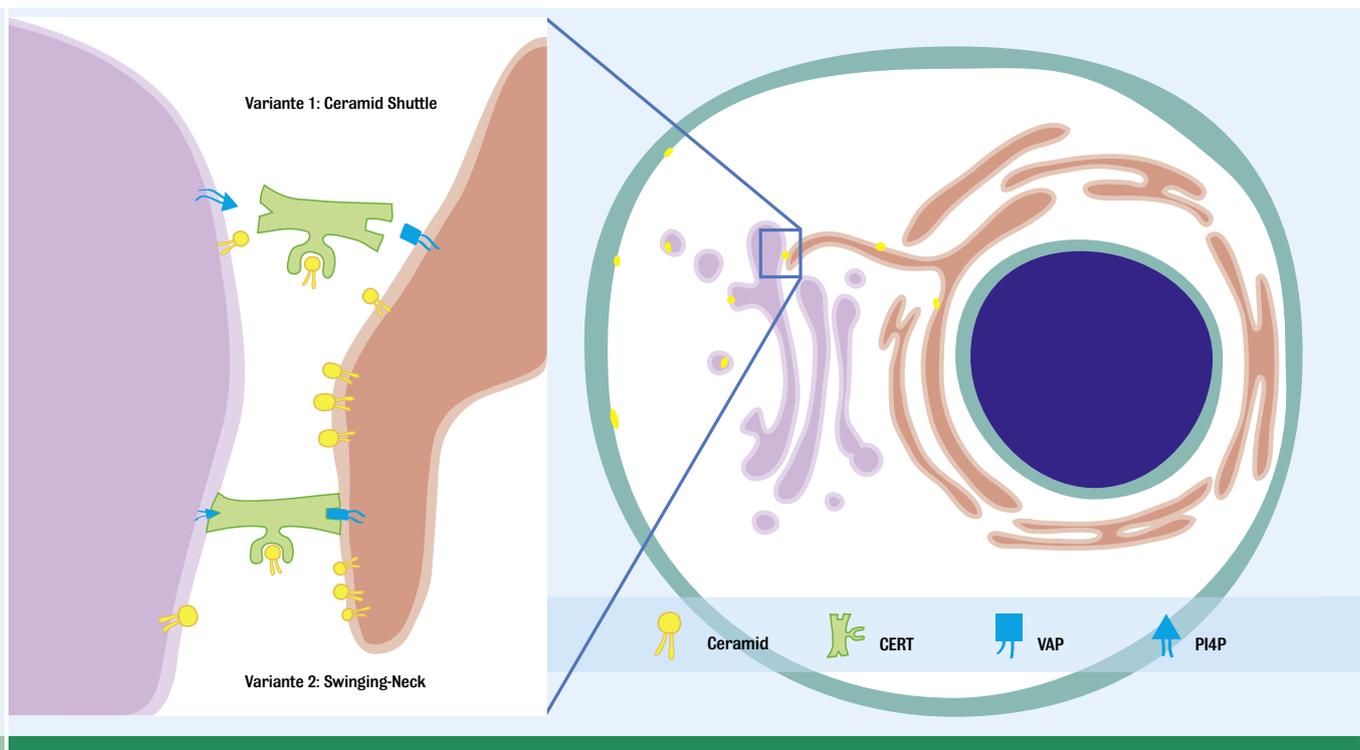
DANKSAGUNG

Diese Studien wurden durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft über den Exzellenzcluster Simulation Technology (EXC 310/1) und durch die Baden-Württemberg Stiftung finanziell unterstützt.

LITERATUR

- 1 Goumans, T. P. M.; Kästner, J. J. *Phys. Chem. A* 2011, 115, 10767.
- 2 Rommel, J. B.; Goumans, T. P. M.; Kästner, J. *J. Chem. Theory Comput.* 2011, 7, 690.
- 3 Rommel, J. B.; Kästner, J. J. *Chem. Phys.* 2011, 134, 184107.
- 4 Schreiner, P. R.; Reisenauer, H. P.; Ley, D.; Gerbig, D.; Wu, C.-H.; Allen, W. D. *Science* 2011, 332, 1300.
- 5 Kästner, J. *Chem. Eur. J.* 2013, 19, 8207.
- 6 Meisner, J.; Rommel, J. B.; Kästner, J. J. *Comput. Chem.* 2011, 32, 3456.
- 7 Rommel, J. B.; Kästner, J. J. *Am. Chem. Soc.* 2011, 133, 10195.
- 8 Rommel, J.; Liu, Y.; Werner, H.-J.; Kästner, J. *J. Phys. Chem. B* 2012, 116, 13682.

Mit Simulationstechnik zu neuen Erkenntnissen in der Systembiologie



Lipidtransport

Mechanismen des Lipidtransportes durch CERT an Membrankontaktstellen zwischen ER und TGN

Die Systembiologie ist ein aufstrebendes, vergleichsweise junges Forschungsgebiet, deren Ziel ein besseres ganzheitliches Verständnis der Mechanismen biologischer Systeme ist. Biologische Systeme (z.B. Populationen, der Organismen, ein Organ oder auch einzelne Zellen und ihre intrinsischen Signalwege) werden als komplexe dynamische Interaktionsnetzwerke aufgefasst, deren charakteristisches Verhalten eine Folge ihrer Struktur sowie der Dynamik innerhalb des Netzwerkes ist. Um biologische Systeme zu verstehen, ist es daher wichtig, dass die Untersuchung einzelner Bestandteile des Systems im Kontext des gesamten Systems durchgeführt wird. Für ein holistisches Verständnis eines gewählten biologischen Systems lassen sich systemtheoretische und mathematische Modellierungs- und Analysemethoden sowie experimentelle Techniken kombinieren.

1. Einleitung

Die Etablierung der Systembiologie als eigenständiges Forschungsgebiet ist eine logische Konsequenz der enormen Entwicklungen in mehreren Disziplinen in den letzten Jahren. Dies sind zum einen faszinierende neue experimentelle Techniken in der Zell- und Molekularbiologie, insbesondere auf der Genom-, Transkriptom- und Proteomebene sowie im Bereich des sogenannten Imaging, welches es erlaubt, Prozesse und Wechselwirkungen auf molekularer Ebene sichtbar zu machen. Zum anderen führen leistungsfähigere Computersysteme zu großen Fortschritten in der Simulationstechnik und der Entwicklung computerbasierter Analysewerkzeuge für experimentelle Daten und Modelle. Die sich daraus ergebenden Möglichkeiten sind ebenso vielfältig wie die damit verbundenen Herausforderungen. Beispielsweise reichen herkömmliche Methoden zur Datenauswertung schon lange nicht mehr aus, um die rasant wachsende Menge an experimentellen Informationen so zu verarbeiten, dass sie interpretiert und geeignet visualisiert werden können.

Hier sind neue mathematische Methoden gefragt, welche die in den Datensätzen verborgenen Hinweise auf die Strukturen sowie Dynamik innerhalb des untersuchten Systems entschlüsseln helfen.

Das so gewonnene Wissen über Systemstruktur und -dynamik ermöglicht nun die Entwicklung von mathematischen Modellen zu den jeweiligen biologischen Systemen. Diese Modelle können mit Methoden der mathematischen Systemtheorie untersucht werden, um charakteristische Eigenschaften des Systems zu analysieren. Zusätzlich liefern sie Vorhersagen über das Systemverhalten und tragen somit genauso zum Verständnis der biologischen Systeme bei wie Experimente am System selbst.

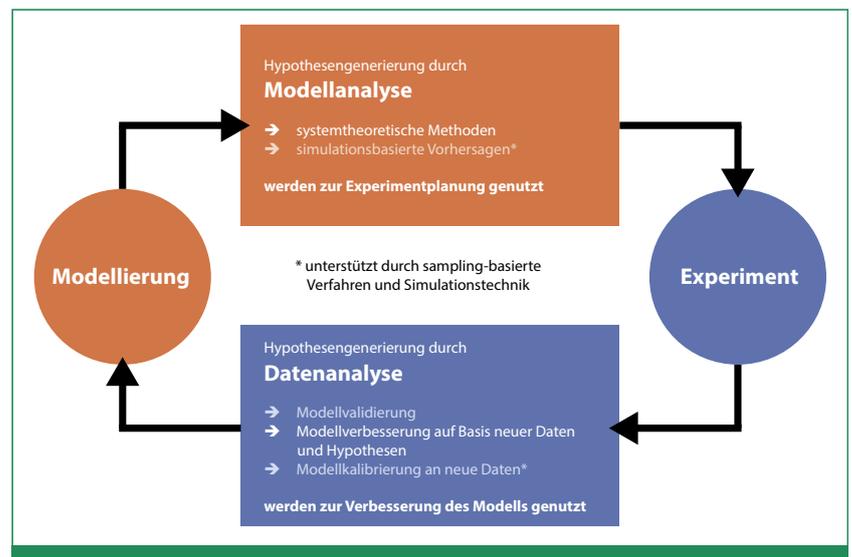
Diese modellbasierten Simulationen des Systemverhaltens am Computer, sogenannte *in silico* Experimente, haben gegenüber den entsprechenden *in vivo* bzw. *in vitro* Experimenten im Labor viele Vorteile. Sie sind beispielsweise oft günstiger und schneller als Experimente im Labor, Simulationsszenarien können präzise formuliert und damit nachvollziehbar gemacht werden, und es können ethisch bedenkliche Eingriffe an lebenden Pflanzen oder Tieren ersetzt werden.

SUMMARY

Systems biology is a relatively young research field, which was developed in the 20th century. It combines biology, systems theory and simulation technology. Facilitated by enormous developments in experimental techniques as well as by rapidly increasing computing power, we are now able to reach a holistic understanding of biological systems.

The simulation of quantitative models of those systems provide interesting new hypotheses, and mathematical analyses help to address recent questions in all biological research areas – ranging for example from the development of new drugs to process optimization in biotechnology.

This article focuses on the role of simulation especially for statistical sampling-based approaches for model calibration and the generation of hypotheses. Simulation technology plays a central role here between data acquisition and model analysis. We will exemplify the power of these sampling-based approaches with a cooperation project between the Institute of Systems Theory and Automatic Control (IST) and the Institute of Cell Biology and Immunology (IZI), in which we investigate key regulation processes of protein secretion in mammalian cells.



Doch wie genau gelangen Systembiologen nun zu ihren Ergebnissen? Der Weg von der Idee zur Erkenntnis lässt sich in diesem Bereich gut mit dem „systembiologischen Zirkel“, wie in (01) dargestellt, erklären: Ausgehend von einer biologischen Fragestellung oder Hypothese wird, meist basierend auf aktueller Literatur und existierenden Daten, ein erstes Modell erstellt. Systemtheoretische Modellanalysen und simulationsbasierte Vorhersagen generieren daraufhin Hypothesen, welche in weiteren Experimenten getestet werden können. Die Interpretation der neu erhobenen Daten führt wiederum zu Hypothesen, die zur strukturellen Verbesserung und Erweiterung des Modells genutzt werden. Die erhobenen Datensätze werden zudem

Der systembiologische Zirkel
Der Modellierer, typischerweise ein Mathematiker, Physiker oder Ingenieur, steht in ständigem Austausch mit dem experimentellen Biologen. Der Biologe formuliert eine Fragestellung, welche dann in die Modellsprache übersetzt werden muss. Daraufhin überlegen sich beide eine Modellvorhersage, die zunächst simuliert wird. Nun muss diese Vorhersage mit Daten aus einem geeigneten neuen Experiment untermauert oder widerlegt werden. Im ersten Fall führt dies zu einer Modellverfeinerung, im zweiten Fall zu einer Modelländerung oder Erweiterung, und das Spiel beginnt erneut.

zur Kalibrierung des erweiterten Modells verwendet. Modellbildung und Simulation spielen hierbei an mehreren Stellen eine entscheidende Rolle. Wie genau simulationsbasierte Vorhersagen, die Kalibrierung und Validierung der hierfür nötigen Modelle funktioniert, soll im Folgenden näher beleuchtet werden.

2. Der Weg von der Modellierung bis zur Vorhersage

2.1 Datengetriebene Modellierung

In unseren systembiologischen Projekten verwenden wir häufig *datengetriebene Modellierung*. Hierbei werden bei der Erstellung des Modells neben bereits vorhandenem Vorwissen über das System auch die experimentellen Rahmenbedingungen miteinbezogen. Die daraus entstehenden Modelle sind spezifisch für die mit den vorhandenen Daten zu beantwortende Fragestellung optimiert und erfordern von der ersten Modellvariante bis zum finalen Modell eine enge Zusammenarbeit von Modellierer und Experimentator.

Bei einem datengetriebenen Modellierungsansatz wählt man die Anzahl der zu schätzenden Parameter in dem Modell so klein wie möglich, während die Modellstruktur so komplex wie nötig gehalten wird. Diese Vorgabe führt dazu, dass Modelle aus einem datengetriebenen Modellierungsansatz speziell bei der Modellkalibrierung sowie bei der Erstellung von Hypothesen aus Modellsimulationen ihre Stärken haben. Bei zu einfachen Modellen können die in den Daten enthaltenen Informationen indes nicht optimal ausgenutzt werden. Außerdem werden vielleicht nicht alle Eigenschaften des biologischen Systems abgebildet. Für ein sehr komplexes Modell dagegen, das grundsätzlich viele verschiedene Verhaltensweisen zeigen kann, ist es oft schwierig die Modellparameter zu bestimmen. Zum einen wird das Lösen des Schätzproblems mit wachsender Anzahl von Parametern selbst schon schwieriger, zum anderen besteht die Gefahr des *Overfitting*. Das heißt, dass man bei der Kalibrierung das Modell nicht nur an die relevanten Informationen über das System, sondern auch an die zufälligen Rauscheigenschaften des vorliegenden Datensatzes anpasst. Diese Gefahr besteht besonders bei Datensätzen mit großen Unsicherheiten – 20 Prozent Messfehler sind keine Seltenheit in der Biologie – und we-

nigen Wiederholungsmessungen. Das Modell kann in Gefahr laufen Ausreißer in den Daten als Systemverhalten zu interpretieren. Als Folge erhält man ein Modell mit kleinem Trainingsfehler, da die Anpassung an die zur Schätzung verwendeten Daten sehr gut ist. Allerdings wird das Modell nicht sehr gut generalisieren und große Fehler bei der Vorhersage neuer Szenarien machen. Durch die Abstimmung der Modellstruktur an die experimentellen Rahmenbedingungen wird also eine maximale Übertragung der in den Datensätzen enthaltenen Informationen auf das Modell ermöglicht. Damit können die zur Kalibrierung verwendeten Daten ausreichend gut beschrieben werden, und das Modell liefert gleichzeitig gute Vorhersagen.

2.2 Punktschätzer und sampling-basierte Parameterschätzmethoden

Hat man sich für ein Modell entschieden und die entsprechenden Gleichungen aufgestellt, so ist der nächste Schritt die *Modellkalibrierung*, also das Anpassen des Modells an die tatsächlichen experimentellen Daten. Bei parametrisierten Modellen heißt das, Werte für alle Modellparameter so zu finden, dass die Modellsimulationen mit den gemessenen Daten möglichst gut übereinstimmen. Ein üblicher Ansatz besteht darin, die Parameterschätzung als Optimierungsproblem zu formulieren. Ein kleiner Abstand zwischen Simulation und Daten wäre hier etwa ein Optimierungsziel, und wir benötigen ein geeignetes Maß für diesen Abstand, unsere *Zielfunktion*.

Oft werden beispielsweise *Kleinste-Quadrate-Schätzer*, welche die Summe der quadratischen Fehler zwischen Modellsimulation und Messdaten minimieren, oder *Maximum-Likelihood-Schätzer* verwendet. Letztere gehen davon aus, dass die Messdaten aus einem stochastischen Prozess erzeugt wurden. Mögliche Messausgänge werden somit als Zufallsvariablen interpretiert, und die vorliegenden Messdaten stellen eine Stichprobe aus deren Wahrscheinlichkeitsverteilung dar. Die zu optimierende Zielfunktion ist hier die *Likelihood-Funktion*, die für jeden Parametersatz die Wahrscheinlichkeit wiedergibt, die vorliegenden Daten zu beobachten. Der Maximum Likelihood Schätzer liefert somit Parameter, welche diese Wahrscheinlichkeit maximieren.

Solche Schätzer werden auch als *Punktschätzer* bezeichnet, da sie für jeden Parameter einen einzigen optimalen Punkt bezogen auf das Abstandsmaß liefern. Für den Fall, dass man ausreichend große Datensätze zur eindeutigen Identifizierung der Parameter sowie ein Modell vorliegen hat, welches die Daten gut erklären kann, sind diese Punktschätzer geeignet und können auch für weitere Analysen verwendet werden. Dies ist in der Systembiologie besonders für das Kalibrieren quantitativer Modelle allerdings selten der Fall. Oft sind Messungen auf molekularer Ebene schwierig, teuer und aufwendig, so dass die Datensätze klein im Vergleich zur Modellkomplexität sind und nicht genügend Informationen enthalten, um alle Parameterwerte eindeutig zu bestimmen. Man kann zum Beispiel nicht alle wichtigen Moleküle eines Signalwegs messen, so dass man nicht beobachtbare Variablen im Modell hat, oder es stehen für Zeitreihen nur wenige Messzeitpunkte zur Verfügung. Die Daten werden in diesem Fall auch als *sparse* bezeichnet, und es sind nicht alle Parameter identifizierbar. Das Optimierungsproblem ist in diesem Fall *schlecht-gestellt*, da es keine eindeutige Lösung hat. Es ist allgemein nicht immer offensichtlich, ob man es mit einem schlecht-gestellten Problem zu tun hat. In der Praxis deuten unterschiedliche Ergebnisse bei einer Optimierung mit unterschiedlichen Startparametern, die aber ähnliche Zielfunktionswerte liefern, auf ein solches schlecht-gestelltes Problem hin. In diesem Fall kann man ad hoc nicht entscheiden, welcher dieser Parametersätze nun der Beste ist.

Für schlecht-gestellte Probleme reichen Punktschätzer zur weiteren Analyse also nicht aus. Es gibt sehr unterschiedliche Ansätze, um mit diesem Problem umzugehen. Die Theorie schlecht-gestellter inverser Probleme stellt zum Beispiel *Regularisierungsverfahren* bereit, bei denen die Zielfunktion für die Optimierung neben einem Term zur Anpassung an die Messdaten auch einen datenunabhängigen *Regularisierungsterm* enthält, welcher zu komplexe Modelle bestraft. Hierdurch soll zum einen Overfitting vermieden werden, und zum anderen soll das Optimierungsproblem in ein gut-gestelltes Problem mit eindeutiger Lösung umgewandelt werden.

Aus der Statistik haben sich sogenannte *Bayes'sche Lernverfahren* entwickelt, die eine statistisch konsistente Beschreibung der in

den Daten enthaltenen Informationen über alle Modellparameter in Form von Wahrscheinlichkeitsverteilungen liefern. Bei solchen Ansätzen werden also sowohl die Daten als auch die Parameter als Zufallsvariablen mit zugrunde liegenden Wahrscheinlichkeitsverteilungen interpretiert. Neben der Likelihood-Funktion zur Beschreibung der Datengenerierung repräsentiert eine *a-priori-Wahrscheinlichkeitsverteilung* den aktuellen Wissensstand über die noch nicht angepassten Parameter. Die Leistungssteigerung von Bayes'schen Verfahren im Vergleich zu Punktschätzern wurde am IST an konkreten Anwendungsbeispielen demonstriert.

Man interessiert sich nun bei der Bayes'schen Parameterschätzung für die *a-posteriori-Verteilung*, eine Wahrscheinlichkeitsverteilung über den Parametern, die den aktuellen Wissensstand nach Einbezug der vorliegenden Messdaten wiedergibt. Diese ist nach dem Satz von Bayes proportional zum Produkt aus a-priori-Verteilung und Likelihood-Funktion. Für detailliertere Informationen über Bayes'sche Lernverfahren und den Satz von Bayes sei hier auf **(b01)** verwiesen. Die a-priori Verteilung in Bayes'schen Lernverfahren kann in bestimmten Fällen auch die Rolle des Regularisierungsterms einnehmen, was man als *Bayes'sche Regularisierung* bezeichnet. In diesem Fall haben wir es mit einem gut-gestellten Problem zu tun, und es reichen Punktschätzer wie beispielweise der *Maximum-a-posteriori Schätzer*, welcher die a-posteriori Wahrscheinlichkeit maximiert, für weitere Analysen aus.

Da dies für unsere Modelle im allgemeinen nicht der Fall ist, werden globale Informationen über die a-posteriori Verteilung benötigt. Diese Verteilung ist meist nicht analytisch zugänglich und wird üblicherweise durch *sampling-basierte Ansätze* genähert. Hierbei werden repräsentative Stichproben aus der a-posteriori Verteilung erzeugt (*Sampling*), mit deren Hilfe man Informationen über die Verteilung selbst ableiten kann. Sampling-basierte Verfahren sind sehr mächtig, da sie Informationen über Modellparameter inklusive Unsicherheiten enthalten, die auch zur Schätzung von Modellvorhersagen mit Unsicherheiten verwendet werden können.

Die Erzeugung solcher Stichproben ist je nach Modell und Datenlage allerdings nicht immer einfach. In unseren Anwen-

DER SATZ VON BAYES

Der Satz von Bayes geht auf den Mathematiker Thomas Bayes (1701 - 1761) zurück. Er ermöglicht es, bedingte Wahrscheinlichkeiten umzukehren. Für eine Beobachtung A gibt es eine mögliche Erklärung B , und die Wahrscheinlichkeit, dass A und B gemeinsam eintreten, ist gegeben durch:

$$P(A, B) := P(A|B)P(B) = P(B|A)P(A),$$

Die bedingte Wahrscheinlichkeit, dass B die Beobachtung A verursacht hat, ergibt sich nach Umstellen zu:

$$P(B|A) = \frac{P(A|B)P(B)}{P(A)}.$$

Dabei ist $P(B)$ die von A unabhängige Wahrscheinlichkeit, dass B zutrifft. Sie wird auch als Vorwissen bzw. *a-priori Wahrscheinlichkeit* bezeichnet. $P(A)$ bezeichnet die Wahrscheinlichkeit für Beobachtung A , und $P(A|B)$ ist ein Maß dafür, wie wahrscheinlich es ist A bei gegebenem B zu beobachten.

Dieser Satz gilt auch für Wahrscheinlichkeitsdichten für reelle Zufallsvariablen, z.B. von Beobachtungen wie Proteinkonzentrationen (Daten D) und Modellparametern θ . In einem Bayes'schen Ansatz zur Parameterschätzung wird die *a-posteriori Verteilung* $p(\theta|D)$ untersucht. Diese beschreibt die Wahrscheinlichkeit für Parameterwerte θ bei gegebenen Daten D , und ist nach dem Satz von Bayes gegeben durch:

$$p(\theta|D) = \frac{p(D|\theta)p(\theta)}{p(D)},$$

wobei $P(D|\theta)$ die *Likelihood Funktion* bezeichnet.

DER SATZ VON BAYES - EIN BEISPIEL

Für ein Würfelexperiment darf Spieler A zwischen drei Würfeln mit 6, 12 oder 20 Seiten wählen, und er kann sich entscheiden ein oder zweimal zu würfeln. Spieler B soll anhand der gewürfelten Summe entscheiden, welche Variante Spieler A wohl gewählt hat. Spieler A teilt ihm die Zahl 12 mit. Es gibt sechs mögliche Erklärungen $B = [n; s]$ (n Würfe à s Seiten) für den Wurf mit den folgenden Wahrscheinlichkeiten:

	$P(A = 12 B = [n, s])$	
	1 Wurf	2 Würfel
6 Seiten	0	1/36
12 Seiten	1/12	11/144
20 Seiten	1/20	11/400

Die gesuchte Umkehr erhält man mit der Annahme, dass a priori alle Varianten gleich wahrscheinlich sind ($P(B_i) = 1/6$), und $P(A = 12) = 0.044$ durch den Satz von Bayes:

	$P(B = [n, s] A = 12)$	
	1 Würfel	2 Würfel
6 Seiten	0	0.105
12 Seiten	0.314	0.288
20 Seiten	0.189	0.104

Nach dem Satz von Bayes bekommt somit die einfachste Erklärungs-Variante (ein 12-Seitiger Würfel) die höchste Wahrscheinlichkeit $P(12|[1, 12]) = 0.314$ zugeordnet. Einfach bedeutet in dem Fall: die Variante mit den wenigsten kombinatorischen Möglichkeiten, jedoch nicht so einfach, dass sie die Beobachtung gar nicht erklärt [1, 6] oder sehr unwahrscheinlich ist [2, 6]. Nach dem Satz von Bayes sollte sich Spieler B also für diese Variante entscheiden.

dungen kommen hierfür *Markov Chain Monte Carlo (MCMC)* Verfahren zum Einsatz, die in (b02) näher erläutert werden. Diese Sampling Verfahren sind im allgemeinen sehr rechenintensiv, da sie viele Auswertungen der Zielverteilung erfordern. Bei Systemen von nichtlinearen Differenzialgleichungen, wie wir sie verwenden, muss hierfür zur Auswertung der Likelihood-Funktion das Modell viele Male numerisch integriert werden. Dies macht die Rechenzeit zum limitierenden Faktor, so dass eine Anwendung dieser Methoden in der Praxis auf Modelle mittlerer Größe beschränkt ist. Um dies zu verbessern hat das IST in den letzten Jahren sehr effektive sampling-basierte Methoden zur Parameterschätzung und Experimentplanung speziell für Differentialgleichungsmodelle entwickelt. Hierbei spielt die Simulationstechnik eine zentrale Rolle, da effiziente numerische Simulationsverfahren der Schlüssel zur Laufzeitoptimierung sind.

2.3 Die Vorhersage – Mehr als nur der Kaffeesatz

In den meisten Fällen interessiert man sich nicht so sehr für die Parameterwerte direkt, sondern vielmehr für Vorhersagen, welche mit dem kalibrierten Modell getroffen werden können. So könnte man beispielsweise ein neues, experimentell noch nicht getestetes Szenario simulieren und damit eine Modellvorhersage für dieses Szenario erhalten. Verwendet man für solche Vorhersagen Parameterwerte, die aus Punktschätzern erhalten wurden, so bekommt man eine einzelne Lösung. In einem Bayes'schen Kontext sind zusätzlich darüber hinausgehende Informationen über Unsicherheiten in Form von Wahrscheinlichkeitsverteilungen enthalten, so dass sich aus der a-posteriori-Verteilung im Parameterraum prinzipiell eine entsprechende Verteilung für die Vorhersage ableiten lässt. Für ein Differenzialglei-

chungsmodell wäre das beispielsweise eine sich zeitlich ändernde Wahrscheinlichkeitsdichte im Zustandsraum. Diese beinhaltet natürlich erheblich mehr Information als eine einzelne Modellvorhersage. So würde man zum Beispiel einer großen Abweichung zwischen Modellvorhersage und Messung an einem Zeitpunkt weniger Bedeutung beimessen, wenn die Modellvorhersage für diesen Punkt eine große Varianz aufweist.

In der Praxis wird eine solche Verteilung der Vorhersage meist ebenfalls durch eine empirische Schätzung mit Hilfe der a-posteriori Stichprobe genähert. Auch hierzu ist die Simulation des Modells mit den Parameterwerten aus der Stichprobe nötig. Eine solche sampling-basierte Generierung von Vorhersagen mit anschließender Dichteschätzung ist daher ebenfalls sehr rechenintensiv. Methoden der Simulationstechnik sind hier also sehr gefragt, steigern sie doch die Effizienz der Berechnungen.

Soviel zur Theorie – ganz konkret im Einsatz helfen solch sampling-basierten Ansätze in der systembiologischen Forschungspraxis z. B. bei der Untersuchung molekularer Regulationsmechanismen. Dies wollen wir in den nächsten Abschnitten mit einem Kooperationsprojekt des IST und des IZI an der Universität Stuttgart erläutern. Dazu beginnen wir vorerst mit einem kleinen Exkurs in die Biologie des Golgi-Komplex und seiner Bedeutung.

3. Molekulare Regulationsmechanismen am Golgi Apparat – Ein kleiner Einblick in die Welt der Zellbiologie

Der von dem Wissenschaftler und Nobelpreisträger Camillo Golgi 1898 entdeckte Golgi-Komplex zählt zu den Organellen eukaryotischer Zellen und stellt eine charakteristische polar aufgebaute Membranzstruktur dar, die bei der Sekretbildung eine wichtige Rolle spielt. Membranproteine und Proteine, die sezerniert werden, gelangen nach ihrer Synthese am Endoplasmatischen Retikulum (ER) zunächst in den cis-Golgi, wo sie schrittweise während der Passage zum medial- und trans-Golgi durch Glykosylierung modifiziert, um schließlich am trans-Golgi-Netzwerk (TGN) in unterschiedliche Transportvesikel verpackt zu werden. Der Zielort dieser Transportvesikel können andere interne

membranhüllte Organellen wie z.B. Lysosomen, Endosomen oder die Plasmamembran sein, wo lösliches Cargo-Protein wie beispielsweise Antikörper oder Hormone in die extrazelluläre Umgebung freigesetzt wird (02). Darüber hinaus spielt der Golgi-Komplex eine wichtige Rolle in der Zellpolarität, die für den Aufbau von epithelialen Zellverbänden und Organstrukturen, aber auch für die gerichtete Zellbewegung während der Wundheilung essentiell ist.

MCMC IN DER PARAMETERSCHÄTZUNG

Markov Chain Monte Carlo (MCMC) Sampling ist ein Verfahren zur effizienten Generierung von Stichproben aus hochdimensionalen Verteilungen $p(\theta)$. Mit Hilfe einer Markovkette mit Übergangswahrscheinlichkeit $p(\theta'|\theta)$ wird abhängig vom aktuellen Parameter θ ein neues θ' vorgeschlagen, welches mit einer bestimmten Akzeptanzwahrscheinlichkeit α angenommen wird. Dabei ist α so gewählt, dass die akzeptierten θ , welche in untenstehender Abbildung blau markiert sind, eine Stichprobe aus der Zielverteilung darstellen. Diese Zielverteilung ist in der Abbildung durch Höhenlinien repräsentiert. Ein bekannter und oft verwendeter MCMC Sampling-Algorithmus ist der *Metropolis-Hastings-Algorithmus*:

1. Initialisiere die Markovkette mit θ_0 und $p(\theta'|\theta)$ und setze $i = 0$

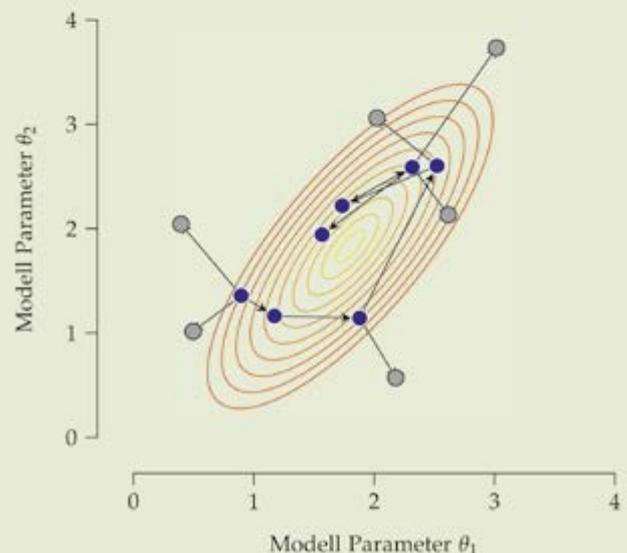
2. Ziehe θ' aus $p(\theta'|\theta_i)$

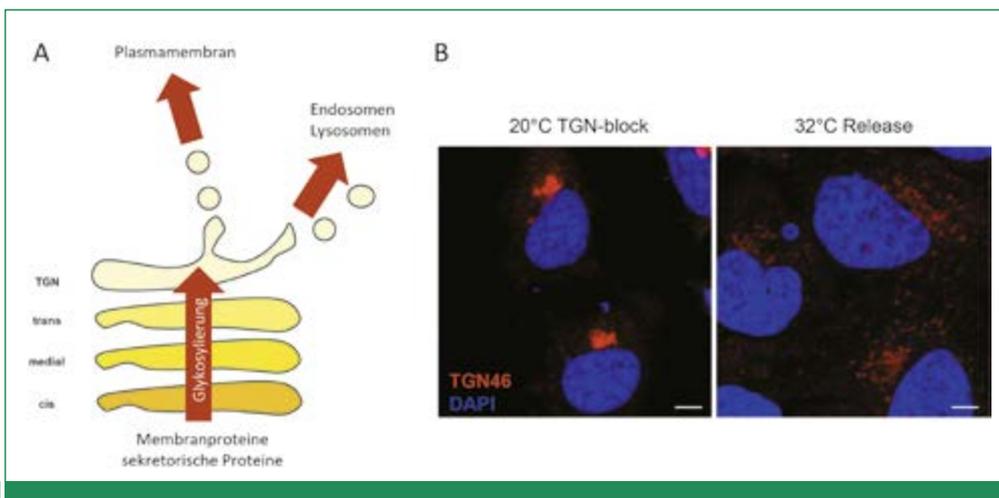
3. Setze $\alpha := \min\left(1, \frac{p(\theta') p(\theta_i|\theta')}{p(\theta_i) p(\theta|\theta_i)}\right)$

und

$$\theta_{i+1} = \begin{cases} \theta' & \text{mit Wahrscheinlichkeit } \alpha \\ \theta_i & \text{sonst} \end{cases}$$

4. Setze $i = i + 1$ und gehe zu 2





Proteintransport durch den Golgi-Komplex (A) Membranproteine und sekretorische Proteine werden durch den Golgi-Komplex in cis/medial/trans Richtung geschleust und durch Glykosylierung modifiziert. Am TGN erfolgt die Sortierung und Verpackung in Vesikel, die zur Plasmamembran oder zu Endosomen und Lysosomen transportiert werden. (B) Ein in HeLa-Zellen eingebrachtes rot-markiertes Membranprotein (TGN46) akkumuliert durch eine Senkung der Temperatur auf 20°C am TGN. Nach Erwärmen der Zellen auf 32°C (Release) verlässt das Membranprotein das TGN in Vesikeln, die zur Plasmamembran transportiert werden. Der Zellkern ist in blauer Farbe dargestellt. Größenmaßstab 5 µM.

Durch intensive Forschung in den letzten Jahren unter anderem auch am IZI ist das Wissen um die zentralen Moleküle, die für die Sortierung und Verpackung von Proteinen am TGN verantwortlich sind, zum Teil aufgeklärt worden. Ein komplexes Zusammenspiel aus Lipiden und Proteinen ist für die Ausbildung von Transportvesikeln am TGN notwendig. Ein besonders wichtiges Lipid in Golgi-Membranen ist die monophosphorylierte Form von Phosphatidylinositol (PI4P), welches als Signallipid Proteine mit PH-Domäne an Membranen rekrutiert. Eine PH-Domäne ist dabei eine Sequenz in diesem Protein, welche es ihm ermöglicht an bestimmte Membranen anzudocken. Ein solches PH-Domänen Protein ist das Lipidtransferprotein CERT, dessen Aufgabe darin besteht, das Lipid Ceramid von ER Membranen aufzunehmen und zum TGN zu transportieren. Die am TGN lokalisierte Sphingomyelinsynthase wandelt Ceramid in die beiden Lipide Sphingomyelin und Diacylglycerol um, die wiederum für die Ausbildung von Transportvesikeln am TGN unabdingbar sind. Ein funktionsunfähiges CERT-Protein führt damit zu Störungen im zellulären Lipidhaushalt und damit verbundenen Defekten im Membran- und Proteintransport, so dass das Zellüberleben gefährdet ist.

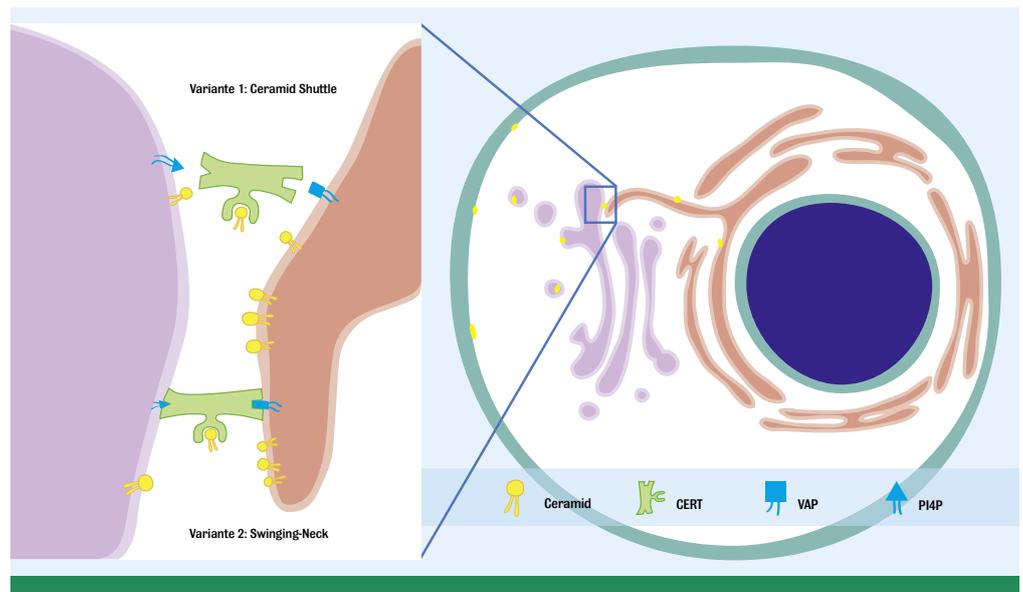
Es ist daher leicht nachvollziehbar, dass eine erhöhte oder erniedrigte Konzentration

von CERT mit pathophysiologischen Veränderungen wie sie in Krebszellen zu finden sind im Zusammenhang steht. Des Weiteren ist die Abhängigkeit intrazellulärer pathogener Viren und Bakterien von der CERT-Funktion der Wirtszelle bekannt. Studien des IZI in Zusammenarbeit mit der Prozessentwicklung von Boehringer Ingelheim Pharma GmbH lieferten den Beweis dafür, dass sich die einzigartige Funktion des CERT-Proteins im Lipidtransfer und der Golgi-Funktion auch für biotechnische Anwendungen ausnutzen lässt. So werden komplexe therapeutische Proteine wie zum Beispiel Antikörper heutzutage standardmäßig mit Hilfe von

Säugerzellen produziert. Da Säugerzellen im Gegensatz zu Bakterien in der Kultivierung sehr anspruchsvoll sind, ist der Bioprozess zur Produktion solcher Proteine mit enormen Kosten verbunden. Ein Ansatz der Bioprozessoptimierung ist die Steigerung der Sekretionsleistung der verwendeten Produktionszellen. In der Tat konnten wir in der Vergangenheit zeigen, dass die genetische Modifikation der Produktionszellen durch stabile Erhöhung der CERT Konzentration zu einer signifikant gesteigerten Produktivität in sogenannten fed-batch Kultivierungen führt. Diese Ergebnisse eröffnen neue Wege für verbesserte Produktionsprozesse der Zukunft.

CERT selbst wird durch ein komplexes, nur im Teil verstandenes Proteinnetzwerk, das komplexe Rückkopplungsmechanismen enthält, reguliert. Zu den beteiligten Molekülen gehören auch die Lipidkinase Phosphatidylinositol 4-kinase III beta (PI4KIIIβ), die am Golgi Komplex PI4P produziert und die Proteinkinase D (PKD), die sowohl CERT als auch PI4KIIIβ Funktionalität durch direkte Phosphorylierung steuert. Der genaue Lipidtransport-Mechanismus durch CERT an sogenannten membrane contact sites (MCS), an denen sich ER- und TGN-Membranen in unmittelbarer räumlicher Nähe befinden, ist ebenfalls noch ungeklärt. Zwei verschiedene Modelle werden derzeit diskutiert: CERT könnte gleichzeitig über seine PH-Domäne

mit Golgimembranen und einem zweiten, spezifischen Bindemotif mit dem ER verbunden sein, so dass nur die hydrophobe Ceramidbindetasche zwischen den beiden Organell-Membranen hin und her schwingt (Swinging Neck Modell). Alternativ könnte CERT sequenziell an diese unterschiedlichen Membranen binden und die kurze Distanz zwischen den Membranen per Diffusion zurücklegen (Shuttle Modell). Beide Modellvarianten sind in (03) dargestellt.



Die effektive Nutzung dieses CERT-Netzwerkes, beispielsweise im Rahmen der Optimierung von Produktionszellen, erfordert ein tiefgehendes Verständnis über die Interaktionen zwischen den beteiligten Molekülen. Um die molekulare Regulation und Wirkungsweise des komplexen CERT-Netzwerkes verstehen zu können, ist deshalb ein mathematischer Modellierungsansatz, welcher Rückkopplungs- und Transportmechanismen erklären kann, essentiell.

Wie aber gehen wir bei der Erstellung eines solchen Modells konkret vor? Und insbesondere: Können wir mit Hilfe unserer Modelle tatsächlich etwas lernen über die Transportmechanismen des CERT Proteins? Wie wir sehen werden, eignen sich auch hier die zuvor erklärten sampling-basierten Ansätze sehr gut! Beispielhaft wollen wir im Folgenden erläutern, wie unsere Modelle und Analysemethoden die Erforschung der genauen Mechanismen des CERT Transports unterstützen können.

4. Den molekularen Mechanismen des Regulationsnetzwerks von CERT auf der Spur

4.1 Von der Modellerstellung ...

Zur Erstellung eines parametrisierten Modells für das Regulationsnetzwerk von CERT wurden zunächst aktuelle Publikationen und Daten aus der Literatur herangezogen. Zusätzlich standen Datensätze

Mechanismen des Lipidtransportes durch CERT an Membrankontaktstellen zwischen ER und TGN. CERT bindet an TGN Membranen über die Interaktion seiner PH-Domäne mit PI4P. Die Bindung an das ER erfolgt über das ER Protein VAP. Der Ceramidtransport erfolgt entlang eines Konzentrationsgradienten vom ER zum TGN. Variante 1 stellt die Hypothese auf, daß CERT sequenziell an ER und TGN Membranen bindet und den kurzen Weg zwischen den Membranen per Diffusion zurücklegt (Shuttle). Variante 2 postuliert, dass CERT gleichzeitig über seine PH-Domäne mit Golgi-Membranen und über das spezifische Bindemotif mit dem ER verbunden ist, so dass nur die hydrophobe Ceramidbindetasche zwischen den beiden Organell-Membranen hin und her schwingt (Swinging Neck).

aus Experimenten zur Verfügung, welche Informationen über den zeitlichen Verlauf der Aktivität einiger Proteine des Systems enthalten. Da diese Messwerte das Mittel einer gesamten Population von Zellen beschreiben, von dem angenommen werden kann, dass es sich deterministisch verhält, und da keine Information über die Lokalisation der Moleküle innerhalb der Zelle vorliegt, haben wir eine Modellierung mit gewöhnlichen Differenzialgleichungen gewählt. Dies ist mittlerweile ein Standardansatz in der Systembiologie, und es gibt Regeln für das Aufstellen der entsprechenden Gleichungen.

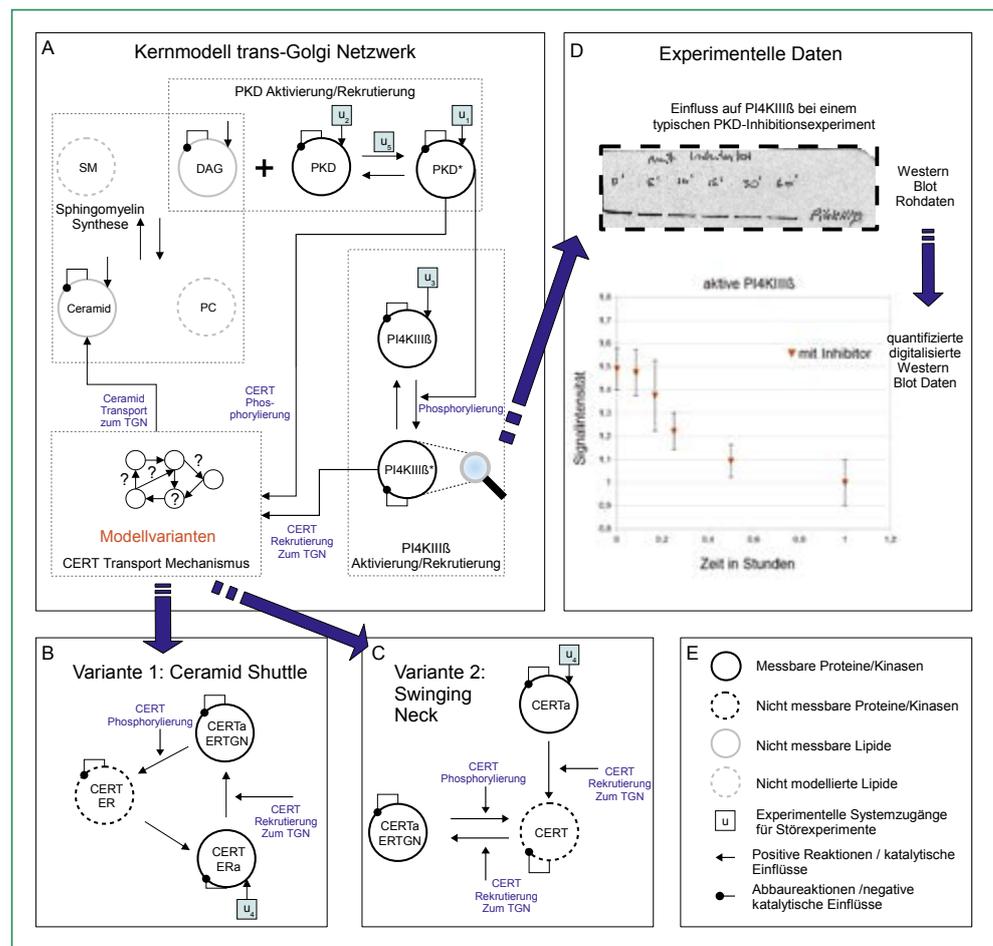
(04A) zeigt die Struktur unseres Modells.

Variablen in diesem Modell repräsentieren miteinander agierende Lipide und Proteine und deren chemisch modifizierte Formen. Experimentell nicht messbare Variablen sind gestrichelt dargestellt. Die mit „u“ gekennzeichneten Modelleingänge beschreiben mögliche Störexperimente, welche am IZI durchgeführt werden können, wie beispielsweise von außen induzierte Änderungen der Proteinkonzentrationen.

Um unsere Frage nach dem Transportmechanismus von CERT modellbasiert zu untersuchen, wurden zwei Modellvarianten erstellt, die in (04B) und (04C) sche-

Modellstruktur des Regulationsnetzwerkes von CERT und experimentelle Daten

A: Graphische Darstellung des Kern-differentialgleichungsmodells, welches die Interaktionen der Biomoleküle am TGN beschreibt. Verschiedene Lipide und Proteine beeinflussen sich gegenseitig über chemische Reaktionen. Nicht experimentell messbare Variablen sind gestrichelt dargestellt. Experimentelle Zugänge - mit „u“ gekennzeichnet - beschreiben Stellen an denen Störexperimente möglich sind. Einige Modellteile sind bekannt wie z.B. die PI4KIII β Aktivierung/Rekrutierung. Andere Modellteile lassen verschiedene Varianten zum Modellvergleich offen, wie z.B. der CERT bedingte Ceramid Transportmechanismus. B & C: Schematische Darstellung der zwei Modellalternativen Ceramid Shuttle (B) und Swinging Neck (C). D: Western Blot Daten aus einem Störexperiment, in dem die PKD Aktivität mit einem Inhibitor geschwächt wurde. Aktive PI4KIII β wurde in einer Zeitreihe gemessen. Die Rohdaten werden quantifiziert und digitalisiert, bevor sie ins Modell einfließen. E: Legende.



matisch dargestellt sind. Diese beschreiben jeweils die beiden Transporttheorien Ceramid Shuttle und Swinging Neck und können beide jeweils in das Kernmodell eingebettet werden. Die beiden daraus entstandenen Modelle unterscheiden sich nur in den Gleichungen, welche den Ceramid Transport beschreiben. Das Swinging Neck Modell umfasst hierbei 27 Parameter, während die Shuttle Modellvariante durch nur 26 Parameter bestimmt wird. Wir haben es also mit Modellen unterschiedlicher Komplexität und unterschiedlicher Anzahl freier Parameter zu tun, so dass ein reiner Datenfit keine verlässliche Aussage liefert.

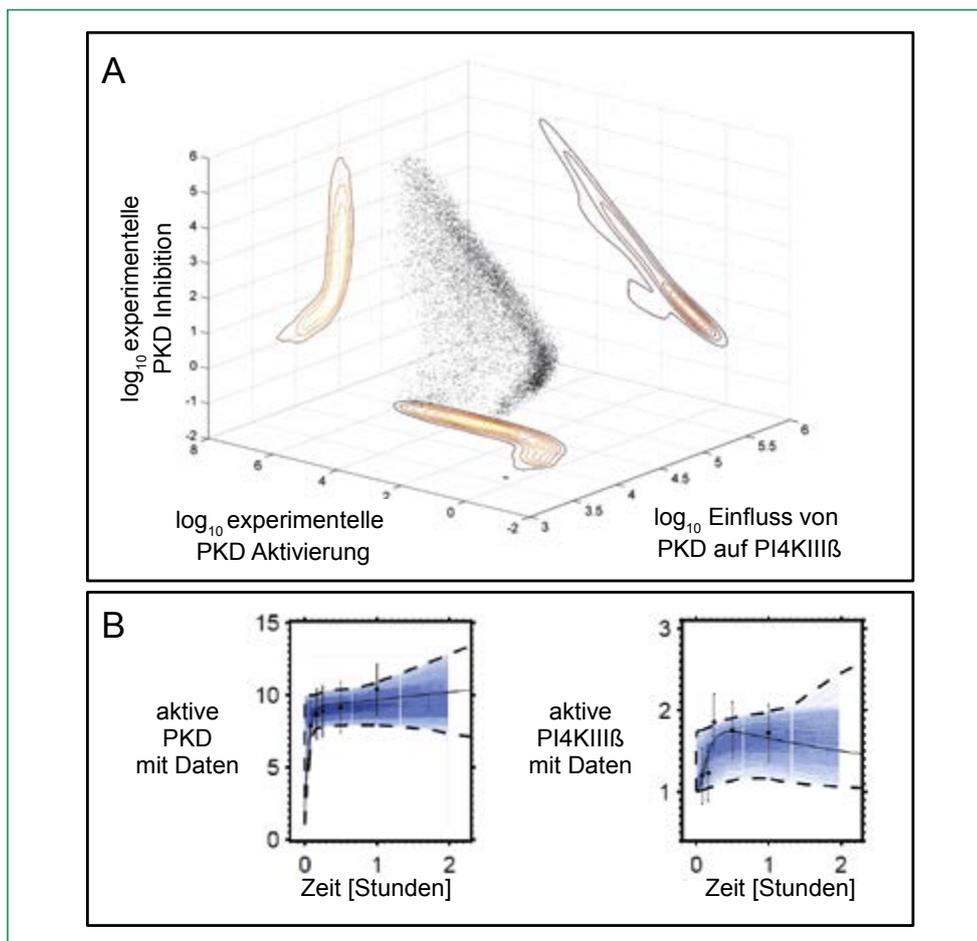
(04D) zeigt einen exemplarischen Western Blot Datensatz, wie er zur Modellkalibrierung verwendet wurde. Aus den Bilddaten können je nach Färbungsintensität die jeweiligen Proteinkonzentrationen extrahiert werden. Durch die Analyse der Bilddateien mit von uns speziell für dieses Projekt entwickelten Algorithmen werden die

Proteinkonzentrationen quantifiziert und so für einen Vergleich mit den entsprechenden Modellvariablen aufbereitet.

Die Relation von messbaren und nicht messbaren Modellvariablen lässt hierbei ein ausbalanciertes Konzept der datengetriebenen Modellierung erkennen: Mit fünf experimentellen Zugängen und sechs messbaren Variablen besitzt das Modell mit seinen insgesamt neun Zustandsvariablen eine gute Beobachtbarkeit.

4.2 ... über die Modellkalibrierung ...

Für die beiden Modellvarianten wurden mittels MCMC Sampling Stichproben aus der a-posteriori Verteilung generiert. (05A) zeigt exemplarisch die Stichprobe für drei Parameter des Swinging Neck Modells in logarithmischer Darstellung. Auf den Koordinatenachsen sind die Höhenlinien der aus der Stichprobe empirisch geschätzten Dichtefunktion dargestellt. Aus der Abbildung geht hervor, dass man mit den vor-



Sampling-basierte Parameterschätzung und simulationsbasierte Modellvorhersagen

A: Darstellung einer Parameterstichprobe, die mit MCMC Sampling ermittelt wurde. Hier wird der Zusammenhang zwischen drei Parametern dargestellt: Die Wirkung von PKD auf PI4KIII β und zwei experimentelle Zuflüsse ins Modell. Diese Punktwolken können komplexe Formen in hochdimensionalen Räumen annehmen. Um Zusammenhänge zwischen Parametern, wie z.B. Korrelationen, besser zu verstehen, werden sie auf niedriger dimensionale Unterräume projiziert. Die Gesamtstichprobe hatte hier 27 Parameter und daher auch 27 Dimensionen.

B: Eine Modellvorhersage des Swinging Neck Modells zusammen mit Trainingsdaten. Die schwarze Linie stellt die Simulation mit dem Maximum a-posteriori Schätzer dar. Die Wahrscheinlichkeitsdichte ist durch die Intensität der Blaufärbung dargestellt. Über 99 Prozent aller Vorhersagen liegen innerhalb der gestrichelten Linie.

liegenden Daten noch weit davon entfernt ist, alle Parameterwerte genau angeben zu können. Der Bereich mit hoher a-posteriori Verteilung umfasst für zwei der drei Parameter noch mehrere Größenordnungen. Weiterhin erkennt man, dass die Verteilung dieser drei Parameter sehr von einer Normalverteilung abweicht und die Parameter hohe und teilweise nichtlineare Korrelationen aufweisen, wie es für Parameterschätzungen von Differenzialgleichungsmodellen häufig der Fall ist.

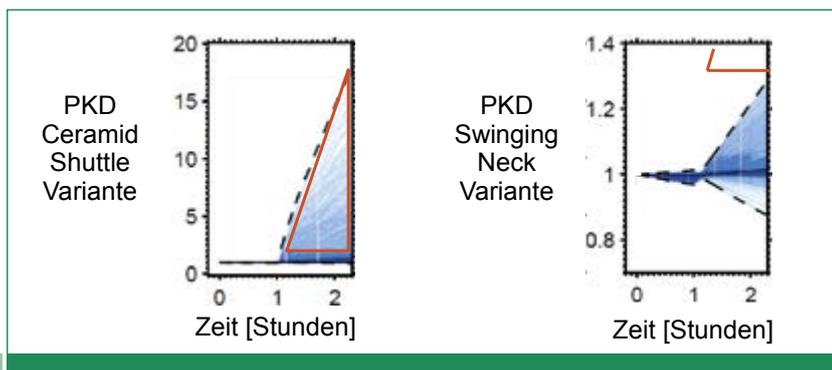
Die marginalen a-posteriori Verteilungen für Modellparameter von nicht direkt messbaren Variablen weisen meist eine noch größere Varianz auf. Es existieren also viele unterschiedliche Parametersätze, mit denen das Swinging Neck Modell die Daten etwa gleich gut reproduzieren kann, und zwischen denen man auf Basis der vorliegenden Daten nicht unterscheiden kann. Die Parameterverteilung des Shuttle Modells weist eine ähnlich starke Varianz auf.

Zusammenfassend lässt sich also erkennen, dass wir es hier mit einem sehr schlecht-gestellten Optimierungsproblem zu tun haben, und globale sampling-basierte Ansätze für unsere Zwecke generell geeignet sind.

(05B) zeigt exemplarisch den Vergleich einer Variablen des kalibrierten Swinging Neck Modells mit einem zur Kalibrierung verwendeten Datensatz auf. Aus diesen Vergleichen lässt sich erkennen, dass die vorliegenden Messdaten von beiden Modellen gut beschrieben werden. Insbesondere lassen diese Daten noch keine signifikante Präferenz für eine der beiden Modellvarianten zu.

Ist das nun der Weisheit letzter Schluss? ...

Nun, mag vielleicht sein! Allerdings können wir uns an diesem Punkt unsere Modelle zu Nutze machen und modellgestützt nach geeigneten Experimenten suchen, mit denen sich vielleicht zwischen den beiden Hypothesen unterscheiden lässt. Wir werden sehen ...



06

Vorhersage eines neuen hypothetischen Szenarios

Das Swinging Neck und das Shuttle Modell treffen jeweils eine Vorhersage über dasselbe Experiment. Die rot umrandete Fläche zeigt, in welchem Bereich sich die Vorhersagen stark unterscheiden.

Vorab sei aber noch Folgendes zur Laufzeit angemerkt: Die Simulation eines Experimentes mit einem dieser Modelle und einem Parametersatz dauert weniger als eine Zehntelsekunde. Dies mag zunächst schnell erscheinen, die Modellkalibrierung ist jedoch trotzdem sehr zeitintensiv: Um die hier dargestellten Parameterverteilungen zu erzeugen, mussten für jedes Modell vier unterschiedliche experimentelle Szenarien simuliert werden. Je Modell wurden, um eine repräsentative Stichprobe zu erhalten, sechs Millionen Parametersätze aus der a-posteriori Verteilung gezogen und ausgewertet, woraus sich insgesamt 48 Millionen Modellsimulationen ergaben. Dies entspricht 50–60 Stunden Rechenzeit auf einem Kern eines modernen Rechners.

4.3 ... zur Modellvorhersage

Unsere sampling-basierten Methoden erlauben es nun, modellbasiert neue Experimente vorzuschlagen, welche geeignet sind um zwischen den beiden Modellvarianten zu unterscheiden. Hierzu wurden nun mit beiden Modellen Vorhersagen für neue Szenarien gemacht und dabei untersucht, für welche dieser Szenarien sich die Vorhersagen der beiden Modelle signifikant voneinander unterscheiden. Ein solcher Unterschied zeigte sich beispielsweise beim Vergleich des Anstiegs der PKD Gesamtproteinmenge innerhalb von zwei Stunden nach PKD Aktivierung (06). Das Shuttle Modell schließt hierbei eine starke Erhöhung der PKD Gesamtmenge bis zu einem Faktor 10–12 nicht aus, während das Swinging Neck Modell nur leichte Änderungen in der PKD Gesamtmenge vorhersagt. Der rot eingerahmte Bereich verdeutlicht das Gebiet, in dem sich die Modellvorhersagen stark unterscheiden. Die Chance, eine der beiden Transporttheorien durch Messungen dieser Variablen

im biologischen System innerhalb des relevanten Zeitbereichs zu bekräftigen, ist hier demnach sehr hoch. Diese und weitere Experimente sind momentan in Planung, und wir sind gespannt ob sich eine der Hypothesen nach einem weiteren Durchlaufen des systembiologischen Zirkels durchsetzen wird.

5. Zu guter Letzt ein paar Schlussworte

In diesem Artikel haben wir die Rolle der Simulation für statistische sampling-basierte Verfahren zur Kalibrierung und Analyse systembiologischer Modelle diskutiert. Bayes'sche Lernverfahren zur Modellkalibrierung, wie sie hier vorgestellt wurden, liefern eine statistisch konsistente Beschreibung des Modells, in dem die Variablen und die Parameter als Zufallsvariablen interpretiert werden. Da man es bei der Parameterschätzung meist mit schlechtgestellten inversen Problemen zu tun hat, sind globale sampling-basierte Verfahren das passende Werkzeug. Sie liefern neben den optimalen Lösungen auch Informationen über Unsicherheiten in den Parametern und auch in Modellvorhersagen, und machen damit eine fundierte Evaluierung des Modells und auch Vergleiche unterschiedlich komplexer Modelle möglich. Hier wurde die Mächtigkeit dieser Methoden anhand eines Beispiels zur modellbasierten Untersuchung des Transportmechanismus des Proteins CERT demonstriert.

Gerade für nichtlineare dynamische Modelle ist der Rechenaufwand für solche globalen Verfahren allerdings extrem hoch, so dass ihre Anwendung, abhängig von der Anzahl der Parameter und den Eigenschaften der Zielfunktion, bisher auf Modelle mittlerer Größe beschränkt ist. Effiziente numerische Simulationsverfahren sowie Me-

thoden zur Modellreduktion spielen hierbei für die Übertragbarkeit auf größere Systeme eine wesentliche Rolle.

Eine Zukunftsvision im Rahmen des Exzellenzclusters SimTech der Universität Stuttgart ist die Nutzbarmachung systembiologischer und biomechanischer Erkenntnisse in der Medizin, wie beispielsweise die modellgestützte Optimierung der Behandlungen von Patienten mit Medikamenten. Diese Zielsetzung erfordert über die Grundlagenforschung auf Einzelzellebene hinausgehende Multi-Skalen-Ansätze, die mehrere Längen- und auch Zeitskalen umfassen. Man kann sich leicht vorstellen, dass der Simulationstechnik sowohl bei der Erstellung und Simulation solcher Modelle als auch für dessen Kalibrierung eine nicht zu unterschätzende Rolle zukommt.

Patrick Weber, Karsten Kuritz,
Andrei Kramer, Frank Allgöwer, Monilola Olayioye,
Angelika Hauffer und Nicole Radde

Anmerkung

Die in diesem Artikel dargestellten Analyseergebnisse und deren Interpretation stellen aktuelle Zwischenergebnisse eines laufenden Projektes dar und wurden anhand von vorläufigen, teilweise noch nicht evaluierten Datensätzen erstellt.

Referenzen

Publikationen Methoden – Institut für Systemtheorie und Regelungstechnik

- Weber P, Kramer A, Dingler C, Radde N (2012). Trajectory-oriented Bayesian experiment design versus Fisher A-optimal design: an in depth comparison study. *Bioinformatics* 28(18), i535–i541.
- Thomaseth C, Weber P, Hamm T, Kashima K, Radde N (2013). Modeling sphingomyelin synthase 1 driven reaction at the Golgi apparatus can explain data by inclusion of a positive feedback mechanism, *J Theor Biol* 337, 174–180.

Publikationen Biologie – Institut für Zellbiologie und Immunologie

- Olayioye MA, Hausser A (2012). Integration of non-vesicular and vesicular transport processes at the Golgi complex by the PKD-CERT network. *Biochim Biophys Acta* 1821(8), 1096–103.
- Florin L, Pegel A, Becker E, Hausser A, Olayioye MA, Kaufmann H (2009). Heterologous expression of the lipid transfer pro-

ZUSAMMENFASSUNG

Die Systembiologie ist ein noch recht junges Forschungsgebiet, welches sich zu Beginn des 20. Jahrhunderts an der Schnittstelle zwischen Biologie, Systemtheorie und Simulationstechnik entwickelt hat. Sowohl enorme Fortschritte im experimentellen Bereich als auch immer leistungsfähigere Computer ermöglichen heute erstmals eine ganzheitliche Betrachtung biologischer Systeme.

Die Simulation quantitativer Modelle dieser Systeme liefern interessante neue Hypothesen, und mathematische Analysen helfen aktuelle Fragestellungen in allen Forschungsbereichen der Biologie zu adressieren – von der Entwicklung neuer Medikamente bis hin zur Prozessoptimierung in der Biotechnologie.

Dieser Artikel widmet sich der Rolle der Simulation speziell für statistische sampling-basierte Ansätze zur Modellkalibrierung und der Generierung von Hypothesen. Die Simulationstechnologie nimmt bei den hier vorgestellten Methoden eine zentrale Stellung zwischen experimenteller Datenerhebung und theoretischer Systemanalyse ein. Das Potenzial dieser Methoden wird beispielhaft an einem systembiologischen Kooperationsprojekt zwischen dem Institut für Systemtheorie und Regelungstechnik (IST) und dem Institut für Zellbiologie und Immunologie (IZI), in dem wir molekulare Schlüsselprozesse der Proteinsekretion in Säugetierzellen untersuchen, demonstriert.

tein CERT increases therapeutic protein productivity of mammalian cells.

J Biotechnol 141(1–2), 84–90.

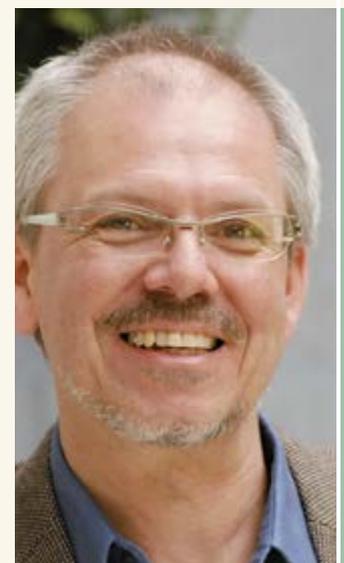
Basisliteratur Systembiologie

- Gelman A, Carlin J, Stern H, Rubin D (2003). *Bayesian Data Analysis*, Second Edition, Taylor & Francis.
- Klipp E, Liebermeister W, Wierling C, Kowald A, Lehrach H, Herwig R (2011). *Systems Biology*, Wiley.

DIE AUTOREN | 1

FRANK ALLGÖWER

Frank Allgöwer ist Professor für Systemtheorie und Regelungstechnik und Leiter des gleichnamigen Instituts an der Universität Stuttgart. Er hat in Stuttgart Technische Kybernetik und an der University of California at Los Angeles Angewandte Mathematik studiert und promovierte in der Fakultät Verfahrenstechnik der Universität Stuttgart. Vor seiner Berufung nach Stuttgart im Jahr 1999 hatte er eine Professur für Nichtlineare Systeme im Departement Elektrotechnik der ETH Zürich. Längere Forschungsaufenthalte brachten Frank Allgöwer an das NASA Ames Research Center, das California Institute of Technology, die University of California at Santa Barbara und zur Firma DuPont in Wilmington, Delaware. Sein Hauptarbeitsgebiet ist die Entwicklung und Anwendung systemtheoretischer Methoden zur Analyse und Regelung dynamischer Systeme.



DIE AUTOREN | 2

**NICOLE RADDE (3VR)**

Nicole Radde hat an der Technischen Universität Darmstadt Physik studiert, an der Universität zu Köln am Zentrum für Angewandte Informatik promoviert, und war anschließend als Postdoktorandin am Institut für Medizinische Informatik, Statistik und Epidemiologie der Universität Leipzig tätig. Seit Oktober 2008 arbeitet sie als Juniorprofessorin für „Systemtheorie in der Systembiologie“ am Institut für Systemtheorie und Regelungstechnik der Universität Stuttgart. Ihre Forschungsinteressen liegen im Bereich der statistischen sampling-basierten Lernverfahren zur Parameterschätzung und der systemtheoretischen Analyse intrazellulärer Netzwerke.

PATRICK WEBER (2VL)

Patrick Weber hat an der Albert-Ludwigs-Universität Freiburg Mikrosystemtechnik studiert und 2009 sein Diplom erhalten. Im Hauptstudium und in seiner Abschlussarbeit vertiefte er sich in biomedizinischer Mikrofluidik. Seit Anfang 2010 ist er wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Systemtheorie und Regelungstechnik an der Universität Stuttgart und bearbeitet in der Systembiologie-Gruppe das Projekt: *Modelling of the trans-Golgi network key player interactions.*

KARSTEN KURITZ (1)

Nach Studien an der Universität Stuttgart und der University of Linköping erlangte Karsten Kuritz im Jahr 2012 den Abschluss Diplom-Biologe (technisch orientiert). Während des Studiums verbrachte er im Jahr 2010 einen 6-monatigen Forschungsaufenthalt bei der Firma Merrimack Pharmaceuticals in Cambridge, Massachusetts. Seit November 2012 ist Karsten Kuritz wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Systemtheorie und Regelungstechnik. Sein Forschungsschwerpunkt liegt in der Anwendung von systemtheoretischen Methoden auf Fragestellung der molekularen Zellbiologie.

Kontakt

Universität Stuttgart
Institut für Systemtheorie
und Regelungstechnik
Pfaffenwaldring 9
D-70550 Stuttgart
Tel: +49 (0) 711/685-67734
Fax: +49 (0) 711/685-67735
E-Mail:
sekist@ist.uni-stuttgart.de
Internet:
http://www.simtech.
uni-stuttgart.de

ANDREI KRAMER (2VR)

Andrei Kramer ist wissenschaftlicher Mitarbeiter in der Systembiologie-Gruppe im Institut für Systemtheorie und Regelungstechnik der Universität Stuttgart. Sein Forschungsgebiet ist die Untersuchung und Weiterentwicklung von Parameter-Sampling Methoden in der Modellierung von biologischen Systemen. Er hat an der Humboldt Universität zu Berlin Physik studiert (Diplom 2008).

MONILOLA OLAYIOYE (3VL)

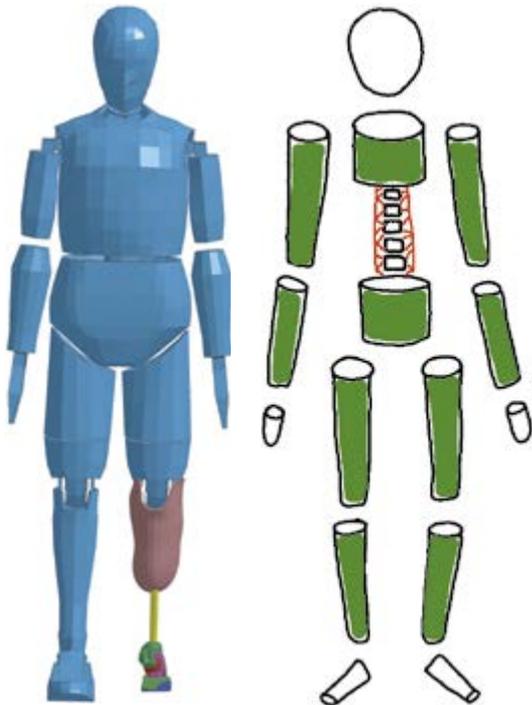
Prof. Monilola Olayioye absolvierte von 1991 bis 1996 ein Studium der Biotechnologie an der Technischen Universität Braunschweig und promovierte von 1997 bis 2000 am Friedrich Miescher Institut in Basel, Schweiz in der Zellbiologie. Nach einem dreijährigen durch ein EMBO Stipendium finanziertem Postdokaufenthalt am Walter and Eliza Hall Institut in Melbourne, Australien baute Frau Olayioye 2004 im Rahmen des SFB495 „Topologie und Dynamik von Signalprozessen“ eine unabhängige Nachwuchsgruppe an der Universität Stuttgart auf. Die Arbeitsgruppe von Frau Olayioye ist am Institut für Zellbiologie und Immunologie angesiedelt und beschäftigt mit der Aufklärung von molekularen Signalwegen, die der deregulierten Proliferation, Migration und Invasion von Tumorzellen zugrunde liegen. 2011 nahm Frau Olayioye den Ruf auf eine Heisenberg-Professur für Molekulare Tumorzellbiologie an der Universität Stuttgart an.

ANGELIKA HAUSER (R)

Angelika Hauser ist seit 2003 Arbeitsgruppenleiterin und seit 2010 Akademische Rätin am Institut für Zellbiologie und Immunologie der Universität Stuttgart. Von 1991 bis 1997 studierte sie technische Biologie an der Universität Stuttgart, wo sie 2000 mit einer Arbeit über die Regulation der Proteinkinase D in T-Lymphozyten promoviert wurde. Dem Eliteförderprogramm für Postdoktoranden der Landesstiftung Baden-Württemberg gehörte sie von 2002 bis 2004 an, von 2008 bis 2013 war sie Mitglied im WIN-Kolleg der Heidelberger Akademie der Wissenschaften. Derzeit beschäftigt sie sich mit Signalwegen und molekularen Mechanismen der Proteinsekretion und Zellmigration.

Muskelspiele

Wie biomechanische Simulationen helfen, Belastungen im Körper sichtbar zu machen



In der rechnergestützten Biomechanik und der Systembiologie liefern neue Simulationswerkzeuge und -methoden bereits heute einen entscheidenden Beitrag zur Berechnung wichtiger Kennzahlen, die es erlauben, komplexe Mechanismen zu analysieren und zu verstehen.

1. Einleitung

Für die meisten ist der Griff zur Tasse Kaffee am Morgen unverzichtbar, und dieser funktioniert in der Regel auch problemlos. Die Komplexität, die sich hinter dieser scheinbar trivialen Bewegung verbirgt, wird von uns allerdings oftmals nicht wahrgenommen. Tatsächlich aber stellt jede zielgerichtete Bewegung im Raum, die eine Orts-, Geschwindigkeits- oder Beschleunigungsänderung unter der Einwirkung von Kräften zur Folge hat, eine kleine choreographische Meisterleistung dar, erfordern doch bereits geringste Bewegungen des Körpers das koordinierte Zusammenspiel vieler verschiedener Komponenten. Die Einflüsse reichen hierbei von den physikalischen und biochemischen Eigen-

schaften und Vorgängen in Zellen, über das Verhalten eines Gewebes bis hin zur Funktion von Organen. Die Erforschung einzelner, isolierter Vorgänge sowie deren Zusammenspiel stellt letztlich die Grundlage dar, um krankhafte Vorgänge zu identifizieren und zu verstehen, Schmerzen zu lindern und im Idealfall sogar Krankheiten zu heilen. Je größer das Wissen und je komplexer die Zusammenhänge, desto schwieriger wird es, diese ohne technische Hilfsmittel im richtigen Kontext zu analysieren.

Eine große Herausforderung liegt dabei in der validen Erfassung der oben genannten Kennzahlen. So sind zum Beispiel innere Kräfte sowie die Belastungen, die aus inneren und äußeren Kräften resultieren, oft gar nicht oder nur sehr bedingt am leben-

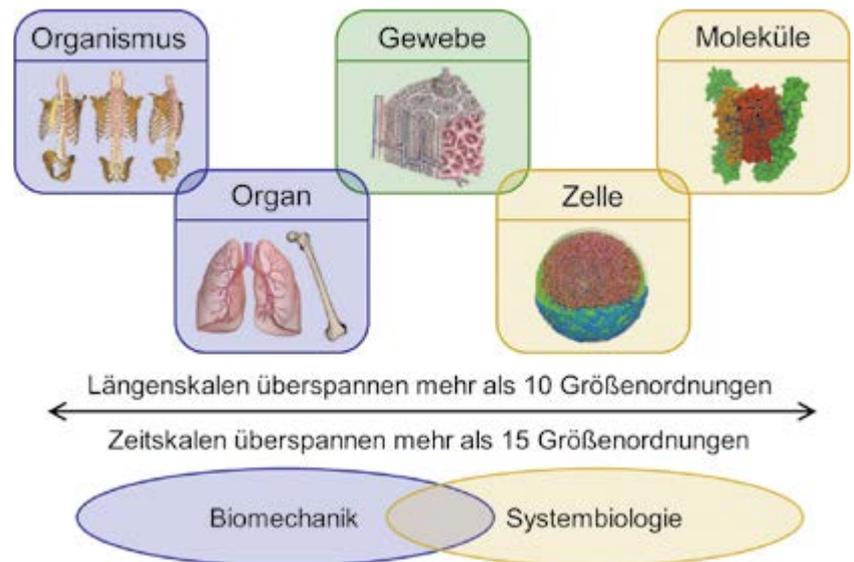
den Körper experimentell zu bestimmen – nicht zuletzt auch aus ethischen Gründen. Zum Teil lassen sich wichtige Kennzahlen jedoch indirekt bestimmen. Und hier kommt die Simulationstechnik ins Spiel: Gepaart mit neuen methodischen Grundlagen der Mechanik, insbesondere der Kontinuumsmechanik in Kombination mit der konstitutiven Materialtheorie bietet sie einen methodischen Rahmen für die Lösung des Erhebungsproblems. Dieser methodische Rahmen ermöglicht eine problemspezifische Abbildung (Abstraktion und Modellierung) und darauf aufbauend valide Vorhersagen (Simulationen) des Verhaltens der jeweils untersuchten biologischen Systeme.

Um relevante, biomechanische Größen bestimmen zu können, müssen Prozesse auf verschiedenen Skalen berücksichtigt und miteinander gekoppelt werden – (01). Die einzukalkulierenden Phänomene erstrecken sich über zeitliche und räumliche Skalen mehrerer Größenordnungen – von einzelnen Molekülen über Zellen, Gewebe und Organe bis hin zum Gesamtorganismus. Nach heutigem Wissensstand und in Anbetracht der derzeit zur Verfügung stehenden Rechnersysteme ist ein solch komplexes Modell noch mehr Wunschtraum als in greifbarer Nähe. So fungiert die Vision eines ganzheitlichen Menschmodells – das sogenannte Overall Human Model – dem SimTech-Projektnetzwerk „Coupled Problems in Biomechanics and Systems Biology“ zwar als inspirierendes Leitbild, kann zum gegenwärtigen Zeitpunkt aber noch nicht oder nur sehr unvollkommen umgesetzt werden. Daher ist es auch nicht das Ziel aktueller Forschungsarbeiten, ein ganzheitliches Modell zu schaffen, sondern mehrere Menschmodelle mit verschiedenen Abstraktionsgraden zu untersuchen, die unterschiedliche Komplexitäten aufweisen. Dadurch können bereits heute bestimmte Teilaspekte analysiert, Teilfragen beantwortet und das Verhalten für spezielle Szenarien vorhergesagt werden. Die Grundlage für diese Computermodelle bilden neue Simulationmethoden, verbesserte geometrische Modelle und ausreichend Rechenleistung, aber vor allem der interdisziplinäre Austausch. Ausgehend hiervon können virtuelle Untersuchungen durchgeführt werden, um so neue Einsichten in

SUMMARY

While in the past, most researchers tried to understand the complex structure and its functions by carrying out (bio-) physical experiments, simulation technology can provide nowadays new tools to gain a much deeper and systematic understanding of cells, organs, or the entire body. This is particular true for phenomena that cannot be directly measured within a living human due to ethical reasons. Hence, the Cluster of Excellence pursues the vision of developing an overall human model to study, for example, the underlying mechanisms responsible for performing everyday tasks such as walking, to investigate and to design new surgical procedures like the injection of bone cement into vertebra for regaining mechanical functionality of the spine, or to analyse methodological concepts and strategies for cancer treatment.

die zugrunde liegenden Mechanismen eines bestimmten biologischen Systems und dessen Verhalten bei komplexen Randbedingungen wie etwa Kräfte, die während des Gehens auf eine Bandscheibe wirken, zu erhalten. Ein allumfassendes Menschmodell ist nicht unbedingt erforderlich, da je nach Problemstellung unterschiedliche Effekte und Prozesse auf anderen Größenordnungen (Skalen) dominieren. So spielen auf der Körper- und Organebene hauptsächlich (bio-) mechanische Gesetzmäßigkeiten eine Rolle, wohingegen auf den darunter liegenden Skalen vermehrt systembiologische Aspekte zum Tragen kommen.



In diesem Sinne ist das Forschungsfeld „Biomechanik“ ein transdisziplinäres Fach, das weitestgehend alle klassischen und ingenieurwissenschaftlichen Disziplinen miteinander verbindet. Das wird deutlich, wenn

Verschiedene örtlich und zeitlich gekoppelte Skalen, die bei der Modellbildung zur Betrachtung bestimmter Phänomene im menschlichen Körper berücksichtigt oder vereinfacht werden müssen.

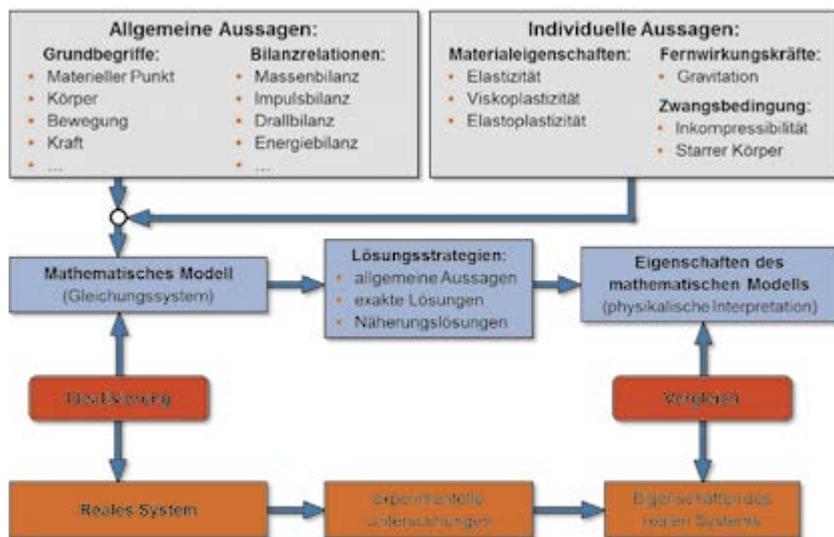
man den sehr komplexen und mehrphasigen mikroskopischen Aufbau von gewachsenem biologischem Gewebe betrachtet. Klassische (kontinuums-) mechanische Ansätze müssen hier in der Regel durch Mehrskalen- und Mischungstheorien erweitert werden. Zudem fließen u. a. Elemente aus der Elektrodynamik, der Thermodynamik und der Systembiologie in die Betrachtungen mit ein.

Entscheidend für sichere und vor allem richtige Aussagen ist die Modellvalidierung. Mit Hilfe der Validierung wird überprüft, ob ein entwickeltes Modell die Realität korrekt abbildet und wirklichkeitstreuere Ergebnisse liefert. Nur wenn die Ergebnisse aus Realexperiment und Computersimulation übereinstimmen, kann ein Modell zur Vorhersage, Untersuchung und Berechnung von Größen verwendet werden, die ansonsten nicht messbar wären – (02). Relevante medizinische Fragestellungen lassen sich mithin nur durch die kontinuierliche, interdisziplinäre Zusammenarbeit mit (System-) Biologen und Medizinern beantworten und setzen voraus, dass einzelne isolierte, validierte Modelle zu größeren und anwendungsspezifischen Menschmodellen zusammengeführt werden.

Entwicklung abgestufter, integrierter und anwendungsbezogener Gesamtmodelle – (03). Realisiert werden kann solch eine konsistente Kopplung beispielsweise mit Hilfe wissenschaftlicher Workflow-Verfahren (definierte Abfolge von Prozessen), durch skalenüberbrückende Techniken oder geeignete Homogenisierungsmethoden (virtuelle Mittelungsansätze), wie dies z. B. an einem mehrskaligen Bandscheibenmodell [1] gezeigt wurde.

Beim Einsatz skalenüberbrückender Techniken und Homogenisierungsmethoden können die Ergebnisse eines übergeordneten Modells als Eingangsgrößen für benachbarte feinere Modelle verwendet werden. Umgekehrt kann ein übergeordnetes Modell von homogenisierten Ergebnissen profitieren, welche auf kleineren Skalen ermittelt werden. Neuartige Simulationsansätze zu entwickeln, die mehrskalige und multiphysikalische Modelle sinnvoll miteinander verknüpfen können, bleibt mithin ein dringendes Forschungsanliegen. Da die Lösung der aus einzelnen Simulationsaufgaben resultierenden mathematischen Probleme oftmals numerisch sehr aufwendig ist, können zudem Reduktionsmethoden in Erwägung gezogen werden, um eine möglichst schnelle Antwort (bis hin zur Echtzeit) auf eine konkrete Fragestellung erhalten zu können. Nicht zuletzt ist die Verwendung patientenspezifischer Eingabewerte von immenser Bedeutung, um die personalisierte Gesundheitsversorgung zukünftig auf ein neues Level zu heben. Hier gilt es noch große Herausforderungen zu meistern, schließlich ist ein biologisches System doch eben gerade nicht als Baukasten zu verstehen, sondern basiert auf den verschlungenen Wechselwirkungen aller Teile miteinander. Einzuzurechnen sind hier etwa auch hormonelle Schwankungen, die sich auf die mechanischen Parameter auf Gewebeebene auswirken können und somit auch Auswirkungen auf die Leistung des Gesamtorganismus hat. Dies gilt es zukünftig ebenso zu berücksichtigen wie Umwelteinflüsse oder die Interaktion von Psyche und Physis.

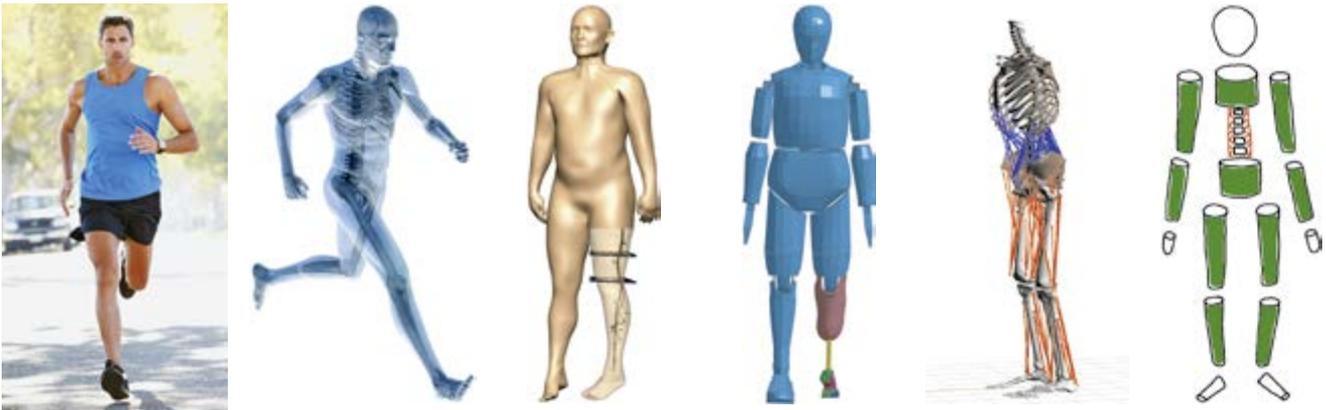
Im Folgenden werden beispielhaft einige anwendungsspezifische Menschmodelle präsentiert, die aus isolierten numerischen Modellansätzen entstanden sind. Im Einzelnen werden eine durch Muskelkontraktion induzierte Bewegung, ein Wachstumsmodell für biologisches Gewebe,



02

Idealisierung und Abgleich von real beobachtbaren Größen mit Simulationsergebnissen liefern gleichermaßen Bestätigung und neue Erkenntnisse.

Anwendungsspezifische Menschmodelle entstehen idealerweise durch die Verknüpfung von verschiedenen existierenden aber isolierten Teilmodellen unterschiedlicher Körperteile und Organe. Die einzelnen Modelle mit unterschiedlichen Auflösungen lassen sich baukastenartig zusammensetzen und ermöglichen so die



03

sowie als klinische Anwendung die Vertebroplastie, d. h. die Stabilisierung der Wirbelsäule mit Hilfe von injiziertem Knochenzement bei Osteoporose, betrachtet. Der Überblick über die so unterschiedlichen Menschmodelle wird durch die Beschreibung methodischer Konzepte zur Untersuchung neuartiger Behandlungsstrategien von Tumorerkrankungen abgerundet.

2. Muskuloskeletale Bewegungsmodelle

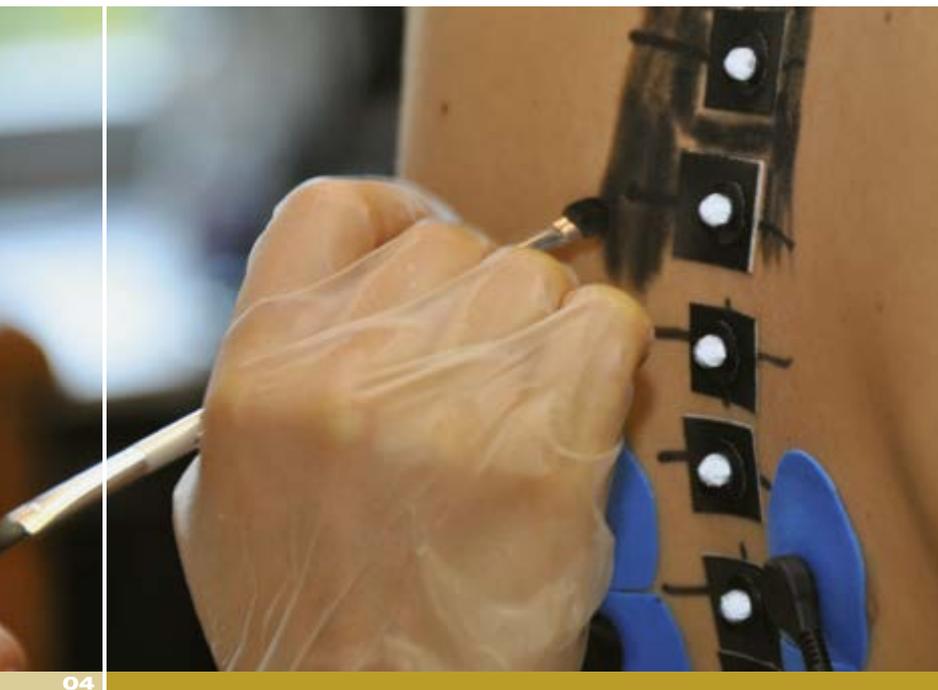
Computermodelle, die darauf abzielen, die menschliche Bewegung besser zu verstehen, basieren auf der Größenskala des gesamten Organismus. Dabei ist es irrelevant, ob der gesamte Mensch abgebildet wird oder nur Teile davon, wie beispielsweise ein Arm. Die Modellansätze dafür sind sogenannte Mehrkörpermodelle, mit deren Hilfe man biologische Bewegungen untersuchen kann, um physikalische Gesetzmäßigkeiten zu entdecken. Dabei interessieren insbesondere die Kräfte, die innerhalb des Körpers wirken. Die mathematische Grundlage dieser biomechanischen Mehrkörpermodelle bildet die Starrkörpermechanik. Bei diesem Modellierungsansatz werden starre, nichtelastische Körper durch Gelenke (Scharnier-, Kardan-, Kugelgelenk usw.) miteinander verbunden.

Bei einem Mehrkörpermodell eines Menschen werden die Starrkörper zudem durch weitere Strukturen, wie z. B. Muskeln, Bänder und Bandscheiben, verknüpft. Diese Elemente werden als Teilmodelle entwickelt und in das Menschmodell integriert. Grundsätzlich kann hier zwischen passiven und aktiven Kraft-

elementen unterschieden werden. Zur ersten Gruppe gehören die Bänder und Bandscheiben, die eine rücktreibende Kraft erzeugen, sobald sie aus ihrer Ausgangsposition ausgelenkt werden. Während Bänder dafür ausgelegt sind, Widerstand gegenüber Zugkräften zu leisten, müssen Bandscheiben Dehnung, Druck, Verschiebung und Verdrehung aushalten. Zu den aktiven Kraftelementen zählen hingegen die Muskeln [2]. Sie werden durch ein Stimulationssignal aktiviert, erzeugen eine Zugkraft (Kontraktion) und ziehen sich zusammen. Das Menschmodell bewegt beispielsweise seinen Arm – analog zum echten Menschen – indem verschiedene Armmuskeln aktiviert werden. Welche Stimulationssignale die einzelnen Muskeln erreichen müssen, in welcher Signalstärke und zu welchem Zeitpunkt, ist Gegenstand der Motorikforschung. Die dort entwickelten Regelungsansätze orientieren sich an Beobachtungen aus der Natur. Sie werden daher als physiologisch motivierte Regelungsansätze bezeichnet und in der Modellierung eingesetzt. Der Regelungsansatz koordiniert die Muskelansteuerung und versetzt das Modell in Bewegung – sei es sitzend, hüpfend oder stehend.

Als Simulationsergebnis können beispielsweise die Kräfte, die beim Sitzen in und auf eine Bandscheibe wirken, bestimmt werden – Kräfte, die aus ethischen und technischen Gründen nicht oder zumindest nicht in der Genauigkeit experimentell gemessen werden können. Wie bei allen Computersimulationen ist die Modellvalidierung entscheidend für eine sichere und richtige Aussage und erfolgt für die biomechanischen Mehrkörpermodelle auf zwei Ebenen: So müssen einmal die einzelnen Teilmodelle (Bänder, Muskeln, Band-

Verschiedene anwendungsspezifische Menschmodelle mit unterschiedlichem Detailgrad. Links der Mensch in Wirklichkeit und rechts das erweiterte Hanavan-Modell.



04

Experiment zur Validierung des Mehrkörpermodells.

scheibe) für sich genommen validiert werden, und einmal das gesamte Menschmodell. Im ganz konkreten Fall der Validierung unseres Wirbelsäulenmodells führten zehn Probanden im Labor Alltagsbewegungen aus. Zwei Hochgeschwindigkeitskameras nahmen die Bewegung auf – (04). Reflektierende Marker auf den einzelnen Wirbeln sorgten dafür, dass in der nachträglichen Betrachtung des Videos die Bewegung der einzelnen Wirbelkörper genau bestimmt werden konnte. Die so gemessene Bewegung konnte anschließend direkt mit der Wirbelkörperbewegung im Modell verglichen werden. Zusätzlich lieferten Elektroden, die für die Validierung auf die Haut geklebt worden waren, elektrische Signale, mit der sich die Aktivität der darunterliegenden Muskeln angeben lässt (Elektromyografie). Die so gemessenen Signale wurden mit den Aktivierungssignalen aus dem Modell verglichen, die dort dafür sorgen, den Muskeln die Befehle zur Kontraktion und Bewegung zu senden. Zusätzlich bot eine Kraftmessplatte weitere Vergleichswerte zwischen Mensch und Modell. So erhebt die Kraftmessplatte in der Validierung die Bodenreaktionskräfte, welche dann mit den entsprechenden Werten des Modells verglichen werden können. Je höher die Übereinstimmung zwischen Real- und Computerexperiment, desto vielseitiger lässt sich das Modell anwenden.

2.1 Das Menschmodell in der Anwendung

Mit Hilfe der Simulationen lassen sich also ohne ethisch bedenkliche und zudem kostenintensive Experimente die Kräfte bestimmen, die im Inneren des Körpers wirken. Wie gezeigt, lassen sich beispielsweise die auf die Bandscheibe wirkenden Alltagsbewegungen so berechnen. Der ähnlich strapazierte Hüftgelenkkopf wäre ein weiteres Beispiel für die Simulation von Kraftanstrengungen. Therapieansätze bei Verschleiß- oder Überbeanspruchungserscheinungen können folglich mit Blick auf die weitere Gelenkbeanspruchung besser verglichen und so Therapieempfehlungen ausgesprochen werden. Langfristig könnte das Menschmodell helfen, individuelle Untersuchungen durchzuführen. Das setzt allerdings voraus, dass das entwickelte Modell patientenspezifisch angepasst wird. Hierbei werden relevante Parameter wie Größe, Gewicht, Geschlecht, Wirbelsäulenkrümmung usw. vorher bestimmt und im Menschmodell integriert.

Eine weitere zukunftsweisende Einsatzmöglichkeit der Menschmodelle ist die Erprobung von Implantaten, die so bereits in der Entwicklungsphase getestet werden können. Die virtuellen Experimente liefern Aufschluss, ob ein Implantat den späteren Belastungen des Alltags standhalten wird. Durch die detaillierte strukturelle Auflösung des Menschmodells mit einzelnen modellierten Muskeln, Bändern und Bandscheiben kann untersucht werden, wie diese einzelnen Strukturen sich in ihrem Zusammenspiel mit dem jeweiligen Implantat für bestimmte Bewegungen verhalten.

2.2 Die Muskelkraft kontrollieren

In der Mehrkörperdynamik ist die mittlere Aktivität von Muskeln von Interesse, die notwendig ist, um eine bestimmte Bewegung durchzuführen. Diese durchschnittliche Anstrengung sagt jedoch wenig darüber aus, wie genau eine vordefinierte Kraft reguliert wird. So kann ein Muskel einerseits eine sehr hohe Kraft erzeugen, andererseits auch sehr präzise Bewegungen erlauben. Um zu verstehen, wie diese enorme Variabilität zustande kommt, wird statt der Bewegung des gesamten Organismus' die Aktivität eines einzelnen Muskels betrachtet, beispielsweise einen Skelett-

muskel des Armes. Im ganzheitlichen Menschmodell, dem bereits beschriebenen Mehrkörpermodell, ist dieser lediglich als einfacher Massenpunkt und einer Kraft-richtung modelliert, besteht in der Realität aber aus tausenden parallel zueinander verlaufenden Muskelfasern, die in Querrichtung durch das extrazelluläre Bindegewebe miteinander verbunden sind. Jede Muskelfaser ist eine biologische Zelle, die im Querschnitt rund 0,01 mm bis 0,1 mm misst und je nach Art und Länge des Muskels mehrere Zentimeter lang sein kann. Im Inneren der Muskelfasern wiederum befinden sich Proteinstrukturen, die miteinander interagieren und sich relativ zueinander verschieben können. An ihrer sogenannten motorischen Endplatte sind die Muskelfasern jeweils mit einer Nervenzelle verbunden. Diese Nervenzellen werden als Motoneuronen bezeichnet. Der Zellkörper der Motoneuronen befindet sich im zentralen Nervensystem des Rückenmarks. Die Verbindung der Motoneuronen mit den Muskelfasern erfolgt über einen langen, dünnen Nervenzellfortsatz, dem sogenannten Axon. Während eine Muskelfaser immer nur mit exakt einem Motoneuron verbunden ist, kann ein Motoneuron mit einigen wenigen oder auch mehreren tausend Muskelfasern verbunden sein. Das Axon eines Motoneurons verzweigt sich dabei auf dem Weg zum Muskel immer mehr und jedes Ende versorgt eine Muskelfaser mit Signalen aus dem Nervensystem. Die Einheit aus einem Motoneuron und den mit ihm verbundenen Muskelfasern wird als motorische Einheit bezeichnet. Die motorische Einheit stellt eine funktionale Einheit des neuromuskulären Systems dar.

Die Motoneuronen sind also für die Regelung und Steuerung eines Muskels zuständig. Die Ansteuerung einer motorischen Einheit erfolgt über elektrische Signale, die aus dem zentralen Nervensystem entlang des Axons zu den Muskelfasern der motorischen Einheit übertragen werden. In den stimulierten Muskelfasern löst das elektrische Signal eine Kontraktion, d. h. eine Kräftezeugung, aus. Der Signalweg von der elektrischen Erregung zur Kontraktion in den Muskelfasern ist überaus komplex und beinhaltet eine Vielzahl an Zwischenschritten, die sich mit Methoden aus der Systembiologie erforschen lassen. Angetrieben wird die Kontraktion durch die Umwandlung von chemisch gebundener

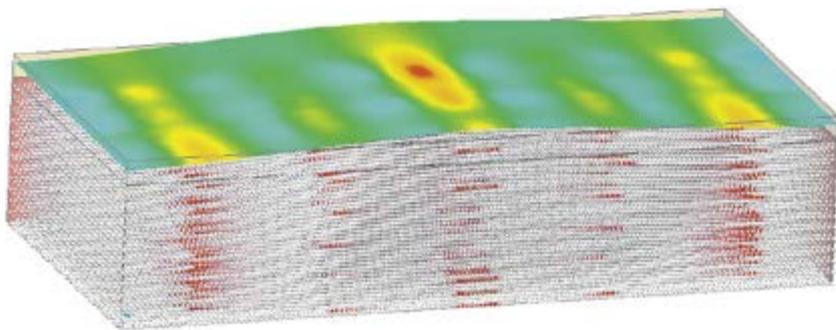
Energie in Form von Adenosintriphosphat (ATP) in mechanische Energie. Bei einer Kontraktion interagieren die im Inneren der Muskelfasern gelagerten Proteinstrukturen miteinander. Verschieben sich diese Strukturen zueinander, kommt es zur Kontraktion, d. h., der Muskel verkürzt sich zeitweilig und erzeugt so eine Zugkraft.

2.3 Präzisionsarbeit: Kräfte messen und kontrollieren

Um die Kraft, die von einem Muskel produziert wird, zu kontrollieren, stehen dem zentralen Nervensystem zwei Möglichkeiten zur Verfügung: Zum einen können mehr oder weniger motorische Einheiten mit der Kontraktion „beauftragt“ werden, zum anderen kann die Frequenz, mit der die Motoneuronen elektrische Impulse an die Muskeln senden, variieren. In der Neurophysiologie werden nun vor allem die Mechanismen des zentralen Nervensystems untersucht, die zur Steuerung des Muskels beitragen. Alan L. Hodgkin und Andrew F. Huxley entwickelten 1952 ein biologisch fundiertes Modell zur Simulation eines Neurons und erhielten für ihre Entdeckungen 1963 den Nobelpreis für Medizin. Ihr Modell beschreibt die Entstehung und Ausbreitung von elektrischen Signalen in der Zellmembran von Neuronen. In erweiterter Form wird das Modell heute in Simulationen von neuronalen Netzwerken eingesetzt. Die Ausbreitung von elektrischen Signalen entlang der Muskelfasern funktioniert dabei ähnlich wie in den Neuronen, ist allerdings deutlich langsamer. In allen Muskelfasern einer stimulierten motorischen Einheit breitet sich ein elektrisches Signal von der motorischen Endplatte entlang der Muskelfasern zu deren Enden hin aus. Ähnlich dem Elektrokardiogramm (EKG) am Herzen, kann durch die Elektromyografie (EMG) die elektrische Aktivität des Muskels bestimmt werden. Werden die elektrischen Signale an der Oberfläche abgegriffen, spricht man von einem Oberflächen-EMG. Das elektrische Signal kann auch an einzelnen Positionen im Muskel mittels spezieller Nadelelektroden gemessen werden. Der Vorteil dieser Nadel-EMG-Messungen ist, dass sie präziser als Oberflächen-EMG-Messungen sind. Allerdings kann nur von einigen wenigen motorischen Einheiten gleichzeitig ein Signal

erfasst werden, da für jede motorische Einheit eine weitere Nadel in den Muskel eingebracht werden muss.

Das Oberflächen-EMG bildet im Gegenzug ein zusammengesetztes Signal ab, bei dem sich die elektrischen Signale verschiedener Fasern und motorischer Einheiten überlagern und der Ursprungsort des Signals sich daher oft nicht genau bestimmen lässt. Häufig werden bei Oberflächen-EMG-Messungen mehrere Elektroden nebeneinander angeordnet, um durch einen Vergleich der zeitlichen Aufzeichnungen der einzelnen Elektroden zusätzliche Informationen über die Aktivitäten der motorischen Einheiten gewinnen zu können. Ein Hauptproblem bei der experimentellen Bestimmung von EMG-Signalen ist ausgerechnet die Bewegung des Muskels bei



05

Berechnetes EMG-Signal an der Hautoberfläche (Spektrum links) und die Ausbreitung von Aktionspotentialen entlang von einzelnen Muskelfasern (Spektrum rechts).

der Kontraktion: So bewegen sich die Elektroden, die auf der Haut aufgebracht werden, bei einer Kontraktion nicht im gleichen Maße wie der kontrahierende Muskel. Vor allem bei dynamischen Kontraktionen, d. h., wenn eine Änderung der Muskellänge auftritt, sind EMG-Messungen oft unzuverlässig. Dennoch bilden experimentell bestimmte EMG-Signale derzeit die Grundlage, um Rückschlüsse auf die Kontrollmechanismen einzelner Skelettmuskeln zu ziehen. Die experimentell gewonnenen Erkenntnisse fließen dabei in neurophysiologische Modelle ein, die das koordinierte Verhalten der motorischen Einheiten eines Muskels und insbesondere der Motoneuronen simulieren.

2.4 Modellklassen

In der Biomechanik werden nun Skelettmuskelmodelle entwickelt, die die Kraft-erzeugung und Verformung eines Muskels bei der Kontraktion beschreiben. Grundlage hierfür sind insbesondere Methoden

der Kontinuumsmechanik [3], die es erlauben, die Ausbreitung elektrischer Signale entlang einzelner Muskelfasern in den Modellen zu berücksichtigen [4, 6]. Zusätzlich kann bei der biomechanischen Modellierung die Bewegung der Muskelfasern in einem sich verformenden Muskel sowie die systembiologische Beschreibung des Erregung-Kontraktion-Signalwegs einbezogen werden [4, 5, 6].

Werden nun die beschriebenen neurophysiologischen Neuronenmodelle mit biomechanischen Skelettmuskelmodellen gekoppelt, kann der gesamte Signalweg des neuromuskulären Systems, vom zentralen Nervensystem bis zur Kontraktion des Muskels, simuliert werden. Diese Synergie aus zwei bisher getrennten Forschungsgebieten erlaubt die Untersuchung einer Vielzahl von Fragestellungen, die bisher nicht betrachtet werden konnten, wie z. B. die Bestimmung virtueller EMG-Signale, die auf berechneten elektrischen Signalen in den Motoneuronen und der Ausbreitung der elektrischen Signale in den Muskelfasern beruhen – (04). In der Simulation kann nun auch die Bewegung des Muskels während der Kontraktion einberechnet werden, was mit neurophysiologischen Modellen allein nicht möglich ist. Damit ermöglichen Simulationen zum ersten Mal eine systematische Überprüfung der Methoden und biophysikalischen Modelle, die in der computerbasierten Neurophysiologie aus experimentell gewonnenen Daten abgeleitet werden.

3. Von Muskelkraftberechnungen zur Stabilisierung osteoporotischer Wirbelkörper

Um also Bewegungen durchzuführen, erzeugen Muskelkontraktionen wie beschrieben innere Kräfte, die ihrerseits auf das Skelett (Knochen) wirken. Dabei entstehen wiederum Belastungen auf die Knochen, die deren Gewebestruktur verändern. Hierbei wird altes Knochenmaterial abgebaut und durch neu aufgebautes Gewebe ersetzt. Steht dieser Prozess nicht im Gleichgewicht und wächst Knochengewebe in nicht ausreichender Menge nach, kommt es zu Knochenschwund und zur Abnahme der Knochendichte. Diese häufig im Alter auftretende Krankheit wird Osteoporose genannt und kann zu massiven Einschränkungen der Stabilität des gesamten Skeletts führen – nicht sel-

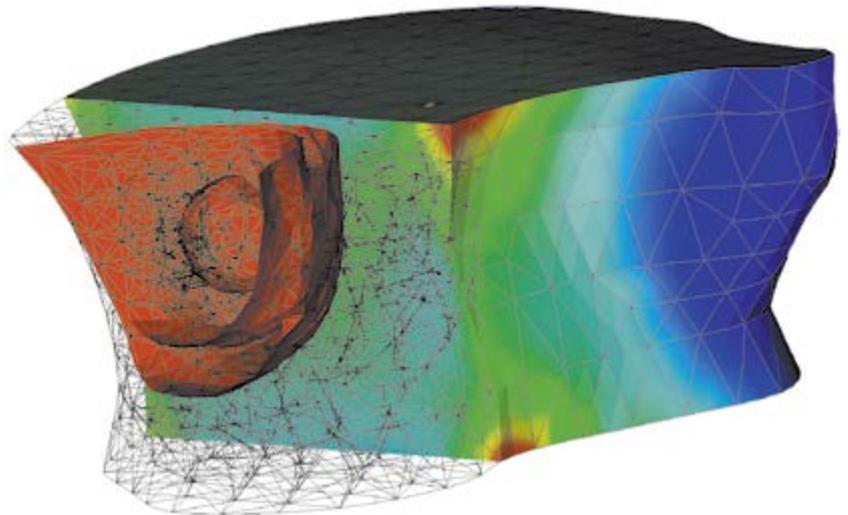
ten verbunden mit einer stark erhöhten Frakturanfälligkeit. Im Bereich der Wirbelsäule können die Schwächungen der Knochenstruktur etwa zu sogenannten Sinterungsbrüchen der Wirbelkörper und zu schwerwiegenden Beschwerden der Betroffenen führen.

Eine Therapiemaßnahme zur Stabilisierung osteoporotischer Knochen der Wirbelsäule ist die Vertebroplastie, eine minimalinvasive Operation, bei der Knochenzement in den Wirbelkörper injiziert wird. Nach dem Aushärten des flüssigen Knochenzements festigt dieser den osteoporotischen Wirbelkörper. Bei der Operation muss insbesondere darauf geachtet werden, dass kein Injektionsmaterial aus dem Wirbelkörper austritt, da dies gravierende Folgen, wie z. B. eine Schädigung des Rückenmarks, haben könnte.

Die numerische Simulation der Vertebroplastie [7] kann dabei helfen, derartige Komplikationen während des Eingriffs zu vermeiden und die Ausbreitung des Knochenzements innerhalb des Wirbelkörpers besser vorherzusagen. Ziel ist es hierbei, den Operationsablauf zu optimieren, indem Faktoren wie die Lage der Injektionsnadel, die Wahl des Knochenzements und der notwendige Injektionsdruck in präoperativen Simulationen getestet werden können. Dies bietet den operierenden Ärzten die Möglichkeit, einerseits Risiken schon im Vorfeld realistisch abzuschätzen und andererseits das bestmögliche Therapieergebnis zu erreichen. Ein weiteres Ziel bei der Simulation von Vertebroplastie ist es, ein tiefgehendes Verständnis über die entstehenden Kräfte und Drücke innerhalb des Wirbelkörpers während der Knochenzementinjektion zu erfahren. Damit lassen sich Vorhersagen treffen, ob die vorhandene trabekuläre Knochenstruktur durch die entstehenden Spannungen deformiert oder zerstört wird.

Wie effektiv und allgemeingültig solche Simulationen sind, hängt nicht zuletzt vom gewählten Modellierungsansatz ab. So kann die Simulation der Vertebroplastie wahlweise auf der Mikro- oder Makroskala erfolgen. Ein makroskopischer, kontinuumsmechanischer Modellierungsansatz auf der Basis der Finite-Elemente-Methode bietet hierbei große Vorteile hinsichtlich der Rechengeschwindigkeit. Dies ist ein entscheidender Schritt in Richtung Echtzeitsimulationen, mit denen der operierende Arzt während des Eingriffs jeder-

zeit neue Szenarien, wie das Verändern der Injektionsnadelposition oder das Variieren der Knochenzementviskosität, durchspielen und so das Operationsergebnis optimieren könnte. Momentan benötigen die Computersimulationen noch mehrere Stunden, wodurch der Fokus der Berechnungen darauf liegt, zuverlässige Vorhersagen zu treffen. Hierfür ist neben der korrekten Modellformulierung vor allen Dingen die genaue Kenntnis von Materialparametern gefragt, was insbesondere bei der Simulation biologischer Materialien



Zementausbreitungsfrent für einen bestimmten Zeitpunkt (in rot) und Spannungszustände im restlichen Wirbelkörper, die durch die Zementinjektion entstanden sind.

eine große Herausforderung darstellt. Für eine operationsbegleitende Computerberechnung werden zudem Kenntnisse über die ganz spezifischen Materialeigenschaften der individuellen Patienten benötigt. In einer kontinuumsmechanischen Strömungssimulation der Vertebroplastie sind dies vor allem die Permeabilitäten (Durchlässigkeiten) des Wirbelkörpers. Die trabekuläre Knochenstruktur ist stark anisotrop, d. h., ihre Eigenschaften sind richtungsabhängig und variieren besonders im Fall von Osteoporose und individuell abgebauter Knochenstruktur stark. Daher reicht es auch nicht aus, allein Literaturwerte zu verwenden, sondern die Materialeigenschaften müssen personenspezifisch für den Einzelfall ermittelt werden. Mit Hilfe der Theorie Poröser Medien (TPM) [8] lässt sich nun ein umfangreiches Kontinuumsmodell aufbauen, welches die genannten Anforderungen an eine aussagekräftige Simulation der Knochenzement-einspritzung sehr gut erfüllt. In diesem Ansatz werden beschreibende Gleichun-

gen für drei Konstituierende aufgestellt: Das Festkörperskelett des Knochens, den eingespritzten Knochenzement sowie das Knochenmark, welches den Knochen zu Beginn ausfüllt. Diese Gleichungen werden vollständig gekoppelt gelöst, was eine Betrachtung von Interaktionen zwischen den „Flüssigkeiten“ – also dem Mark bzw. Zement – sowie zwischen Festkörper (Knochen) und Fluiden erlaubt. Es können hiermit Verdrängungsvorgänge der beiden Fluide gemeinsam mit den resultierenden Spannungen und Deformationen des Knochenskeletts simuliert werden.

Die eingangs beschriebenen Bewegungssimulationen dienen in einem erweiterten Menschmodell (Kombination aus Mehrkörper- und Vertebroplastiemodell) der Bestimmung von Belastungen auf die Wirbelkörper. Die genaue Kenntnis über (mögliche) auftretende Belastungen ist essenziell für eine erfolgreiche Vertebroplastie. Daher kann das erweiterte Menschmodell eine Entscheidungshilfe für die Durchführung und den Erfolg einer bestimmten Operationsmethode liefern. Die größten Hürden, die es bis zum routinisierten Einsatz im OP zu überwinden gilt, sind hierbei die Rechenzeit, die Bestimmung von patientenspezifischen Materialparametern und die Validierung.

Für ein besseres Verständnis der Remodellierungsprozesse in der Knochenstruktur, die eventuell zu Osteoporose im Wirbelkörper führen, müssen verschiedene Modelle von der Zellebene bis zur Organebene gekoppelt werden. Wie ausgeführt, passt sich die interne Knochenstruktur permanent den lokal wirkenden Belastungen an: So wird die Knochenmatrix in Bereichen mit hoher Belastung auf-, und in Bereichen mit niedriger Belastung abgebaut. Bereits 1892 erforschte Julius Wolff dieses Prinzip auf der Organebene und begründete damit die moderne Orthopädie. Auf der Gewebeebene wiederum dient das Prinzip heute als Grundlage für die Simulation von Knochenstrukturänderungen. Darüber hinaus können aber auch zelluläre Prozesse, die die Zusammenarbeit mehrerer verschiedener Zellarten beschreiben, in Simulationen der Knochenremodellierung berücksichtigt werden. Dabei wird zunächst die vorhandene Zellmatrix durch mehrkernige Zellen, sogenannte Osteoklasten, entfernt, und anschließend neues Gewebe von den speziell hierfür verantwortlichen Osteoblasten aufgebaut. Die Zusammen-

arbeit wird durch die Ausschüttung spezifischer Signalmoleküle reguliert. Diese Signalmoleküle aktivieren intrazelluläre Prozesse, die ihrerseits für die Steuerung der Remodellierung verantwortlich sind. Die wissenschaftliche Disziplin der Systembiologie konzentriert sich auf die Erforschung der zugrundeliegenden Signalwege. Das Versagen einzelner Signalwege kann fatale Folgen für den Organismus haben und Krankheiten auslösen. Die Synthese von zu wenig Knochenmatrix kann im Knochen selbst zu Osteoporose führen, ein Zuviel an Knochenmatrix, d. h. die unkontrollierte Synthese, kann indes zu Knochentumoren führen. Fallen zudem Signalwege aus, die für die Regulierung der Zellteilung verantwortlich sind, begünstigt dies die Entstehung von Tumoren.

4. Methodische Konzepte zur Untersuchung neuartiger Behandlungsstrategien von Tumorerkrankungen

Neben dem besseren Verständnis von Bewegungsabläufen, der daran beteiligten Prozesse und Komponenten sowie der entstehenden inneren Kräfte und Belastungen sind Erkenntnisse über die Strömungs- und Transportprozesse im menschlichen Körper von großer Bedeutung für die Entwicklung eines ganzheitlichen Menschmodells. Über die Blut- und Lymphgefäße sowie die Gewebsflüssigkeit werden Sauerstoff, Nährstoffe, Hormone und Medikamente im Organismus verteilt. Um Vorhersagen über die Ausbreitungsprozesse und Wirkungsweisen verschiedener Therapeutika zu treffen, werden Methoden der Strömungsmechanik mit systembiologischen Ansätzen kombiniert.

Nach Herz-Kreislauf-Erkrankungen stellen Tumor-Erkrankungen die häufigste Todesursache in den westlichen Industrieländern dar. Noch immer werden praktisch alle Tumorpatienten chirurgisch und/oder chemo- bzw. strahlentherapeutisch behandelt. Eines der Hauptmerkmale neuer therapeutischer Ansätze ist eine zielgerichtete, selektive Wirkung des Therapeutikums unter weitgehender Vermeidung der oft therapielimitierenden, allgemeinen Toxizität konventioneller Therapieverfahren. Dazu werden innerhalb von SimTech zwei verschiedene Ansätze für Gehirntumore und Lungentumore verfolgt.

Eine vielversprechende Methode zur Behandlung von tiefsitzenden und besonders bösartigen Gehirntumoren stellt die invasive, extravaskuläre therapeutische Infusion dar (Convection-Enhanced Drug Delivery). Im Vergleich zu einer intravasculären Verabreichung hat dieses neuartige Verfahren den Vorteil, dass Medikamente mittels eines Katheters gezielt verabreicht werden können. Außerdem wird es mit diesem Vorgehen möglich, die sogenannte Blut-Hirn-Schranke, die eine äußerst restriktive Begrenzung für den Transport therapeutischer Makromoleküle durch die Blutgefäßwände in das Hirngewebe darstellt, zu umgehen. Die Simulation, wie sich das einzelne Medikament im Hirngewebe verteilt, ist äußerst anspruchsvoll, da die Ausbreitung stark durch den komplexen Aufbau des Gewebes beeinflusst wird. In diesem Zusammenhang werden in einem makroskopischen TPM-Modell [8] u. a. die zugrundeliegenden mikrostrukturellen Eigenschaften berücksichtigt, aus denen sich räumlich variierende, anisotrope Durchlässigkeiten ergeben. Diese Informationen lassen sich aus bildgebenden Verfahren (z. B. Diffusion-Tensor Imaging) im Vorfeld für den Einzelfall ermitteln und fließen in die Berechnungen ein. Im Gegensatz zum vorher besprochenen Vertebroplastie-Modell besitzt dieses Modell neben einem elastisch deformierbaren Festkörper (bestehend aus Nerven- und Stützzellen sowie Gefäßwänden) noch zwei mobile aber voneinander getrennte flüssige Konstituierende. Dabei handelt es sich um das Blut im Blutgefäßsystem und die interstitielle Flüssigkeit im Interstitium, also die im Zwischenraum des Gewebes vorkommende Flüssigkeit. Diese Interstitium-Flüssigkeit wird für die hier betrachtete Problemstellung als reales Zweikomponentengemisch eines flüssigen Lösungsmittels und des gelösten therapeutischen Medikaments behandelt. Numerische Studien zur Medikamentenverteilung im Gehirngewebe – (07) – können im Vorfeld von geplanten Operationen eine erfolgreiche Durchführung unterstützen. Das Gehirn ist aufgrund der besonders undurchlässigen Blut-Hirn-Schranke ein Sonderfall unter den Organen. In anderen Organen, wie z. B. der Lunge, sind Therapieansätze basierend auf der intravasculären Injektion von Medikamenten durchaus erfolgsversprechend. Besonders aussichtsreich ist dabei die Applikation

ZUSAMMENFASSUNG

Seit über tausend Jahren ist der Mensch auf der Suche nach einem besseren Verständnis seines eigenen Körpers. Während sich Forscherinnen und Forscher in der Vergangenheit vor allem mit (bio-) physikalischen Experimenten der komplexen Struktur und Funktionsweise des Körpers zu nähern versuchten, bietet die Simulationstechnologie heute gänzlich neue Möglichkeiten, um ein tiefer gehendes Verständnis von Zellen, Organen oder gar dem ganzen Körper zu erarbeiten. Dies gilt insbesondere für die Phänomene, die aus ethischen Gründen nicht direkt am lebenden Menschen untersucht werden können. Daher verfolgt der Exzellenzcluster SimTech die Vision, ein umfassendes Menschmodell zu entwickeln, mithilfe dessen sich z. B. die zu Grunde liegenden Mechanismen für alltägliche Bewegungsabläufe wie dem Gehen untersuchen lassen. Mithilfe so eines Menschmodells ist gleichfalls die Entwicklung neuer chirurgischer Verfahren denkbar, wie etwa die Injektion von Knochenzement in den Rückenwirbel um so die mechanische Funktionalität der Wirbelsäule wiederherzustellen. Ein weiterer Fokus der hier vorgestellten Arbeiten liegt auf der Analyse methodischer Konzepte und Strategien für die Krebsbehandlung.



Zeitlicher Verlauf der Ausbreitungsfreie des therapeutischen Wirkstoffes bei der invasiven Tumorbehandlung im Gehirn infolge einer direkten Verabreichung mit Hilfe eines Katheters.

wachstumshemmender und/oder zelltod-induzierender Substanzen, die direkt auf die Tumorzelle oder aber auf das einen soliden Tumor versorgende Blutgefäßsystem oder Stroma wirken. Weltweit arbeiten Forscherinnen und Forscher an der Entwicklung eines ganzheitlichen mathematischen Modells, das das Verhalten eines Proteinwirkstoffs im Körper von der Applikation bis hin zum molekularen Wirkmechanismus beschreibt. Und nicht nur das: So ein Modell soll zudem prädiktiven Charakter besitzen und so dazu beitragen, schneller eine gezielte Verbesserung des Therapeutikums bzw. der Behandlungsstrategie zu erreichen.

Ein mathematisches Modell, das die Verteilung und Wirkung eines tumorselektiven Antikörpers in einem Gesamtorganismus zu beschreiben vermag, muss eine hierarchisch aufgebaute, modulare Mehrskalenstruktur aufweisen. Die drei wesentlichen Skalen eines solchen Menschmodells sind:

1. die Ebene des Organismus mit unterschiedlichen Kompartimenten, in die die Wirkstoffsubstanz ein- und wieder austreten kann, wie Blutsystem, Tumor, Organe;

2. die **Organebene** mit unterschiedlichen Kompartimenten, wie z. B. dem vaskulären System, dem Interstitium und möglicherweise eingelagerten Karzinomen;
3. die **Zellebene** mit z. B. malignen Tumorzellen, Stromazellen oder Tumorendothelzellen, an deren spezifische Membranrezeptoren der eigentlich Wirkstoff im Therapeutikum bindet und so seine Wirkung entfaltet.

Auf den verschiedenen Skalen können Modelle mit unterschiedlichem Abstraktionsgrad verwendet werden. Erkenntnisse, Informationen und Parameter, die auf den jeweiligen Skalen ermittelt werden, finden

Eingang in die Modelle anderer Ebenen. Die Implementierung und die methodischen Kopplungen, die innerhalb von SimTech vorangetrieben werden, sind beispielhaft für die Lunge in (08) dargestellt. Gezeigt wird die Entwicklung eines Mehrskalenmodells zur

Beschreibung der Fluss-, Transport- und Reaktionsprozesse in der menschlichen

Lunge zur Behandlung eines Alveolarkarzinoms mit einem tumorselektiven zytostatischen Therapeutikum

(scFv-TRAIL) [9]. Auf der Organebene wird die Ausbreitung des Medikaments im Blutgefäßsystem simuliert. Dazu wird das komplizierte System der größeren Blutgefäße in einem Graphenmodell vereinfacht. In den kleinsten Gefäßen, den Kapillaren, tritt das Medikament in das umliegende Gewebe über, wo es sich weiter ausbreitet. (09) und (10) zeigen die Fluss-, Transport- und Reaktionsprozesse in einem möglichen Lungensystem. Die Konzentrationsverteilung im Tumorgewebe ist das Ergebnis der Modelle auf Organ- und Gewebsebene und gleichzeitig eine Eingangsgröße für Modelle, die das Verhalten auf der nächstkleineren Skala beschreiben. Mit systembiologischen Einzelzellmodellen wird die Reaktion einzelner Zellen auf das Therapeutikum vorhergesagt. Dabei werden der Bindungsprozess des Therapeutikums an die entsprechenden Rezeptoren sowie der Signaltransduktionsweg innerhalb der Zelle modelliert. Mit Hilfe eines Zellpopulationsmodells kann darauf basierend die Sterberate einer heterogenen Population von Tumorzellen vorhergesagt werden.

Wegen des großen medizinischen Bedarfs an besseren Therapeutika bei gleichzeitig extrem langwieriger und aufwendiger Prüfung neuer Wirkstoffe ist das Interesse an prädiktiven mathematisch-numerischen Modellen nicht nur aus Sicht der Patienten und der behandelnden Ärzte, sondern auch von Seiten der pharmazeutischen Industrie sehr groß.

Die beschriebenen, anwendungsspezifischen Menschmodelle konnten nur durch die Verknüpfung von verschiedenen Teilmodellen verwirklicht werden. Um das Verhalten eines Organs oder gar des Organismus adäquat zu beschreiben, müssen mehrere Ebenen betrachtet und zu Multiskalenmodellen zusammengeschlossen werden. Anwendungsspezifische Multiskalenmodelle, wie sie in diesem Beitrag dargestellt wurden, sind der erste Schritt zu einem ganzheitlichen Menschmodell. Auf diesem Weg nähern sich Forscherinnen und Forscher in SimTech nach und nach der Vision des „Overall Human Model“.

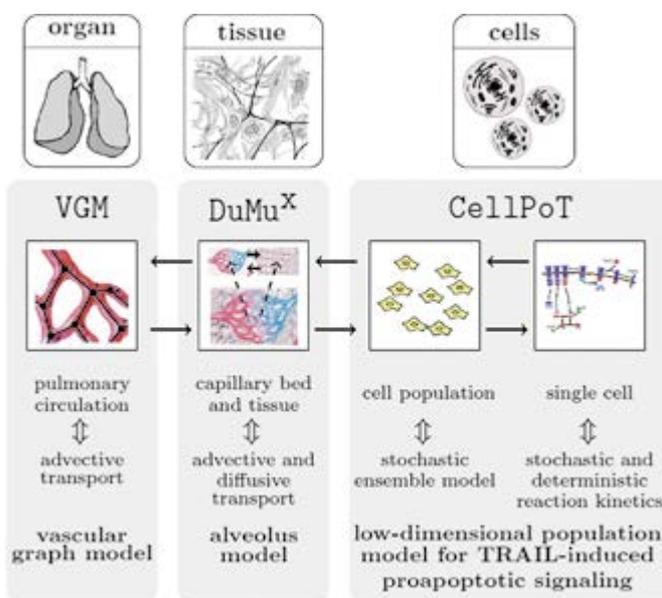
Oliver Röhrle, Syn Schmitt,

Arndt Wagner, Tille Rupp,

Thomas Heidlauf, Christian Bleiler,

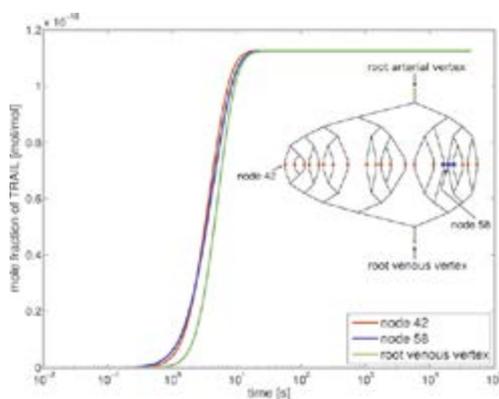
Katherina Baber, Rainer Helmig,

Wolfgang Ehlers



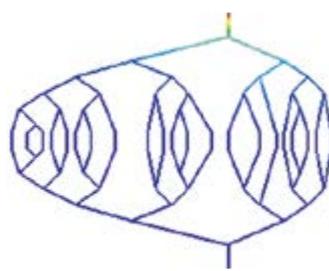
08

Mehrskalenmodell zur Beschreibung der Fluss-, Transport- und Reaktionsprozesse eines Therapeutikums in der menschlichen Lunge.



09

Zeitliche Entwicklung der Medikamentenkonzentration am Übergang von Kapillare zu Gewebe.



Ausbreitung des Medikaments im schematischen Modell des Blutgefäßsystems.

10

Literaturverzeichnis

- [1] Karajan, N., O. Röhrle, W. Ehlers und S. Schmitt (2013). „Linking continuous and discrete intervertebral disc models through homogenisation.“ *Biomechanics and Modeling in Mechanobiology* 12 (2013), 453-466.
- [2] Günther, M. und S. Schmitt (2010). „A macroscopic ansatz to deduce the Hill relation.“ *Journal of Theoretical Biology* 263(4): 407-418.
- [3] Röhrle, O. und A. J. Pullan (2007). „Three-dimensional finite element modelling of muscle forces during mastication.“ *Journal of Biomechanics* 40(15): 3363-3372.
- [4] Röhrle, O., J. B. Davidson und A. J. Pullan (2012). „A physiologically based, multi-scale model of skeletal muscle structure and function.“ *Front Physiol* 3: 358.
- [5] Röhrle, O., M. Sprenger, E. Ramasamy und T. Heidlauf (2013). *Multiscale Skeletal Muscle Modeling: From Cellular Level to a Multi-segment Skeletal Muscle Model of the Upper Limb. Computer Models in Biomechanics.* G. A. Holzapfel und E. Kuhl, Springer Netherlands: 103-116.
- [6] Heidlauf, T. und O. Röhrle (2013) „Modeling the chemoelectromechanical behavior of skeletal muscle using the parallel open-source software library OpenCMISS.“ *Computational and Mathematical Methods in Medicine*, doi 10.1155/2013/517287.
- [7] Wagner, A., C. Bleiler, V. Stadelmann, M. Windolf, B. Gueorguiev-Rüegg, H. Köstler, A. Boger, O. Röhrle und W. Ehlers. „Porous-media simulation of bone-cement spreading during vertebroplasty.“ *Proceedings in Applied Mathematics and Mechanics*.
- [8] Ehlers, W. und A. Wagner (2013). „Multi-component modelling of human brain tissue - a contribution to the constitutive and computational description of deformation, flow and diffusion processes with application to the invasive drug-delivery problem.“ *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, online first.
- [9] Erbertseder, K., J. Reichold, B. Flemisch, P. Jenny und R. Helmig (2012). „A Coupled Discrete/Continuum Model for Describing Cancer-Therapeutic Transport in the Lung.“ *PloS one* 7 (3): e31966.

Kontakt

Universität Stuttgart
Institut für Mechanik (Bau)
Pfaffenwaldring 5
D-70569 Stuttgart
Tel.: +49 (0)711 685-66284
Fax: +49 (0)711 685-66347
E-Mail: roehrle@simtech.uni-stuttgart.de
Internet: www.mechbau.uni-stuttgart.de/
ls2/jrg/

DIE AUTOREN

**PROF. OLIVER RÖHRLE,
PHD,**

studierte an der Universität Ulm Wirtschaftsmathematik und promovierte an der University of Colorado at Boulder im Bereich der Angewandten Mathematik. Vor seiner Berufung nach Stuttgart arbeitete er

als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Auckland Bioengineering Institute an der University of Auckland in Neuseeland. In Stuttgart war er zunächst SimTech-Juniorprofessor für „Continuum Biomechanics and Mechanobiology“, ehe er 2013 zum Professor berufen wurde.

**JUN.-PROF. DR. RER. NAT.
SYN SCHMITT**

studierte Physik und Sport an der Universität Stuttgart. Nach seinem Diplom in Physik wurde er von der naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Tübingen mit einer Arbeit über die Biomechanik der

Muskeln promoviert. Seit 2012 ist Schmitt Juniorprofessor und Leiter der Abteilung für Modellierung und Simulation im Sport.

ARNDT WAGNER

studierte von 2001 bis 2006 an der Universität Stuttgart Bauingenieurwesen. Seitdem ist er als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Kontinuumsmechanik des Instituts für Mechanik (Bauwesen) ange-

stellt, wo er seit Oktober 2013 als Akademischer Rat tätig ist.

TILLE RUPP

ist gebürtige Hanseatin. Sie studierte Elektrotechnik an der Dualen Hochschule Baden-Württemberg in Kooperation mit der Robert Bosch GmbH sowie Mathematik, Physik und Sportwissenschaft an der Uni-

versität Stuttgart. Nach dem erfolgreichen Abschluss beider Studiengänge begann sie 2009 ihre Promotion im Bereich der Computersimulation in der Biomechanik. Hierbei entwickelt sie ein Mehrkörpermodell der menschlichen Wirbelsäule.

THOMAS HEIDLAUF

studierte an der Universität Stuttgart Umweltschutztechnik und ist seit 2009 wissenschaftlicher Mitarbeiter in der SimTech-Forscherguppe „Continuum Biomechanics and Mechanobiology“. Er beschäftigt

sich mit der mathematischen Modellierung des neuromuskulären Systems.

CHRISTIAN BLEILER

studierte bis 2012 Bauingenieurwesen an den Universitäten Karlsruhe und Stuttgart und promovierte seit 2013 in der SimTech-Forschungsgruppe „Continuum Biomechanics and Mechanobiology“.

KATHERINA BABER

studierte Umweltschutztechnik an der Universität Stuttgart und promovierte seit 2009 am Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung. Sie entwickelt Modelle für Austauschprozesse zwischen Blutgefäßsystem und Gewebe sowie für die Tropfenbildung in Brennstoffzellen.

an der TU Braunschweig. Anschließend übernahm er den Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung an der Universität Stuttgart, wo er heute noch tätig ist.

**PROF. DR.-ING.
RAINER HELMIG**

ist gebürtiger Westfale. Er studierte und promovierte in Bauingenieurwesen an der Universität Hannover. Nach der Habilitation in Stuttgart leitete er bis 2000 das Institut für Computeranwendungen im Bauwesen

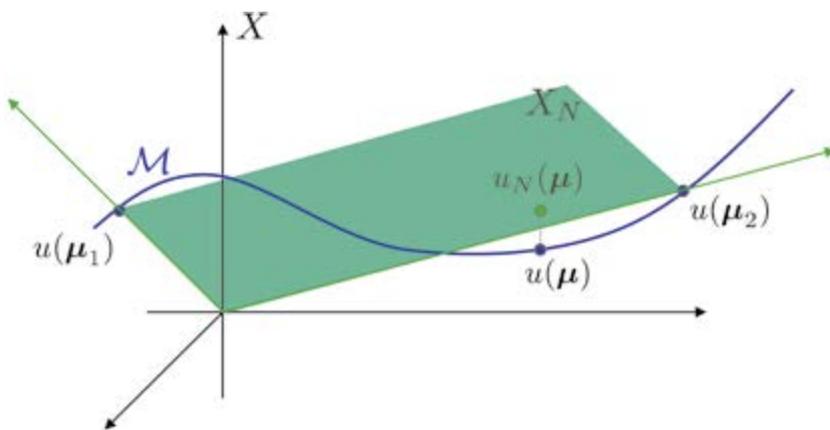
an der TU Braunschweig. Anschließend übernahm er den Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung an der Universität Stuttgart, wo er heute noch tätig ist.

**PROF. DR.-ING.
WOLFGANG EHLERS**

ist seit März 1995 als ordentlicher Professor für Kontinuumsmechanik an der Universität Stuttgart tätig. Seit 2007 ist er der Geschäftsführende Direktor des „Stuttgart Research Centre for Simulation Techno-

logy“ und Sprecher des Exzellenzclusters „Simulation Technology“. Seit 2013 ist er der Präsident der Internationalen Gesellschaft für Poröse Medien (InterPore) und seit 2014 der Präsident der Gesellschaft für Angewandte Mathematik und Mechanik (GAMM).

Mathematik als Innovator der Simulationstechnik – Simulationstechnik als Innovator der Mathematik



Dieser Beitrag stellt die Bedeutung der Mathematik für den gesamten Simulationszyklus heraus und gliedert sich in die Kernthemen Mathematische Modellierung, Numerische Simulation sowie Optimierung und Steuerung. Dabei soll aufgezeigt werden wie die Anforderungen aus den Anwendungen neue mathematische Fragen stimulieren und die Grenzen zwischen reiner und angewandter Mathematik verschwimmen lassen.

1. EINLEITUNG

Die großen Herausforderungen der Simulationstechnik entstammen den Natur- und Ingenieurwissenschaften. Die Lösungen der dort aufkommenden Fragen sind nur in der interdisziplinären Zusammenarbeit mit methodisch orientierten Querschnittswissenschaften wie Informatik und Mathematik möglich. Was ist eigentlich genau

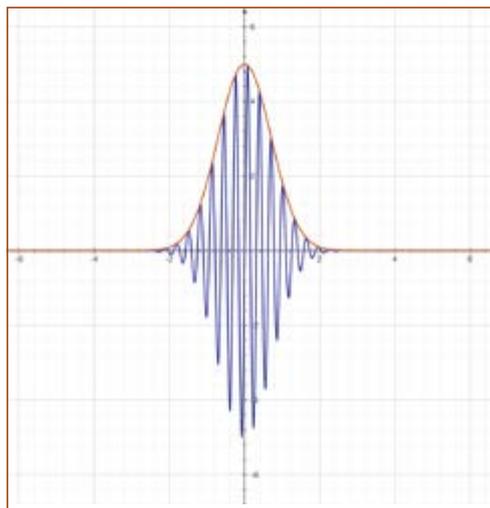
deren Rolle und wie kann eine abstrakte Wissenschaft wie Mathematik hier nützlich sein? Ausgehend von einem Anwendungsproblem gliedert sich der klassische Ansatz der Simulationstechnik in die Schritte *Modellierung – Numerische Simulation – Visualisierung, Validierung und Interpretation*. Vor allem bei den ersten beiden Schritten kommen Teilgebieten der Mathematik, wie Angewandte Analysis und Numerik,

eine Schlüsselrolle zu. Heute möchte man über die reine Simulation eines Prozesses hinausgehen. Aufgrund der Simulationsergebnisse sollen vor allem in technischen Anwendungen die Eingangsparameter optimiert oder – noch ambitionierter – soll der ganze Prozess aktiv gesteuert und kontrolliert werden. Dazu ist die mathematische *Optimierung* und *Systemtheorie* unerlässlich. Ein etwas anders gelagertes Problem ist die Parameteridentifikation. Oft sind die Eingangsparameter nicht exakt bekannt und können auch nicht direkt gemessen werden. Ein Ziel der Simulation ist es, die Parameter a-posteriori zu bestimmen. Dieser Aufgabe widmet sich die mathematische Disziplin der *Inversen Probleme*. Auf allen genannten Gebieten trägt die Stuttgarter Mathematik zum Erfolg des Exzellenzclusters „Simulation Technology“ bei und insbesondere in Stuttgart forciert der Exzellenzcluster die Entwicklung der Mathematik in vielen Bereichen in Richtung einer algorithmisch- und problemorientierten Wissenschaft.

2. MODELLIERUNG

Die unterschiedlichen Fachdisziplinen haben völlig unterschiedliche Ansichten darüber, was ein Modell ist. Oft hat die fachspezifische Fassung dieses Begriffs wenig mit Mathematik zu tun. Die mathematische Modellierung mit partiellen Differentialgleichungen hat sich erst in den letzten Jahren als ein eigenständiges Forschungsgebiet innerhalb der Mathematik etabliert, dessen Grenzen immer noch nicht genau festzulegen sind. Im Rahmen des Simulationszyklus ist mathematische Modellierung auf zwei Ziele ausgerichtet. Einerseits soll das mathematische Modell die Realität möglichst genau abbilden. Andererseits soll es so konstruiert sein, dass es einer effizienten numerischen Simulation zugänglich ist. Beide Ziele können in den seltensten Fällen widerspruchsfrei erreicht werden. Es ist die Hauptaufgabe der modernen Mathematischen Modellierung hier einen akzeptablen Kompromiss zu finden. Der Zielkonflikt wird besonders deutlich, wenn die aufzulösenden relevanten Objekte des Problems viel kleiner sind als die Abmessungen des zu betrachtenden Systems. Ein typisches Beispiel ist die Datenübertragung durch Lichtpulse in Glasfaserkabeln. Licht hat eine Wellenlänge von

10^{-7} Metern. Sollen die einzelnen Schwingungen numerisch aufgelöst werden, führt dies bei einem Glasfaserkabel von hundert Kilometern Länge allein für die räumliche Diskretisierung auf mehr als 10^{12} Punkte. Eine Größenordnung, die vor wenigen Jahren prinzipiell auch mit den schnellsten Rechnern nicht behandelbar war. Ist der Multiskalen-Charakter des Problems zunächst ein Fluch, so erweist er sich hier auch als Segen. Mittels Störungsrechnung lässt sich aus den zu Grunde liegenden Maxwellgleichungen die sogenannte Nichtlineare Schrödingergleichung herleiten. Dies führt auf eine Dimensionsreduktion von vielen Zehnerpotenzen. Die Nichtlineare Schrödingergleichung hat sich als eines der erfolgreichsten Modelle überhaupt erwiesen. Noch heute werden fast alle Simulationen dieser Technologie zur Datenübertragung anhand nichtlinearer Schrödingermodelle durchgeführt. Da es sich um ein abgeschlossenes System handelt, kann die Nichtlineare Schrödingergleichung gegenüber den Maxwellgleichungen mathematisch gerechtfertigt werden. Dies geschieht mittels analytischer Fehlerabschätzung. Eine numerische Rechtfertigung ist zum einen wegen des Aufwands im Original-



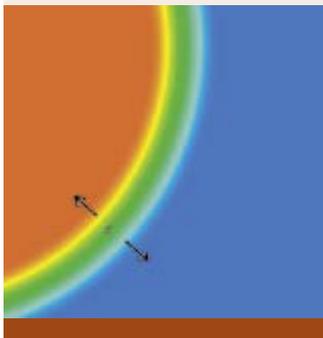
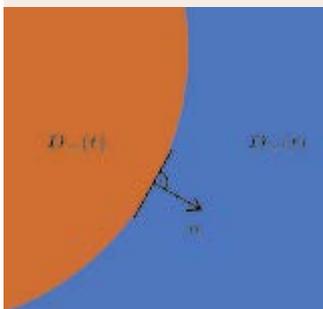
system und zum anderen wegen der Tatsache, dass so nur endlich viele Lösungen verglichen werden können, nicht möglich. Häufig werden weitere Terme zur Nichtlinearen Schrödingergleichung addiert, um Phänomene wie z.B. Dissipation zu beschreiben. Die so entstandenen Modelle sind rein phänomenologischer Art.

Die zeitlich und räumlich oszillierende Lösung (blau) einer nichtlinearen Wellen-/Maxwellgleichung beschreibt einen Lichtpuls und kann über die Dynamik der Einhüllenden (rot) näherungsweise effektiver beschrieben werden. Die Einhüllende entwickelt sich wie die Lösung einer Nichtlinearen Schrödingergleichung.

SHARP VERSUS DIFFUSE INTERFACE MODELLE IN DER STRÖMUNGMECHANIK

Ein sehr aktuelles Beispiel zur Beschreibung des Spannungsfeldes, in dem die mathematische Modellierung sich befindet, ist die Entwicklung der Modellierung von mehrphasigen Strömungen. Auf den ersten Blick könnte man meinen, dass die Modellierung in diesem Bereich eigentlich ihren Abschluss im neunzehnten Jahrhundert gefunden hat. Man unterteilt das betrachtete Gebiet einfach in einen Anteil, in dem das Fluid in flüssiger Phase und einen, in dem es in dampfförmiger Phase vorliegt. Für einen stationären sphärischen Flüssigkeitstropfen mit Radius $r > 0$, der von Dampf umgeben ist, haben schon 1805 Simon Young und Pierre-Simon Laplace herausgefunden, dass der Drucksprung über die Phasengrenze proportional zur Krümmung ist. Später haben Josiah Willard Gibbs und William Thomson (Lord Kelvin) eine weitere thermodynamische Spungbedingung formuliert, die eine vollständige analytische Lösung des stationären Falls ermöglicht. Diese beiden Bedingungen lassen sich auch auf zeitabhängige Strömungen mit Phasenübergang übertragen, wobei die Dynamik der Strömung durch die (kompressiblen) Navier-Stokesgleichungen beschrieben werden kann. Da dieses Modell den Phasenübergang als Unstetigkeit in der Dichtekonfiguration beschreibt, spricht man auch von einem *Sharp-Interface-Modell*. Im Bereich der

Numerik für kompressible Strömungen hat es nun in den letzten beiden Jahrzehnten riesige Fortschritte gegeben, so dass man heute zumindest einphasige Probleme effizient lösen kann. Im zweiphasigen Problem sind aber nicht nur das Dichte-, Temperatur und das Geschwindigkeitsfeld unbekannt, sondern auch die Lage der Phasengrenze. Das numerische Verfolgen der Phasengrenze erweist sich schließlich als Flaschenhals für die gesamte Simulation. Dabei ist dies in erster Linie nicht ein Problem fehlender Computerleistung, vielmehr ist es bis heute nicht gelungen einen stabilen numerischen Lösungsalgorithmus zu finden. Schon kleinste Diskrepanzen zwischen der exakten Lage der Phasengrenze und ihrer numerischen Approximation führen zu massiven Oszillationen im Drucksprung und einem verhängnisvollen Fehler in der Young-Laplace Gleichung: Die Simulation muss abgebrochen werden. Die Sharp-Interface Modellierung ist aber nicht nur im Hinblick auf das Ziele einer effizienten numerischen Simulation kritisch. Spannender und technisch viel relevanter als die Dynamik einzelner Tropfen oder Blasen ist natürlich die Interaktion derselben. Wann und unter welchen Bedingungen vereinigen sich eigentlich zwei Blasen? Was passiert beim Aufprall zweier Tropfen? Eines ist dabei sicher: das Young-Laplace Gesetz



Scharfe Grenzschicht (oben) und diffuse Grenzschicht (unten).

Asymptotische Fehlerabschätzungen existieren nicht und im Originalsystem führen die entsprechend umgerechneten Terme zum Teil zu komplettem Unsinn. Ein weiteres Beispiel sind langwellige Wasserwellen wie z.B. Tsunamis. Hier können wieder mittels Störungsrechnung Näherungsgleichungen hergeleitet werden. Lange war unklar, ob irgend eine Ordnung in den Zoo der möglichen Näherungsgleichungen gebracht werden kann. Hier konnte die Mathematik helfen. Es lässt sich nämlich beweisen, dass zweidimensionale Oberflächenwellen im Langwellenlimit durch zwei entkoppelte Korteweg-

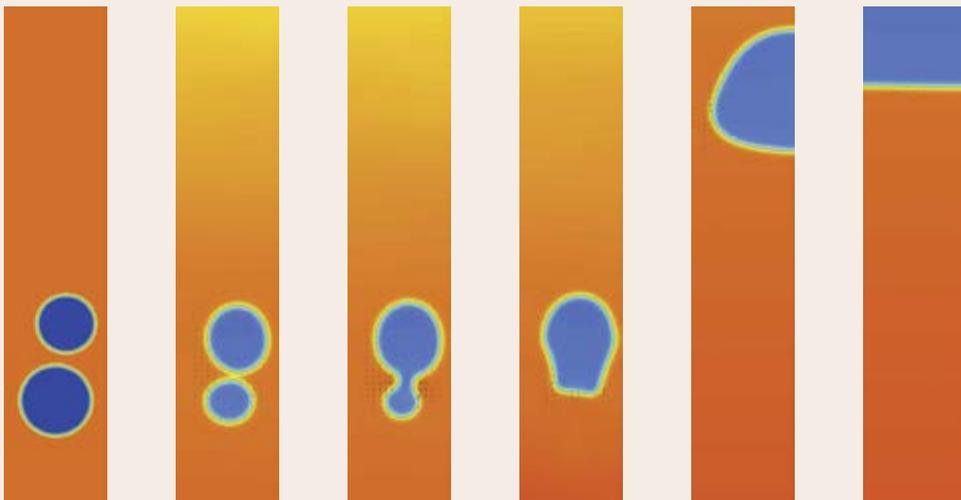
de-Vries-Gleichungen korrekt beschrieben werden. Die Korteweg-de-Vries-Gleichungen sind das einfachste Modell, welches unabhängig vom Störungsparameter ist. Alle anderen Näherungsgleichungen lassen sich asymptotisch durch sie ebenfalls korrekt beschreiben.

Das dritte Beispiel sind musterbildende Systeme, für welche in der Nähe der ersten Instabilität die sogenannte Ginzburg-Landau-Gleichung hergeleitet werden kann. Neben Fehlerabschätzungen lässt sich sogar zeigen, dass jede Lösung des Originalsystems, sich so entwickelt, dass sie nach einer bestimmten Zeit durch die

gilt zumindest in der elementaren Form nicht mehr; denn im Moment der Vereinigung ist die Krümmung und damit die Oberflächenenergie unendlich groß.

Diese Misere, die ganz analog auch bei anderen Phasenübergangsprozessen auftritt, war der Ausgangspunkt ganz neu über die mathematische Modellierung dieser Probleme nachzudenken. Einen neuen Ansatz lieferten dabei *Diffuse-Interface-Ansätze* oder auch Phasenfeldmodelle. Die Ausgangsidee ist verblüffend einfach. Wie die Bezeichnung schon nahelegt, ersetzt man die bisher als scharf vorausgesetzte Phasengrenze durch einen steilen aber glatten Übergang. Dies koppelt die beiden Phasengebiete automatisch, so dass die lästige Verfolgung der Phasengrenze entfällt. Und es wird noch viel besser. Die in der diffusen Grenzschicht enthaltene Energie kann selbst bei

topologischen Änderungen wie der Blasen-/Tröpfcheninteraktion kontrolliert werden, so dass das Modell auch in diesen Situationen gültig bleibt. Diese Vorteile haben *Diffuse-Interface-Modellierungen* sehr beliebt gemacht. Aber auch die Diffuse-Interface Modelle sind sicherlich nicht das Ende der Entwicklung. Zwar ergeben sich riesige Vorteile für die numerische Simulation, da man keine explizite Grenzfläche vorliegen hat. Gleichzeitig muss aber die zwar glatte, aber doch auf einen kleinen räumlichen Bereich beschränkte Übergangzone aufgelöst werden. Dies wäre selbst mit modernsten Rechnern nicht zu schaffen gewesen, wenn es nicht gleichzeitig im Bereich der Numerischen Mathematik, speziell beim Einsatz adaptiver Rechenmethoden und der Modellreduktion, Entwicklungssprünge gegeben hätte.



Simulation des Aufstiegs und der Vermischung zweier Dampfbläschen.

dazugehörige Ginzburg-Landau-Gleichung beschrieben werden kann. Es stellt sich aber heraus, dass nicht alle asymptotischen Modelle die Wirklichkeit richtig beschreiben. So hat sich die Forschung in den letzten Jahren auch darauf konzentriert, Gegenbeispiele zu finden, bei denen die Methode der Störungsrechnung bei Multiskalenproblemen versagt. Die großen Fortschritte bei den Simulationstechnologien haben hier neue Möglichkeiten eröffnet. Partielle Differentialgleichungen auf großen räumlichen Gebieten lassen sich effektiv parallel und auf Grafikprozessoren lösen. Diese Herangehensweise ist

durch eine Kooperation innerhalb von SimTech mit der Informatik stark motiviert. Obwohl sich so kein Beweis führen lässt, dass diese asymptotischen Modelle nicht korrekt sind, finden Anwendungswissenschaften solche Simulationen häufig überzeugender als einen mathematischen Beweis.

Auch bei neueren Entwicklungen wie der Beschreibung von Ultrakurzpulsen in der Spektroskopie oder der Untersuchung von Monsterwellen bedient man sich der Methode der asymptotischen Modelle. Vielfach stehen hier Untersuchungen ihrer Gültigkeit noch aus.

3. NUMERISCHE SIMULATION

Wie in den bisherigen Abschnitten beschrieben wurde, führt die mathematische Modellierung häufig auf ein System von partiellen Differentialgleichungen. Die gesuchte Lösung dieses Systems ist nicht ein einfacher Zahlenwert, sondern eine orts- und zeitvariante Funktion, d.h. eine Funktion, welche von den Ortskoordinaten (x, y, z) und der Zeit t abhängt. Explizite Lösungsformeln für Lösungen partieller Differentialgleichungen gibt es nur in den seltensten Fällen. Daher wird das mathematische Modell durch ein *diskretes Modell* ersetzt, dessen Lösung numerisch berechnet werden kann. Die *diskrete Lösung* ist i.A. ebenfalls eine orts- und zeitvariante Funktion, welche jedoch bereits durch N Zahlenwerte, die sogenannten *Koeffizienten*, eindeutig bestimmt ist. Die Berechnung der diskreten Lösung reduziert sich damit auf die Berechnung dieser N Koeffizienten und man kennt dann die gesamte diskrete Lösung. Insbesondere kann man diese an beliebig gewählten Punkten auswerten, um sie z.B. grafisch darzustellen. Wir erleben dies tagtäglich bei der Wettervorhersage im Fernsehen, in der uns die diskrete Lösung eines Wettermodells in grafisch aufbereiteter Form Informationen über das Wetter der kommenden Tage gibt. Dieses einfach erscheinende Vorgehen ergibt viele spannende und anspruchsvolle Fragestellungen in der *Numerischen Mathematik*. Eine ihrer Hauptaufgaben ist das Design und die Analyse von Algorithmen, die bei der *Diskretisierung* von Differentialgleichungen eingesetzt werden.

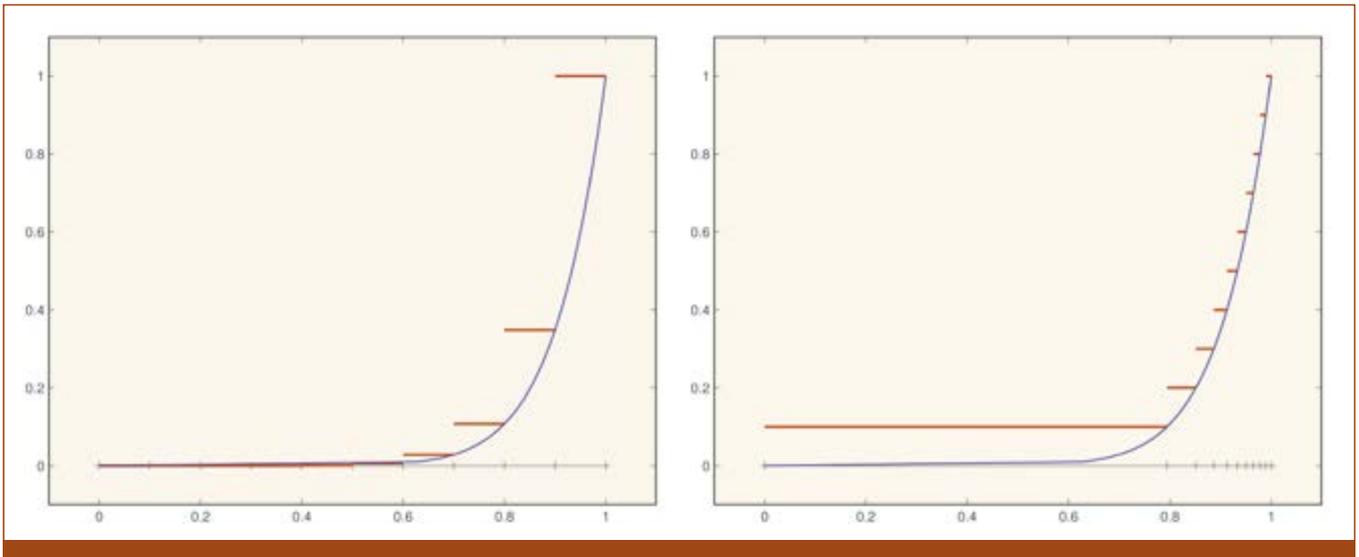
Da wir das mathematische Modell durch ein diskretes Modell ersetzt haben, stimmen die exakte und diskrete Lösung nicht überein. Die diskrete Lösung ist nur eine Näherung an die exakte Lösung. Aufgabe der *numerischen Analysis* ist es, Abschätzungen für den Abstand zwischen diskreter und exakter Lösung zu geben. Solche Abschätzungen sind ein Maß für die Qualität der diskreten Lösung. Haben wir ein „gutes“ diskretes Modell gewählt, so verbessert sich diese Qualität, wenn wir N groß wählen, und für $N \rightarrow \infty$ „konvergiert“ die diskrete Lösung gegen die exakte Lösung. Wichtig hierbei ist die Stabilität des Modells. Das Verständnis, welches die Mathematik von *Stabilität* hat, kann (ohne eine exakte Definition zu geben) wie folgt motiviert werden. Beobachten wir bei der

Wettervorhersage starken Hochdruckeinfluss, so trifft die Prognose meist für einen Zeitraum von mehreren Tagen zu, und dies bezeichnen wir als stabil. Ist das aktuelle Wetter durch verschiedene Tiefs geprägt, so ist die Vorhersage oftmals nur für den kurzen Zeitraum von einem Tag verlässlich. Dies ist ein instabiles Verhalten.

Die praktische Berechnung der Koeffizienten auf einem Computer benötigt effiziente Algorithmen, die in der *Numerischen Algebra* entwickelt und analysiert werden. Eine besondere Herausforderung sind Algorithmen für große nicht-lineare Gleichungssysteme mit deren Hilfe die N Koeffizienten der diskreten Lösung berechnet werden. Typische Werte von N liegen dabei zwischen $N = 10^5$ und $N = 10^{12}$, um eine gute Qualität der berechneten Lösung zu gewährleisten. Bis $N \approx 10^6$ ist eine Berechnung auf einem normalen Computer oder Laptop in akzeptabler Zeit möglich. Ab $N \approx 10^7$ kann das diskrete Modell nur noch auf einem Rechencluster mit einer Vielzahl von Prozessoren und Kernen gelöst werden. Dies erfordert den Einsatz von skalierbaren, parallelen Algorithmen. Hier beobachten wir einen typischen Interessenkonflikt der Numerischen Mathematik, der durch den Entwurf und die Analyse geeigneter Verfahren gelöst werden muss. Eine gute Qualität der diskreten Lösung benötigt ein möglichst großes N , während eine schnelle Berechnung ein möglichst kleines N erfordert. Im Folgenden stellen wir zwei Verfahrensklassen vor, die im Rahmen von SimTech intensiver untersucht wurden.

3.1 Adaptive Approximation

So wie Albert Einstein Gedankenexperimente bei der Herleitung der Relativitätstheorie anstellte, betrachten wir die folgende, einfache Aufgabe. Eine gegebene Funktion u ist auf dem Intervall $[0, 1]$ durch eine stückweise konstante Funktion U auf einer Zerlegung von $[0, 1]$ mit $N + 1$ Stützstellen und N Elementen zu approximieren. Im einfachsten Fall wählt man die Stützstellen äquidistant und alle Elemente haben die gleiche Länge N^{-1} . Dies ist die *uniforme Approximation (04a)*. Man kann zeigen, dass der maximale Abstand zwischen U und u kleiner als CN^{-1} ist, sofern die Ableitung von u beschränkt ist. Dabei hängt die Konstante C



O4

nur von u ab. Insbesondere wird der Abstand kleiner, wenn N größer gewählt wird. Es ergibt sich in natürlicher Weise die Frage, ob man die Zerlegung zu einer gegebenen Funktion u geschickter wählen kann, um damit den maximalen Abstand zu minimieren. Dies ist möglich, wenn man die Elemente nicht gleich groß wählt, sondern die Größe der einzelnen Elemente dem Verhalten von u anpasst. Dies nennt sich *adaptive Approximation*. Für unsere Aufgabe ist sogar explizit die optimale Positionierung der Stützstellen bekannt, die zu gegebenem N den kleinstmöglichen Fehler liefert (O4b). Der maximale Abstand ist ebenfalls kleiner als CN^{-1} . Hier wird nur Integrierbarkeit der Ableitung von u benötigt, was eine deutlich schwächere Forderung als Beschränktheit ist.

Betrachten wir nun die Funktion $u(x) = x^\alpha$ mit einem $0 < \alpha < 1$, so ist die Ableitung von u integrierbar, allerdings nicht beschränkt. Ein solches Verhalten nennen wir *singulär* und dies hat dramatische Auswirkungen in der Praxis. Soll z.B. für $\alpha = 0,1$ ein maximaler Fehler von einem Prozent eingehalten werden, so benötigt die uniforme Approximation 10^{20} Elemente, während die adaptive Approximation die gleiche Genauigkeit mit lediglich 100 Elementen erreicht. Letztere kann auf jedem beliebigen Laptop innerhalb von Bruchteilen einer Sekunde berechnet werden, während die uniforme Approximation mehr als einen Tag auf dem schnellsten Rechner des HLRS, Hermit, benötigen würde. Eine solche Rechenzeit ist für diese einfache Aufgabe nicht akzeptabel. Zudem

würden Stromkosten in Höhe von mehr als 5000 Euro zu Buche schlagen. Der Zusammenhang zwischen unserem Gedankenexperiment und der numerischen Lösung von Differentialgleichungen ergibt sich wie folgt. Die exakte Lösung des mathematischen Modells ist in vielen Fällen singular mit einem vergleichbaren Verhalten wie die Funktion x^α unseres Beispiels. In einem solchen Fall können vorhandene Computerressourcen mit uniformen Approximationen nicht adäquat genutzt werden. Dies ist nur mit Hilfe von adaptiven Methoden möglich. Im Gegensatz zu unserem Experiment kann die adaptive Zerlegung nicht explizit angegeben werden, da diese auf Information der exakten Lösung basiert, welche nicht bekannt ist.

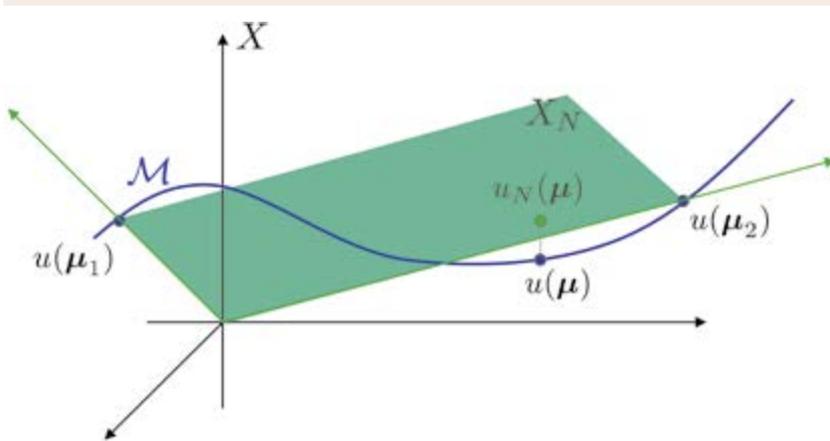
Der Ausweg sind iterative Verfahren, die induktiv eine Folge von Zerlegungen konstruieren und darauf die exakte Lösung adaptiv approximieren. Ein wesentlicher Baustein sind a posteriori Fehlerschätzer, welche den Abstand zwischen berechneter und exakter Lösung abschätzen. Mit Informationen des Fehlerschätzers wird die aktuelle Zerlegung so verbessert, dass bei einer erneuten Berechnung die diskrete Lösung näher an der exakten Lösung liegt. Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass im Falle von singulären Lösungen adaptive Methoden unerlässlich sind, um zur Verfügung stehende Computerressourcen effizient zu nutzen. Die Weiterentwicklung und die Analyse effizienter, adaptiver Verfahren ist ein Themenschwerpunkt in der zweiten Förderungsphase des Exzellenzclusters SimTech.

Uniforme (a) (links) und adaptive (b) (rechts) Approximation von $u(x) = x^{0.1}$ mit jeweils $N = 10$ Elementen. Der maximale Abstand beträgt $\approx 0,65$ für die uniforme und $0,1$ für die adaptive Approximation. Der Abstand der Gitterpunkte verdichtet sich bei der adaptiven Approximation rechts im Bereich hoher Ableitungen von u .

MODELLREDUKTION

Die Modellreduktion hat als Ziel, sehr hochdimensionale Modelle durch niedrigdimensionale Approximationen zu ersetzen. Dadurch wird eine beschleunigte Simulation ermöglicht. Dies erlaubt es, reduzierte Simulationsmodelle in komplexen Simulationsszenarien, wie z.B. der statistischen Analyse, interaktiven Parameter-Exploration, simulationsbasierten Optimierung, Echtzeit-Regelung, etc. einzusetzen. Das aktuelle Forschungsgebiet der „Reduzierten Basis Methoden“ zielt insbesondere auf parametrische Probleme, bei denen die (hochdimensionale) Lösung $u(\mu) \in X$ von

einem Parametervektor μ abhängt und aus einem hochdimensionalen Raum X stammt. Das Ziel ist nun die Bestimmung einer approximativen Lösung $u_N(\mu) \in X_N$ in einem niedrigdimensionalen Unterraum X_N . Dies ist in (05) illustriert. Mathematische Fragen hierbei sind: Wie kann ein geeigneter reduzierter Raum X_N bestimmt werden, so dass die gesamte parametrische Fläche M der hochdimensionalen Lösungen gut approximiert wird? Gegeben ein solcher Raum, wie kann darin eine gute Approximation $u_N(\mu)$ gefunden werden? Wie kann eine solche Approximation effizient berechnet werden? Kann man den Fehler der Approximation zur unbekannt hochdimensionalen Lösung durch Fehlerschätzer einschränken? Kann garantiert werden, dass die Fehlerschranken nicht zu pessimistisch sind, d.h. den Fehler nicht zu sehr überschätzen? Kann man insgesamt für ein gegebenes Modell garantieren, wie der Fehler mit wachsender reduzierter Dimension abfällt? Für einfache Modelle (stationäre Wärmeleitung) sind diese Fragen vollständig zufriedenstellend beantwortet. Für komplexere Probleme wie zeitabhängige Probleme, nicht-lineare Probleme, gekoppelte Systeme, Systeme mit Nebenbedingungen, etc. sind diese Aspekte meist offen und Gegenstand aktueller Forschung.



05

Illustration der Modellreduktion für parametrisierte Probleme.

3.2 Parameterabhängige Probleme

In vielen Fällen reicht eine Einzelsimulation eines Modells nicht aus. Häufig hängt das Modell von variablen Parametern ab, deren genaue Werte darüber hinaus unbekannt sind. Solche Parameter können z.B. Geometriemaße, Materialeigenschaften, Anfangswert- oder Randwertbedingungen umfassen. Neben deterministischen Modellgrößen können die Parameter auch stochastisch sein, und die Wahrscheinlichkeitsverteilung für die zufälligen Parameter kann wieder weitere Modellparameter enthalten.

Verschiedene Simulationsszenarien erfordern nun vielfache Simulation von Model-

len: Zum Beispiel sind für statistische Untersuchungen viele Simulationen mit unterschiedlichen Parametern erforderlich. Im Fall der Optimierung wird durch Änderung der Parameter ein Gütefunktional optimiert. Im Fall von Multiskalen-Modellen kann es notwendig sein, ein Mikromodell sehr häufig zu lösen und diese Ergebnisse in ein Makromodell zu übernehmen. Hierfür werden also viele Simulations-Anfragen (engl. „multi-query“) gestellt. Weil die Laufzeit für eine einzelne Simulation nicht vernachlässigbar ist und bei komplexen Problemen auch Tage oder Wochen benötigen kann, sind effiziente numerische Techniken erforderlich.

Neben der Beschleunigung der Berechnung etwa durch die oben beschriebenen adapti-

ven Methoden, ist die Modellreduktion ein für SimTech zentrales Forschungsgebiet. Damit kann eine wesentliche Verringerung der Dimension des numerischen Problems erreicht werden, um somit eine beschleunigte Simulation zu erreichen. So sind zum Beispiel, wie in (06a) und (06b) ersichtlich, interaktive Oberflächen zur Parameterexploration oder sogar Strömungs-Simulationen auf Smartphones möglich, für welche man ohne Modellreduktion Hochleistungsrechner benötigen würde.

4. INVERSE PROBLEME, OPTIMIERUNG UND REGELUNG

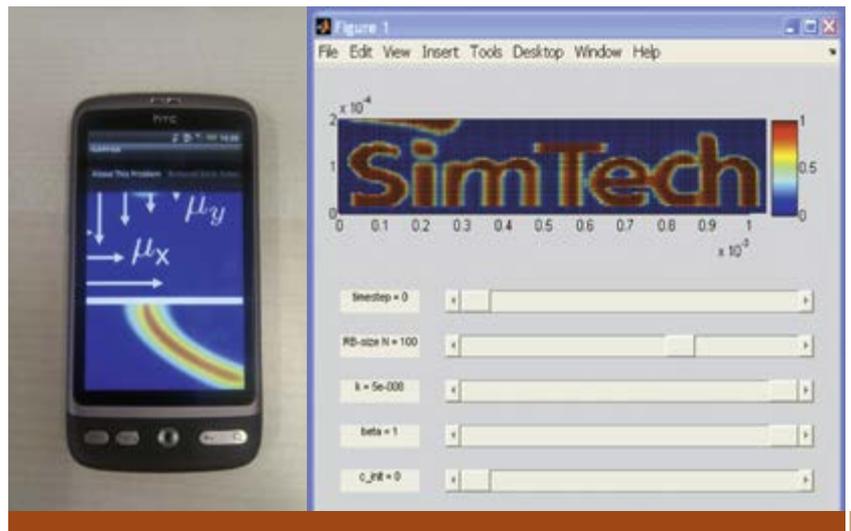
4.1 Optimierung und inverse Probleme

Durch numerische Simulationen kann das Verhalten eines Systems vorhergesagt werden. Dies geschieht bei so unterschiedlichen Anwendungen wie der Wettervorhersage, bei der Simulation von Materialverformungen zur Stabilitätsanalyse oder auch bei der Simulation des Stromflusses durch biologische Medien. Hinter diesen Simulationen steht oft das Ziel, das Verhalten des Systems zu *optimieren* oder durch Vergleich der Simulationen mit realen Messungen Erkenntnisse über das System zu gewinnen (*inverse Probleme*). So werden zum Beispiel die Verformungen verschieden ausgestalteter Stahlträger im Computer simuliert, um eine Form mit optimaler Stabilität zu finden. Inverse Probleme treten beispielsweise bei bildgebenden medizinischen Verfahren auf. Die Computertomographie beruht darauf, die Abschwächung von Röntgenstrahlen beim Durchgang durch den menschlichen Körper zu messen und daraus ein Bild des Körperinneren zu berechnen. Das neuartige Verfahren der elektrischen Impedanztomographie ersetzt die schädlichen Röntgenstrahlen durch schwache, für den Menschen unschädliche elektrische Ströme und wird zur Überwachung der Lungenfunktion durch Strom-/Spannungsmessungen an am Patienten angebrachten Elektroden verwendet.

Zur Beschreibung von Optimierungs- und inversen Problemen betrachten wir vereinfachend das System

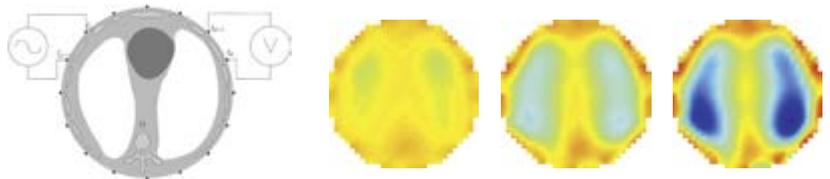
$$F(x) = y.$$

Die Abbildung F ordnet einem Satz von Eingabeparametern bzw. Systemeigen-



Links (a) Strömungsmechanik auf dem Handy: Smartphone-App zur Strömungs-Simulation. Rechts (b) Interaktive Oberfläche zur Parameterexploration mittels reduzierter Modelle.

schaften x die Ausgabeparameter bzw. Systembeobachtungen y zu. Nebenbedingungen lassen sich durch die Forderung ausdrücken, dass die Eingabeparameter aus einer zulässigen Menge X stammen müssen. In der Formoptimierung würde x beispielsweise eine zulässige Form des Stahlträgers beschreiben und y ein Maß für seine Verformung unter praxisrelevanten Lasten. In der Impedanztomographie beschreibt x das Körperinnere des Patienten

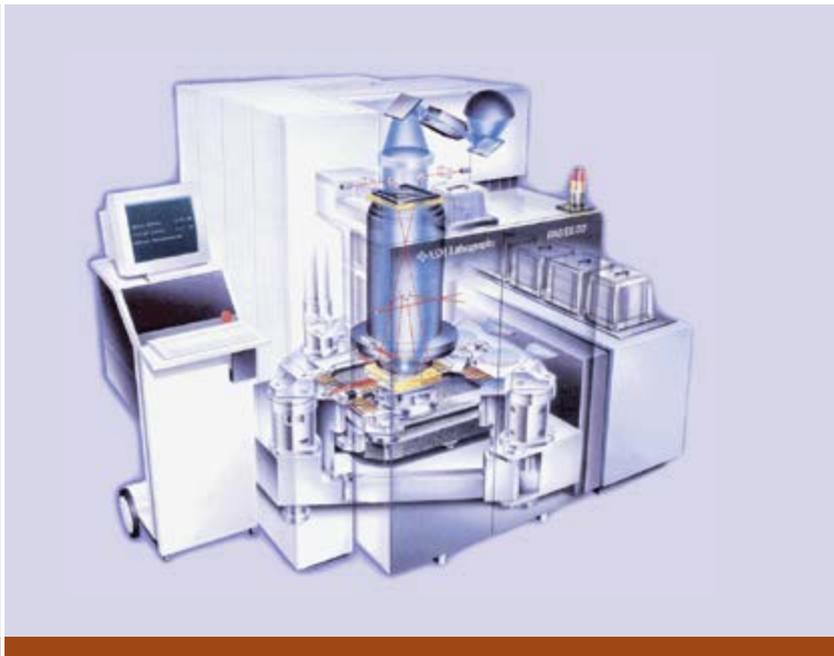


Elektrische Impedanztomographie.

und y die Strom-/Spannungsmessungen an den Elektroden, die am Patienten gebracht sind.

4.1.1 Optimierung

Die Optimierung der Ausgabe eines Systems führt auf das mathematische Problem, die Eingabeparameter x des Systems (aus der zulässigen Menge X) so einzustellen, dass das Zielfunktional $F(x)$ möglichst groß oder möglichst klein wird. Einen naheliegenden Lösungsansatz bilden Auf- bzw. Abstiegsverfahren, die – ausgehend von dem besten bisher bekannten Parametersatz – in jedem Schritt eine Verbesserung anstreben. Dazu wird aus den mathematischen Eigenschaften von F eine das Ziel-



Schematische Darstellung eines Wafer Scanners zur Belichtung von Halbleiterscheiben bei der Herstellung integrierter Schaltkreise (Bildquelle: ASML, Veldhoven, Niederlande).

funktional verbessernde Suchrichtung bestimmt und die Parameter (mit einer ebenfalls mathematisch zu bestimmenden Schrittweite) in diese Richtung abgeändert. Einfache Verfahren verwenden den Gradienten von F (bzw. seine Negation) als Richtung des steilsten Auf- bzw. Abstiegs. Schneller noch konvergieren die sogenannten *Newton-artigen Verfahren*, und moderne *Quasi-Newton-Verfahren* schaffen dies sogar ohne weitere Informationen über höhere Ableitungen der Zielfunktion. Abstiegsverfahren verbessern mit jedem Schritt die Ausgabe des Systems. Die Verfahren betrachten jedoch immer nur eine kleine Umgebung des aktuell besten Parametersatzes. Der so ermittelte optimale Parametersatz ist im allgemeinen nur *lokal optimal*, d.h. durch kleine Veränderungen lässt sich zwar keine Verbesserung mehr erzielen, durch eine große Veränderung aber vielleicht doch noch. Um das *globale Optimum* zu finden, verwendet man mathematische Algorithmen, die mehrere Startwerte verwenden oder bei denen auch einmal eine Verschlechterung des Zielfunktionswertes in Kauf genommen wird. So beruht das *Simulated-Annealing-Verfahren* auf der durch physikalische Abkühlungsprozesse motivierten Idee, Veränderungen der Parameterwerte entsprechend einem mathematischen Zufallsprozess so zu wählen, dass eine Verschlechterung der Zielfunktion zwar möglich, aber unwahrscheinlicher als eine Verbesserung ist.

4.1.2 Inverse Probleme

Die Bestimmung der Systemeigenschaften x aus den experimentellen Beobachtungen des Systems y führt auf das mathematische Problem, die Gleichung $F(x) = y$ nach x aufzulösen, also zu invertieren. Beschreibt x die Leitfähigkeitsverteilung im Inneren eines Patienten, so lässt sich aus Kenntnis von x der Stromfluss durch diesen Patienten simulieren und damit alle mittels Elektroden durchführbaren Strom-/Spannungsmessungen y vorhersagen. Die elektrische Impedanztomographie beruht auf der Lösung des inversen Problems, aus einer real stattgefundenen Strom-/Spannungsmessung y , ein Bild der Leitfähigkeitsverteilung x des Patienten zu erhalten.

Ein wesentlicher Gegenstand theoretischer mathematischer Forschung an inversen Problemen betrifft Eindeutigkeitsfragen, also ob sich die gewünschte Information aus den gegebenen Messungen überhaupt rekonstruieren lässt. Die mathematische Eindeutigkeitsfrage hinter der elektrischen Impedanztomographie hat aufgrund ihrer besonderen Bedeutung und Schwierigkeit als sogenanntes *Calderón-Problem* Berühmtheit erlangt.

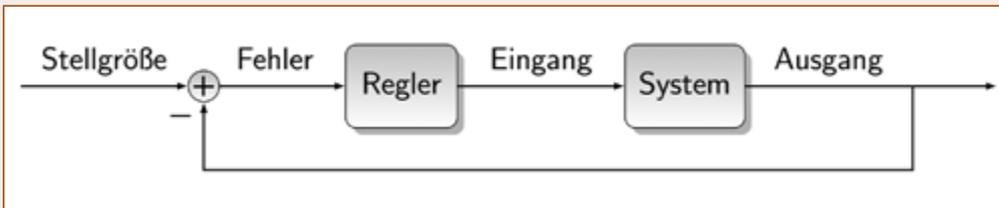
Die praktische Lösung inverser Probleme geschieht oft durch Rückführung auf Optimierungsprobleme. Die wahren Systemeigenschaften x erfüllen die Gleichung $F(x) = y$. Die Simulation des Systems mit diesen Parametern passt also genau zu den real vorgenommenen Messungen. Es liegt daher nahe, die Systemeigenschaften für wahr zu halten, die am besten zu den Messungen passen, d.h. den Abstand von $F(x)$ zur Messung y minimieren. Dieser naheliegende Ansatz liefert jedoch nur für einfache inverse Probleme eine brauchbare Lösung. Viele praktisch relevante inverse Probleme wie die Impedanztomographie besitzen die Eigenschaft der *Schlechtgestelltheit*. Schon kleinste Messfehler verfälschen bei solchen Problemen die am besten zu den Daten passende Lösung bis hin zur völligen Unbrauchbarkeit. Die Geburtsstunde der inversen Probleme als eigenständiges mathematisches Fachgebiet war daher die Erkenntnis, dass sich die wahren Systemeigenschaften nicht durch bestmögliche Anpassung an die gemessenen Daten erhalten lassen, sondern erst durch eine an den Messfehler angepasste mathematische Optimierungsstrategie, die auch

REGELKREIS

Ein offenes dynamisches System besitzt Signaleingänge zu seiner Ansteuerung und Signalausgänge zur Übertragung von Information in die Umgebung. Ein Regler ist ein weiteres meist in einem Computer realisiertes dynamisches System, das mit dem gegebenen System verkoppelt wird. Der in dieser Weise entstehende Regelkreis soll dem Gesamtsystem neue günstige Eigenschaften verleihen.

Für die in (09) gezeigten Konfiguration wäre das Ziel, den Fehler minimal zu gestalten, also den Systemausgang möglichst nahe an die gewünschte Stellgröße heranzubringen.

Balancieren Sie beispielsweise einen aufrecht stehenden Stab auf Ihrer Hand, so bildet der Stab das System, welches Sie als Regler mit Ihrer Handbewegung ansteuern; Ihre Augen dienen als Sensoren, um die Lage des Stabes als Systemausgang zu erfassen, so dass Sie daraus eine geeignete Regelaktion generieren können. Der ohne Regelung instabile Stab wird durch Ihren Einfluss stabilisiert. Haben Sie schon einmal versucht, einen Stab zu balancieren, wobei Sie lediglich den unteren Teil in der Nähe Ihrer Hand ansehen? Ein automatischer Regler wäre dazu in der Lage; die Systemtheorie liefert die mathematischen Einsichten, weshalb dies für einen Menschen i.d.R. unmöglich ist.



Schematische Darstellung eines Regelkreises.

die Regularität der erzielten Lösungen berücksichtigt.

Bei nichtlinearen inversen Problemen tritt auch hier wieder das Problem der lokalen Optima auf. Globale Optimierungsstrategien scheitern oft an der sehr großen Anzahl zu bestimmender Systeminformationen (etwa für ein dreidimensionales Bild des Körperinneren). Die aktuelle mathematische Forschung sucht deshalb auch nach leichter zu rekonstruierenden Teilinformationen. So konnte durch Ausnutzung mathematischer Monotonie-Eigenschaften gezeigt werden, dass Gebietsinformationen in der Impedanztomographie invariant unter Linearisierung sind und sich diese für praktische Zwecke oft ausreichende Teilinformation deshalb vergleichsweise leicht und global konvergent rekonstruieren lässt. Ein weiterer aktueller Forschungsgegenstand ist die Ausnutzung mathematischer Monotonieprinzipien bei der Kombination elektrischer und akustischer Messverfahren zur Erhöhung der Robustheit gegenüber Mess- und Modellierungsfehlern.

4.2 Robust optimale Regelung mit mathematischer Systemtheorie

Die Realisierung fortgeschrittener technischer dynamischer Systeme ist ohne den Einsatz von Regelungstechnik undenkbar. Nur sie ermöglicht beispielsweise die bis in den Nanometerbereich gehende Positionierung eines Silizium Wafers bei der Herstellung integrierter Schaltkreise (08).

Derartige Regler sollten gewisse optimale dynamische Eigenschaften für das gesamte System erzwingen, so dass beispielweise die Positionierung eines Wafers nicht nur sehr genau, sondern auch schnellstmöglich vonstattengeht. Moderne Verfahren machen Gebrauch von mathematischen Modellen der zugrunde liegenden dynamischen Systeme, die meist die Form von gewöhnlichen oder partiellen Differentialgleichungen annehmen. Solche Modelle entstehen in interdisziplinären Teams in enger Zusammenarbeit mit dem jeweiligen Anwendungsgebiet, wie etwa das der Mechatronik. Mittels geeigneter Optimierungsmethoden wird das Regelungskonzept (beschrieben wiederum durch Dif-

ferentialgleichungen) so entworfen, dass der resultierende Regelkreis vorab formulierte gewünschte Optimalitätseigenschaften aufweist. Ein Hauptaugenmerk der mathematischen Systemtheorie oder der theoretischen Regelungstechnik liegt in der Entwicklung und Bereitstellung von Algorithmen, die den Entwurf derartiger *optimaler Regler* erst ermöglichen.

Wie in diesem Artikel an verschiedenen Stellen mehrfach betont, spiegeln mathematische Modelle die Realität nie mit voller Präzision wider, da Parameter nicht genau bestimmt werden können oder gar dynamische Aspekte vernachlässigt wurden. Je genauer die physikalische Wirklichkeit abgebildet werden soll, desto komplexer gestaltet sich ihre mathematische Beschreibung, wodurch gerade der Entwurf von Rückkopplungsreglern aufwändig wird. Daher basiert die Berechnung optimaler Regelgesetze meist auf vereinfachten Modellen, die durch systematische mathematische Reduktionsmethoden erzeugt werden und günstigenfalls mit einer guten Abschätzung des entstehenden Fehlers einhergehen.

All diese Aspekte der Abweichungen eines Modells von der physikalischen Realität werden in der Systemtheorie unter dem Begriff der Unsicherheit subsumiert. Der zu entwerfende Regler sollte dann so gestaltet sein, dass er die gewünschten Optimalitätseigenschaften auch tatsächlich für alle Systeme realisiert, die durch das gehandhabte Unsicherheitsmodell erfasst (oder genauer gesagt nicht falsifiziert) werden – man spricht von einem robusten Reglerentwurf, der sich spezieller Methoden der *robusten Optimierung* bedient. Robustheit ist insbesondere deshalb relevant, weil jeder Regler zunächst durch computer-gestützte Simulationen anhand eines Modells analysiert wird, bevor er in einer Implementierung an das zu regelnde physikalische System gekoppelt werden kann; fehlende Robustheit kann leicht zu unerwünschtem Systemverhalten oder gar zur Instabilität führen.

Aus mathematischer Sicht handelt es sich um spieltheoretische Minimax-Probleme über Strategien, deren exakte Lösung sich aufgrund der numerischen Komplexität häufig als unmöglich erweist. Als erfolgreich hat sich eine Vorgehensweise herausgestellt, die auf gezielte Art ein solches schweres Optimierungsproblem in ein einfacher zu lösendes konvexes Problem

überführt, das zumindest approximativ optimale Lösungen erzeugt. Einige erst in den letzten Jahren entwickelte Techniken basieren beispielsweise auf tiefgehenden Sätzen der reellen algebraischen Geometrie und eröffnen neue Möglichkeiten in der praktischen Regelungstechnik.

Heutige Zugänge dieser Art sind monolithisch und erlauben lediglich für ein einziges System den Entwurf eines robust optimalen Reglers. Die zugrundeliegenden Konzepte sind aber sehr vielversprechend, um auch eine Vielzahl miteinander vernetzter Systeme zu handhaben. Ein typisches Beispiel sind smart grids, intelligente Netze zur effizienten Verteilung elektrischer Energie angesichts heterogener Stromerzeuger und Verbraucher in einem hochdynamischen Umfeld. Mathematisch gesehen entstehen diese aus einer Verkopplung heterogener dynamischer Systeme zu einem zu optimierenden Gesamtsystem. Aus Komplexitätsgründen ist es nicht möglich oder nicht erwünscht, derartige Netze zentral anzusteuern. Idealerweise sollten also lediglich einzelne Systemkomponenten dezentral geregelt werden, um optimales Verhalten auf der Ebene des Gesamtsystems zu erzielen. Ein solches Szenario ist der Quell vielfältiger Unsicherheiten, nicht nur auf der Systemkomponentenebene, sondern auch von struktureller Art in der Vernetzung der Systeme oder der Kommunikationsinfrastruktur zur Implementierung der Regler.

Eine mathematische Systemtheorie vernetzter Systeme steckt hierbei noch in den Kinderschuhen. Die Umsetzung vorhandener struktureller Eigenschaften der Verkopplung – meist gefasst in der Sprache der Graphentheorie – in effiziente Entwurfstechniken ist trotz intensiver Forschung in den letzten Jahren noch nicht sehr weit fortgeschritten. Sowohl die Handhabung der daraus resultierenden numerischen Komplexität als auch deren Umsetzung in robuste Algorithmen und Simulationsumgebungen für den zukünftigen effizienten industriellen Einsatz bilden einen Themenschwerpunkt in der zweiten Förderungsphase des Exzellenzclusters SimTech.

• Bernard Haasdonk
Bastian von Harrach
Christian Rohde
Carsten Scherer
Guido Schneider
Kunibert G. Siebert

DIE AUTOREN



- a) **JUN.-PROF. DR. BERNARD HAASDONK**
 ist seit 2009 Nachwuchsgruppenleiter am Fachbereich Mathematik. Forschungsthemen sind Modellreduktion, Reduzierte Basis Methoden, Kermethoden, Maschinelles Lernen.
- b) **PROF. DR. BASTIAN VON HARRACH**
 folgte nach Professuren an der TU München und der Universität Würzburg dem Ruf nach Stuttgart und leitet hier seit März 2013 den Lehrstuhl für Optimierung und inverse Probleme am Fachbereich Mathematik. Ein Schwerpunkt des Lehrstuhls sind mathematische Inversionsverfahren für neuartige Tomographiemethoden. (Foto: Andreas Heddergott / TU München)
- c) **PROF. DR. CHRISTIAN ROHDE**
 ist seit 2007 Professor an der Universität Stuttgart. Seine Hauptforschungsgebiete liegen im Bereich der Modellierung, Analysis und numerischen Simulation für nichtlineare partielle Differentialgleichungen. Als Anwendungen werden Evolutionsprozesse in der Störungs- und Festkörpermechanik betrachtet.
- d) **PROF. DR. CARSTEN SCHERER**
 leitet seit März 2010 den im Rahmen des Exzellenzclusters SimTech neu etablierten Lehrstuhl für Mathematische Systemtheorie im Fachbereich Mathematik. Ein Schwerpunkt des Arbeitsgebietes ist die Entwicklung optimierungsbasierter Methoden des robusten Reglerentwurfs für komplexe vernetzte Systeme.
- e) **PROF. DR. GUIDO SCHNEIDER**
 ist seit 2006 Professor an der Universität Stuttgart. Seine Hauptforschungsgebiete liegen im Bereich der Dynamik nichtlinearer partieller Differentialgleichungen und insbesondere in der Rechtfertigung effektiver Modelle der Strömungsmechanik, der Nichtlinearen Optik oder der Quantenmechanik.
- f) **PROF. DR. KUNIBERT G. SIEBERT**
 ist seit 2011 Professor an der Universität Stuttgart. Die drei Schwerpunkte seiner Forschung sind die Analyse adaptiver Finiten Elemente für nichtlineare partielle Differentialgleichungen, Entwicklung effizienter adaptive Finiten Elemente Software, sowie Wissenschaftliches Rechnen. In den Forschungsvorhaben beeinflussen sich diese Schwerpunkte gegenseitig.

Kontakt

Universität Stuttgart
 Fakultät 8, Fachbereich Mathematik
 Tel. +49 (0) 711/685-65525
 E-Mail: christian.rohde@mathematik.uni-stuttgart.de
 Internet: <http://www.mathematik.uni-stuttgart.de/fak8/ians/index.html>

DuMu^X

Ein Open-Source-Simulator zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in porösen Medien für komplexe Ingenieur Anwendungen

Das Land oder der Untergrund, auf dem wir uns bewegen, hat als Hydrosystem für den Menschen überragende Bedeutung erlangt. Es birgt Bodenschätze, wird als Speicherort für verschiedene (Abfall-) Stoffe benutzt und enthält vor allem die unendlich wichtige Ressource Grundwasser, die in Deutschland etwa 70 Prozent des Trinkwassers stellt. Die Modellierung und Simulation von Strömungs- und Transportprozessen einer Vielzahl von Hydrosystemen steht im Zentrum der Forschungen am Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung (LH2).



1. Forschungsschwerpunkte und Überblick

In einer Vielzahl von Forschungsprojekten werden an der Universität Stuttgart insbesondere grundlegende Methoden entwickelt, um Strömungen in porösen Medien oder im Austausch mit porösen Medien zu beschreiben. Klassische wasserwirtschaftliche und umweltrelevante Anwendungsgebiete sind Strömungen im natürlichen Untergrund. Dies betrifft zum Beispiel Fragen rund um den Schutz und die Bewirtschaftung des Grundwassers, die Sanierung kontaminierter Standorte, die Nutzung des Untergrunds zur Speicherung energierelevanter Gase wie z.B. Kohlendioxid oder Methan, die Gewinnung geothermischer Energie oder die dauerhafte Lagerung von Atommüll. Darüber hinaus

zeigen sich die sogenannten Reservoir-Ingenieure an Strömungen im Untergrund interessiert, insbesondere wenn sie sich mit Techniken zur erweiterten Öl- und Gasförderung beschäftigen. Alle genannten Anwendungsfelder haben gemeinsam, dass eine Interaktion mit dem Grundwasser und damit einer unserer wichtigsten Trinkwasserreserven möglich ist. Will man sie realistisch beurteilen oder aber Effekte und Risiken vorhersagen, sind Modellkonzepte und Methoden erforderlich, die eine Simulation zusammenhängender Prozesse je nach betrachteten Raum- und Zeitskalen effizient und robust ermöglichen.

Der grundlegenden Methodenentwicklung liegt also stets die Vision einer Anwendung für verschiedenste Fragestellungen aus den Ingenieurwissenschaften und die Integration in eine umfassende Simula-

tionsumgebung zugrunde. So wurden in jüngster Zeit verbesserte Ansätze zur Beschreibung von Prozessen auf verschiedenen Skalen (Mehrskalenmodellierung, Upscaling) entwickelt oder die Kopplung von Modellen für unterschiedliche Strömungskompartimente (z.B. poröse Medien mit freien Strömungen) untersucht. Neben dieser Grundlagenarbeit stehen einige bestimmte Anwendungsgebiete im Vordergrund der Forschung, wie z.B. der mögliche Einsatz thermisch unterstützter Sanierungsmethoden für kontaminierte Standorte (in Kooperation mit der Versuchseinrichtung zur Grundwasser- und Altlastensanierung VEGAS) oder die Speicherung von klimaschädlichem Kohlendioxid (CO₂) in tiefen geologischen Formationen.

Neben SimTech ist ein Großteil der Forschung im internationalen Graduiertenkolleg NUPUS (Non-Linearities and Upscaling in Porous Media) vernetzt.

Innerhalb der LH2-Arbeitsgruppe wird im Rahmen des DuMu^x-Projekts eine umfassende Toolbox für die Simulation von Strömungen durch poröse Medien entwickelt. Das Projekt ist beispielhaft für moderne Open-Source-Entwicklung, gewährleistet sie doch eine nachhaltige Verfügbarkeit und Benutzbarkeit des Simulators und erleichtert so den fachlichen Austausch. Ziel unserer Arbeit ist es, DuMu^x als ein Werkzeug für wissenschaftliches Arbeiten zu etablieren, das eine flexible Integration neuer Simulationskonzepte und -methoden erlaubt, aber auch ein leistungsfähiges Softwarepaket für Anwendungen in relevanten, realistischen Größenordnungen darstellt. Wie genau das gelingen kann, sollen der folgende Überblick über den Simulator und die zu Grunde liegenden Entwicklungsmethoden sowie ausgewählte Beispiele aktueller Entwicklungen und Ingenieur Anwendungen deutlich machen.

2. DuMu^x

DuMu^x ist eine Simulationssoftware für Mehr- {phasen-, komponenten-, skalen-, physik-, ...} Strömungs- und Transportprozesse in porösen Medien [1]. Das Programmsystem basiert auf der Numerikplattform DUNE, einer C++ Umgebung zur Lösung partieller Differentialgleichungen mit gitter-basierten Methoden (www.dune-project.org). DuMu^x ist eine Open-

SUMMARY

The development of an open-source simulator for complex engineering applications in the field of flow and transport through porous media is the central aim of the DuMu^x project (dumux.org). This article introduces the basic principals for the development of DuMu^x and its field of application. Recent developments of new methods (e.g. model coupling, up-scaling and multi-scale approaches, adaptivity) as well as interesting fields of applications (e.g. CO₂ storage, fuel cells) are discussed by means of illustrated examples. These show that the development of fundamental and theoretical methods is not isolated from the problems and questions of the engineering applications. Moreover, the common implementations in DuMu^x allow the use of recent methodological developments for the applications on a scale which is relevant for the specific problem more easily.

Source-Software, die unter dumux.org frei verfügbar ist. Das Open-Source-Konzept ermöglicht es allen interessierten Nutzern die Software an die eigenen Anforderungen anzupassen, eigene Implementierungen nach Bedarf zu verwirklichen, sowie sich am Entwicklungsprozess zu beteiligen. So leistet DuMu^x einen Beitrag zu mehr Transparenz, die für die Reproduzierbarkeit und Nachhaltigkeit in der modernen Forschung unerlässlich ist. DuMu^x kommt bereits in einer Vielzahl nationaler und internationaler Forschungsprojekte zur Anwendung. Das Spektrum reicht dabei von der Simulation der CO₂-Speicherung in geologischen Formationen, Bio-Clogging, also dem Verschluss von Poren durch einen Biofilm, Verdunstung an der Erdoberfläche, über die Optimierung des Wassermanagements in Brennstoffzellen bis hin zur Untersuchung der Ausbreitung von Medikamenten in Blutgefäßen und Gewebe.

Eine Grundidee der Entwicklung ist es, eine möglichst modulare Struktur zu schaffen, die den flexiblen Einsatz unterstützt. Das Grundgerüst besteht aus Basismodulen die von verschiedenen Modellen gemeinsam genutzt werden können und modell-spezifischen Modulen, die die Spezialisierungen für verschiedene Anwendungsbereiche enthalten. Diese Struktur stellt einerseits sicher, dass möglichst viele Anwender unmittelbar von Verbesserungen der Basismodule profitieren können, und ermöglicht andererseits die einfache Umsetzung neuer spezialisierter Modelle. Bereits bestehende Modelle können dabei auf verschiedenen Skalen, von der kleinen Labor-Skala bis hin zur großflächigen Feld-Skala, angewendet werden. Da DuMu^x auf der DUNE-Plattform aufbaut, die bereits verschiedene lineare Lösungsverfahren

und Gitter-Manager sowie eine parallele Infrastruktur bereitstellt, kann sich die Entwicklung im Wesentlichen auf die Umsetzung und Anwendung der physikalischen Modelle konzentrieren.

2.1 Einsatzmöglichkeiten

DuMu^x konzentriert sich auf die Beschreibung von Strömungs- und Transportprozessen in porösen Medien auf der Darcy/REV Skala. Das Darcy-Gesetz erlaubt eine vereinfachte Beschreibung der Fluidbewegung in einem porösen Medium, bei der die einzelnen Poren nicht im Detail aufgelöst werden müssen. Das heißt, es muss zum Beispiel nicht das Volumen jeder einzelnen Pore, sondern nur der mittlere Hohlraumanteil, die Porosität, bekannt sein. Das repräsentative Volumen, für das die Porosität oder andere Strömungsparameter berechnet werden, heißt „repräsentatives Elementarvolumen“ (REV). Relevante physikalische Strömungs- und Transportprozesse können dann mit Hilfe partieller Differentialgleichungen modelliert werden. Beispielgleichungen wären die Massen-, Impuls-, oder Energieerhaltung, für deren Lösung wiederum weitere grundsätzliche Zusammenhänge wie die Kapillardruck-Sättigungs- oder die Relative-Permeabilitäts-Sättigungs-Beziehung und spezifischen Materialeigenschaften der porösen Medien und der Fluide einbezogen werden.

2.2 Modelle

DuMu^x setzt sich aus verschiedenen „Standardmodellen“ zur Modellierung von Prozessen in porösen Medien zusammen. Diese reichen von isothermen Modellen für Einphasen-Einkomponenten-Strömungen, also zum Beispiel für die Modellierung einer reinen Wasserströmung, bei der nur eine Komponente H₂O bei konstanter Temperatur betrachtet wird, bis hin zu nicht-isothermen Modellen für Dreiphasen-Dreikomponenten-Strömungs- und Transportprozesse. Drei Fluidphasen können zum Beispiel als Wasser, Öl und Luft bei der Betrachtung von kontaminiertem Grundwasser vorkommen. Des Weiteren sind bereits noch komplexere „Nicht-Standard“-Modelle verfügbar, wie etwa ein verallgemeinertes Mehrphasen-Mehrkomponenten-Modell, welches auch die Modellierung eines thermischen Nicht-

Gleichgewichts erlaubt. Zur diskreten Modellierung von Klüften steht ebenso ein Modell bereit wie zur Analyse geomechanischer Vorgänge, mit welchen sich zusätzlich zu Strömungs- und Transportvorgängen die Deformation des porösen Mediums beschreiben lässt. Die Deformation kann wiederum Auswirkungen auf hydraulisch relevante Parameter wie die Porosität und die Durchlässigkeit haben. Für die Beschreibung der Interaktion zwischen Fluiden und der porösen Matrix werden verschiedene grundlegende Beziehungen und Materialeigenschaften benötigt. Hierfür sind Modelle und Parametrisierungen, wie z.B. die Brooks-Corey- oder die van-Genuchten-Parametrisierung implementiert. Für die genaue Charakterisierung der Fluid-Phasen-Eigenschaften sind sogenannte Fluidsysteme für verschiedene Mischungen verfügbar, z.B. für „Wasser-Luft“- oder „Brine(Salzlösung)-CO₂“-Gemische. Darüber hinaus können spezifische Parameter wie Porosität und Permeabilität orts- und problemabhängig definiert werden.

Die physikalischen Modelle sind mit Hilfe verschiedener Diskretisierungsmethoden umgesetzt. Zum Teil kann je nach konkreter Anwendung zwischen verschiedenen Methoden gewählt werden. Es sind sowohl voll-implizite, d.h. Methoden, in denen alle Modellgleichungen gleichzeitig gelöst werden müssen, als auch sogenannte halb-implizite Formulierungen, die eine sequentielle Lösung verschiedener Modellgleichungen erlauben, in DuMu^x implementiert. Bei den räumlichen Diskretisierungsmethoden liegt der Schwerpunkt auf verschiedenen Finite-Volumen Methoden.

Zusätzlich zu den genannten Methoden und Implementierungen werden laufend neue Modelle entworfen oder bestehende Modelle ausgebaut. Diese Neu- oder Weiterentwicklungen werden regelmäßig in den öffentlichen, „stabilen“ Teil von DuMu^x integriert und in halbjährlichen Releases veröffentlicht. Ein Release stellt eine stabile Version für all die Nutzer dar, die nicht sofort auf die aktuellsten Neuerungen angewiesen sind. Die jüngste Version ist seit Oktober 2013 verfügbar. Neue Modelle werden dabei immer möglichst so integriert, dass die modulare Struktur ausgeschöpft und bestehende Interfaces genutzt werden können sowie die Kompatibilität zwischen zumindest zwei direkt aufeinander-

der folgenden Releases gewährleistet bleibt. Zur Zeit liegt der Fokus auf der Entwicklung von Ansätzen zur Modellkopplung und zur Mehrskalen-Mehrphysik-Modellierung.

3. Entwicklungsprinzipien

DuMu^x wird momentan hauptsächlich am Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydro-systemmodellierung der Universität Stuttgart entwickelt. Die meisten Entwickler sind Doktoranden, die für drei bis fünf Jahre am Projekt DuMu^x mitwirken. Durch die konsequente Umsetzung von Open-Source-Prinzipien soll erreicht werden, dass Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der Forschungsgruppe sowie andere Entwickler/ Nutzer sich auf eine gut dokumentierte und getestete Software plus die Korrektheit aktueller Änderungen im Code verlassen können.

3.1 Review und selbstständiges Testen

Das Entwicklungsmodell sieht vor, dass nur positiv getestete Funktionalitäten in den stabilen, öffentlich zugänglichen Zweig von DuMu^x hinzugefügt werden dürfen und bewährte Funktionalitäten und Schnittstellen grundsätzlich nicht leichtfertig verändert werden sollen. Um dieses zu gewährleisten und eine gleichbleibend hohe Qualität sicherzustellen, werden alle geplanten Änderungen vorab durch mindestens einen zweiten Entwickler kontrolliert. Neue Entwürfe werden dafür zunächst in einem separaten, der Öffentlichkeit nicht zugänglichen Entwicklungszweig von DuMu^x implementiert. Nach der Publikation neuer Modelle und der durch sie gewonnenen Erkenntnisse, werden zuverlässig arbeitende, also „stabile“ Modelle oder Module regelmäßig in den öffentlichen Teil von DuMu^x integriert. Externe Kooperationspartner können darüber hinaus nach Absprache auch Zugang zum Entwicklungszweig erhalten. Die Funktionalität des stabilen Bereichs wird automatisch und regelmäßig überprüft. Dabei wird für verschiedene Test-Setups der Code übersetzt und jeweils eine Simulation gestartet. Ist dieser erste Teil des Tests erfolgreich, werden die neuen Simulationsergebnisse anschließend automatisch mit bestehenden Referenzlösungen verglichen. Auf diese Weise können

Fehler minimiert und die Reproduzierbarkeit von Ergebnissen sichergestellt werden.

3.2 Versionsverwaltung, Dokumentation und Issue Tracker

DuMu^x wird unter Versionsverwaltung entwickelt, d.h. alle Veränderungen sowie der aktuelle Fortschritt werden zentral gespeichert und archiviert. Somit kann jeder Anwender jederzeit die Entwicklung der Modelle und Algorithmen im stabilen Zweig zurückverfolgen. Aus der im C++-Code enthaltenen Dokumentation wird automatisch eine gut les- und navigierbare HTML-Dokumentation generiert. Auf diese Weise ist es vergleichsweise einfach, eine aktuelle Dokumentation und damit auch eine komplette Programmierschnittstelle (API) auf der DuMu^x Homepage anzubieten. Die Dokumentation von Fehlern oder Entwicklungsanfragen wird durch ein öffentliches Issue-Tracking-System verwaltet. Dies ermöglicht es auch den Nutzern, Vorschläge oder Fehlermeldungen einzubringen.

3.3 Erweiterung der Nutzer-Community

Wie andere Open-Source Projekte auch, profitiert auch DuMu^x davon, dass möglichst viele Nutzer die Software kostenfrei herunterladen, nutzen, modifizieren und weiter verbreiten. Dabei ist es allerdings wichtig, dass Nutzer ihre Modifikationen ihrerseits wiederum veröffentlichen. So können bestehende Resultate einfach reproduziert und die eigene Forschung auf fortgeschrittener Software aufgebaut werden. Die Voraussetzung, um DuMu^x auszuprobieren ist eine Unix-Umgebung (Linux oder Mac OS X). Die Bedienung läuft über eine Eingabekonzole. Will man über die einfache Bedienung oder die Veränderung einzelner Parameter hinaus selbst aktiv werden und etwa den Code erweitern, sollte man grundlegende Kenntnisse in C++ mitbringen, da DuMu^x nicht über eine grafische Benutzeroberfläche verfügt. Ein eigens herausgegebenes Handbuch beschreibt das schrittweise Vorgehen, so dass sich DuMu^x auch ohne Studienabschluss in Informatik verwenden lässt. Bei offenen Fragen hilft eine Mailing-Liste, für die sich jeder Nutzer einfach und frei registrieren kann.

4. Beispiele für aktuelle Entwicklungen

Zusammenfassend dient der Auf- und Ausbau von DuMu^x der grundsätzlichen (Weiter-) Entwicklung von Methoden sowie dem gezielten Einsatz der Simulationstools für Ingenieur Anwendungen. Über den aktuellen Status quo in der Methodenentwicklung soll nachfolgend ein Überblick gegeben werden, bevor anschließend auf ein repräsentatives Beispiel näher eingegangen wird.

Modelle können stets nur eine Annäherung an die Wirklichkeit liefern. Die erforderliche Komplexität eines Modells hängt dabei von der jeweiligen Fragestellung ab. Ein Modell sollte bestenfalls gerade so komplex sein, dass die zur Beantwortung einer Fragestellung erforderlichen wesentlichen Prozesse abgebildet sind. Dies kann – räumlich und zeitlich verteilt – unterschiedliche Prozesse umfassen und diesen Prozessen können auch völlig verschiedene Modellgleichungen zugrunde liegen. In DuMu^x werden daher auch vielfältige Ansätze zur **Modellkopplung** verfolgt [2], beispielsweise werden poröse Medien mit freien Strömungen räumlich gekoppelt. Sequentielle, d.h. zeitliche Kopplungen können wiederum sinnvoll sein, wenn die Komplexität der Prozesse sich mit der Zeit ändert, wie es bei der CO₂-Speicherung oder der Ausbreitung von Schadstoffen im Boden der Fall sein kann. Unabhängig von der Art der Kopplung muss jedoch immer die Kontinuität der Bilanzgrößen durch geeignete Kopplungsbedingungen gewährleistet werden.

Je nach Art der Ingenieurfragestellung müssen verschiedenste Prozesse berücksichtigt werden, die auf unterschiedlichen Zeitskalen, also schnell oder langsam, und Längenskalen, also großräumig oder lokal begrenzt, zum Beispiel auf einer Kilometerskala gegenüber einer Zentimeterskala, ablaufen können. Diese Skalenabhängigkeit stellt eine große Herausforderung für die Simulation dar. Abhängig von der Größe des zu berechnenden Gesamtsystems erfordert die Beschreibung kleinskaliger Effekte hier oft eine hohe räumliche und zeitliche Auflösung und ist damit sehr rechenintensiv. Um Simulationen effizienter durchführen zu können, benötigt es daher Ansätze um die Auswirkungen kleinskaliger Effekte auch bei größerer Auflösung zu berücksichtigen. Dazu werden in DuMu^x

zwei Ansätze verfolgt. Zum einen werden **Upscaling**-Methoden verwendet, die es ermöglichen, kleinskalige Effekte über effektive Parameter auf einer größeren Skala abzubilden. Klassische Beispiele sind die Kapillardruck-Sättigungs-Beziehung und die relative-Permeabilität-Sättigungs-Beziehung. Zum anderen können über sogenannte **Mehrskalenansätze** lokal kleinskalige Effekte direkt modelliert und mit einem Modell auf größerer Skala gekoppelt werden.

Die **Adaptivität** von Modellen ist ein weites Gebiet und kann die Anpassung von Zeitschrittgrößen, räumlicher Diskretisierungsweite, geeigneten Primärvariablen etc. bedeuten. Diese Anpassung muss immer vor dem Hintergrund entstehen, am Ende ein möglichst genaues, aber auch möglichst effizientes Modell zu erhalten. In DuMu^x werden insbesondere gitteradaptive Ansätze verfolgt, die eine feinere Auflösung von Interfaces oder Ausbreitungsfronten erlauben und so z.B. die numerische Diffusion verringern. Hier kann DuMu^x entscheidend von der ihr zugrundeliegenden Toolbox DUNE profitieren, die Gittermanager zur Verfügung stellt, welche eine entsprechende lokale Adaptierung des Rechengitters ermöglichen. Darüber hinaus lassen sich mit DuMu^x modeladaptive Ansätze umsetzen, also die flexible Kombination verschieden komplexer Modellansätze, die zum Beispiel in der Simulation großräumiger Systeme eingesetzt werden können.

4.1 Repräsentatives Beispiel: Adaptive großskalige Simulation

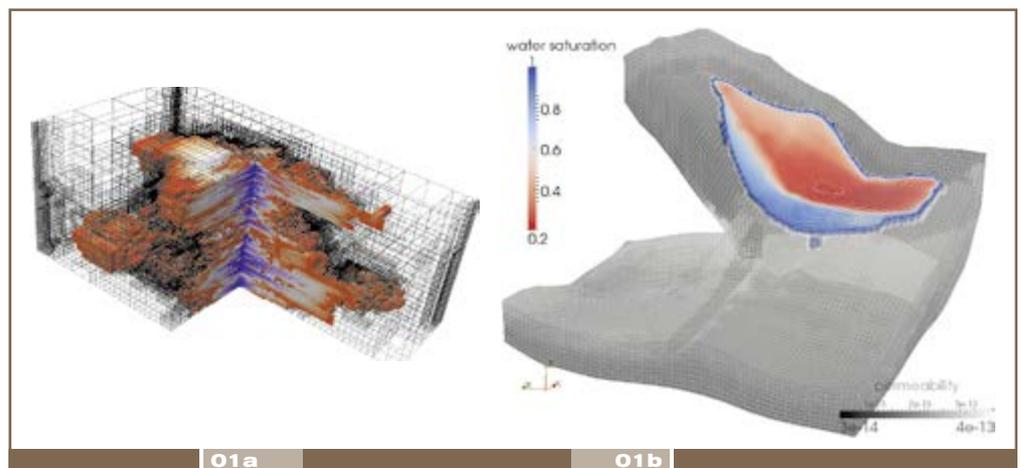
Um wichtige Anwendungsbereiche, wie sie im nachfolgenden Abschnitt beschrieben werden, zufriedenstellend simulieren zu können, müssen zunehmend komplexe physikalische Prozesse mit einer hohen räumlichen Auflösung und für gleichzeitig große Einflussgebiete modelliert werden. Aufgrund beschränkter Hardware-Ressourcen können große Modellgebiete jedoch oft nur auf relativ groben Gittern simuliert werden. Adaptive Methoden sind hier ein vielversprechendes Werkzeug, um die Simulation großskaliger Systeme effizienter zu machen. Dabei wird durch die Anwendung eines adaptiven Gitters versucht, die Zahl der globalen Freiheitsgrade zu minimieren und dennoch eine hohe Genauigkeit der Berechnungen zu er-

reichen. DuMu^x unterstützt dabei sogenannte h-adaptive Gitter, die nichtkonforme Verfeinerung mittels „hängender Knoten“ erlauben. Um auf diesen nichtkonformen Gittern eine hohe Genauigkeit zu erreichen, sind „Standard“-Finite-Volumen-Methoden oft nicht ausreichend. Daher kommen in DuMu^x noch weitere, komplexere Methoden wie eine Finite-Volumen-Methode mit Mehrpunktflussapproximation und eine „Mimetic-Finite-Difference“-Methode zum Einsatz. Um ein adaptives Gitter auch für hoch aufgelöste geologische Modelle verwenden zu können, wurde für DuMu^x ein Mehrskalensatz entwickelt und implementiert. Verschiedene „Upscaling“-Methoden ermöglichen es dabei, feinskalige Parameter auf grobe Gitterzellen zu skalieren. Dadurch ist lokal auch eine adaptive Vergrößerung möglich, die die Anzahl globaler Freiheitsgrade entscheidend reduziert und somit die Voraussetzung für großskalige Berechnungen bei lokal feiner Auflösung schafft: **(01a)** [3]. Neben der räumlichen Auflösung ist die Komplexität der zu modellierenden physikalischen Effekte von großer Bedeutung für die Effizienz der Simulationen. Verschiedene in DuMu^x implementierte Mehrphysikmethoden erlauben es daher die Komplexität der Modelle räumlich adaptiv zu variieren. Dadurch können Bereiche, die mit unnötig komplexen und damit zu rechenintensiven Modellen beschrieben werden, minimiert werden: **(01b)** [4].

5.1 Überblick

Ein verbessertes Verständnis von **Verdunstungsvorgängen aus Böden** ist von großer Bedeutung, um z.B. die Austrocknung von Böden in ariden Regionen sowie einer daraus eventuell resultierenden Versalzung zu verhindern oder entsprechende Gegenmaßnahmen einzuleiten. Mit Hilfe des Modellkopplungs-Tools in DuMu^x können Simulationen der Strömungen im Boden mit freien Strömungen gekoppelt berechnet und die Austauschprozesse so am Interface modelliert werden.

Ein weiteres Beispiel für die flexible Handhabbarkeit von DuMu^x ist der dadurch ermöglichte Erkenntnisgewinn über **Austauschprozesse zwischen Pflanzen und Boden**. Ein großer Anteil des in den Untergrund eindringenden Wassers wird von den Pflanzenwurzeln zunächst aufgenommen und durch die damit verbundene Pflanzentranspiration anschließend zurück an die Atmosphäre gegeben. Die Modellierung der Wasseraufnahme der Wurzeln ist daher wichtig für viele umweltrelevante



5. Beispielszenarien für Ingenieur Anwendungen

Dank seiner methodischen Vielseitigkeit und Flexibilität kann DuMu^x für eine Vielzahl von Problemen – von akademischen ein-dimensionalen Studien bis hin zu angewandten Berechnungen auf der Feld-Skala – eingesetzt werden. Die folgenden Beispiele geben einen Eindruck der momentanen Einsatzmöglichkeiten von DuMu^x bei aktuellen wissenschaftlichen Fragestellungen, die im Wesentlichen aus dem Bereich des Umweltingenieurwesens kommen.

und landwirtschaftliche Fragestellungen. Viele praktische Anwendungen, wie Vorhersagen zu Ernteerträgen, der Schadstoffverteilung in Feldern oder auch dem geeignetsten Bewässerungsmanagement, setzen ein tiefgehendes Verständnis der Interaktionen zwischen Bodenwasser und Pflanzenwurzeln voraus. Die Anwendung hoch entwickelter Modellansätze fördert genau dieses Wissen. In einer Kooperation mit dem Forschungszentrum Jülich wird in DuMu^x derzeit ein hochauflösendes Boden-Wurzel-Modell entwickelt, welches Wasser- und Stofftransportprozesse in der ungesättigten Bodenzone mit dem Wasser-

(a) Adaptive Mehrskalensmodellierung von komplexen fein aufgelösten geologischen Modellen: Das Beispiel zeigt eine Wasserinjektion in die Modell-2-Formation des SPE 10 Benchmark Problems [5], einer der meistgerechneten Benchmarkformationen für Mehrskalensmodellierung in porösen Medien.

(b) Unterirdische CO₂ Speicherung: Fahne einer Simulation über fünfzig Jahre auf einem adaptiv verfeinertem Gitter. Lediglich der komplexeste Teilbereich des Mehrphysikansatzes ist sichtbar.

transport in einem explizit aufgelösten Wurzelnetzwerk verbindet. Dieses Modell wird im Anschluss dazu genutzt, z.B. die Effekte der Bodenheterogenität auf die Pflanzenwasseraufnahme, die Kombination von Wasser- und Stoffaufnahme der Wurzeln oder die Salzablagerung in der Wurzelzone zu untersuchen.

Ein hochaktuelles Forschungsthema ist die **CO₂-Speicherung** in tiefen geologischen Formationen mit dem Ziel das Treibhausgas CO₂ in der Atmosphäre zu reduzieren. Die verschiedenen Mechanismen, die das CO₂ daran hindert, an die Atmosphäre zurück zu gelangen sowie die dazugehörigen Vorgänge im Untergrund können mithilfe von DuMu^x grundlegend analysiert werden. Die Modellierung und Simulation ist für Voraussagen über z.B. die Ausbreitung des CO₂ und Abschätzungen der mit der Speicherung verbundenen Risiken sehr wichtig. Hierfür müssen viele unterschiedliche Prozesse beschrieben werden. DuMu^x bietet die Möglichkeit je nach Fragestellung unterschiedliche Komplexitätslevel einzubinden, etwa Mehrphasen-Strömungen, Mehrkomponenten-Transport, geochemische Vorgänge oder geochemische Prozesse.

Ein weiteres Treibhausgas rückt in den Fokus von DuMu^x: Methan. Die Wirkung dieses Treibhausgases ist weitaus stärker als beispielsweise die Wirkung von CO₂. Die Erforschung der Mechanismen, die zu einer **Migration von** biogenem oder geogenem **Methan** aus dem Untergrund in die Atmosphäre führen und damit letztlich zur Erderwärmung beitragen, ist somit von immenser Bedeutung. Dabei spielen Anwendungen wie die unkonventionelle Gasförderung („Hydraulic Fracturing“), aber auch die Emission aus Kohleflözen oder die mikrobielle Methanerzeugung eine Rolle. Durch die Modellierung der Methanmigration und den Vergleich mit vorhandenen Messwerten können neue Erkenntnisse über den Ablauf und die Relevanz der verschiedenen Prozesse gewonnen werden. DuMu^x bietet hierfür verschiedene Werkzeuge, um die Ausbreitung von gasförmigem Methan im Untergrund zu simulieren. Auch hier kann dank der flexiblen und modularen Struktur sehr gut auf die jeweils erforderlichen Komplexitätslevel eingegangen werden.

Eine Anwendung, die beispielsweise im Zusammenhang mit der Speicherung von CO₂ untersucht wird, ist die Verwendung

von Biofilmen zur gezielten Veränderung von hydraulischen Eigenschaften im Untergrund. Dieses „**Bio-Clogging**“ genannte Verfahren ermöglicht es durch den Aufbau von Biofilmen und die gezielte, mikrobiell induzierte Ausfällung von Carbonaten natürlich oder künstlich erzeugte Fließpfade abzudichten. Um die Abdichtungswirkung und Beständigkeit einer solchen Biomineralisierung vorherzusagen zu können, müssen die verschiedenen biogeochemischen Reaktionen und der Transport der einzelnen beteiligten Komponenten berechnet werden. In Zusammenarbeit mit der Montana State University werden dazu komplexe Modelle entwickelt, die einerseits das Biofilm-Wachstum und die Kinetiken der Reaktionen sowie andererseits die Strömungs- und Transportprozesse miteinander koppeln müssen.

Nachhaltigkeit im Umgang mit bestehenden Ressourcen und Ausbau neuartiger Technologien steht gleichfalls im Vordergrund eines weiteren, durch DuMu^x simulierbaren Forschungsfeldes: den **Brennstoffzellen**. Diese erzeugen Strom und Wärme aus der chemischen Reaktion zwischen Wasserstoff und Luft. Da als einziges Abfallprodukt Wasser entsteht, werden Brennstoffzellen als Zukunftstechnologie betrachtet, mit der emissionsarm Autos angetrieben, Gebäude geheizt und Computer betrieben werden können – vorausgesetzt, es werden erneuerbare Energien zur Erzeugung des Brennstoffs (Wasserstoff oder Alkohol) genutzt. Lebensdauer, Effizienz und Produktionskosten sind Schlüsselfaktoren für den erfolgreichen kommerziellen Einsatz. Das bei der Reaktion entstehende Wasser hat wiederum großen Einfluss auf die Effizienz und Lebensdauer der Brennstoffzellen. Simulationen können nun helfen, die Strömungsprozesse und die Verteilung des Wassers in den einzelnen Brennstoffzellenkomponenten besser zu verstehen und zu optimieren. In DuMu^x steht ein Modell zur Verfügung, welches die chemische Reaktion, die resultierende Stromdichte und die Wassermenge sowie die Ausbreitung des Wassers beschreibt und so einen Beitrag zur Weiterentwicklung dieser Technologie leistet.

5.2 Aktuelle Beispiele aus der Praxis

Zwei aktuelle Anwendungsgebiete der DuMu^x-Simulationen sollen hier genauer vorgestellt werden: CO₂-Speicherung und Wassermanagement in Brennstoffzellen.

Die geologische **Speicherung von CO₂** ist das zentrale Thema der im Exzellenzcluster Simulation Technology (SimTech) verfolgten Vision „Umwelttechnik“. Gleichwohl die CO₂-Speicherung vor allem in Deutschland höchst umstritten und gesellschaftlich derzeit nicht mehrheitsfähig ist, besitzt das Thema für die Umwelttechnik eine gleichbleibend hohe Relevanz. Eine Reihe von Anwendungen und Ingenieurproblemen lassen sich mit sehr ähnlichen Methoden, wie sie eben auch von DuMu^x bereitgestellt werden, beschreiben und behandeln, z.B. Untersuchungen zum Hydraulic Fracturing (Fracking) oder die dauerhafte Lagerung nuklearer Abfälle im Untergrund.

Den hier aufgeführten Problemstellungen ist gemein, dass Simulationswerkzeuge unverzichtbar sind, um Fragen zu auftretenden Risiken, zur Machbarkeit oder zum Design konkreter Projekte zu beantworten. Sie haben damit eine hohe gesellschaftliche Relevanz und sind für die fundierte Abwägung unterschiedlichster Methoden der Energieerzeugung und ihrer Umweltfolgen unabdingbar. Die unmittelbare Vernetzung von Sozialwissenschaftlern mit Ingenieurwissenschaftlern in gemeinsamen Projekten zur CO₂-Speicherung ist ein besonderes Merkmal der Arbeit im Rahmen von SimTech. Aus einer SimTech-Kooperation ist inzwischen ein neues Forschungsverbundvorhaben mit der Bundesanstalt für Geowissenschaften und Rohstoffe (BGR, Hannover) entstanden. Ziel ist es hier, einen partizipativen Modellierungsansatz zu verfolgen, der Stakeholder-Gruppen in verschiedenen Stufen des Modellierungsprozesses miteinbezieht, um einerseits die Rezeption von Modellierung und Simulation sowie deren Ergebnisse zu verbessern und andererseits Wege zu erforschen, wie sich die Transparenz beim Zustandekommen von Simulationsergebnissen und deren Interpretation optimieren lässt.

Der Pilotstandort Ketzin (www.co2ketzin.de), 40 Kilometer westlich von Berlin gelegen, ist die momentan einzige CO₂-Speicherstätte in Deutschland. Hier wurden

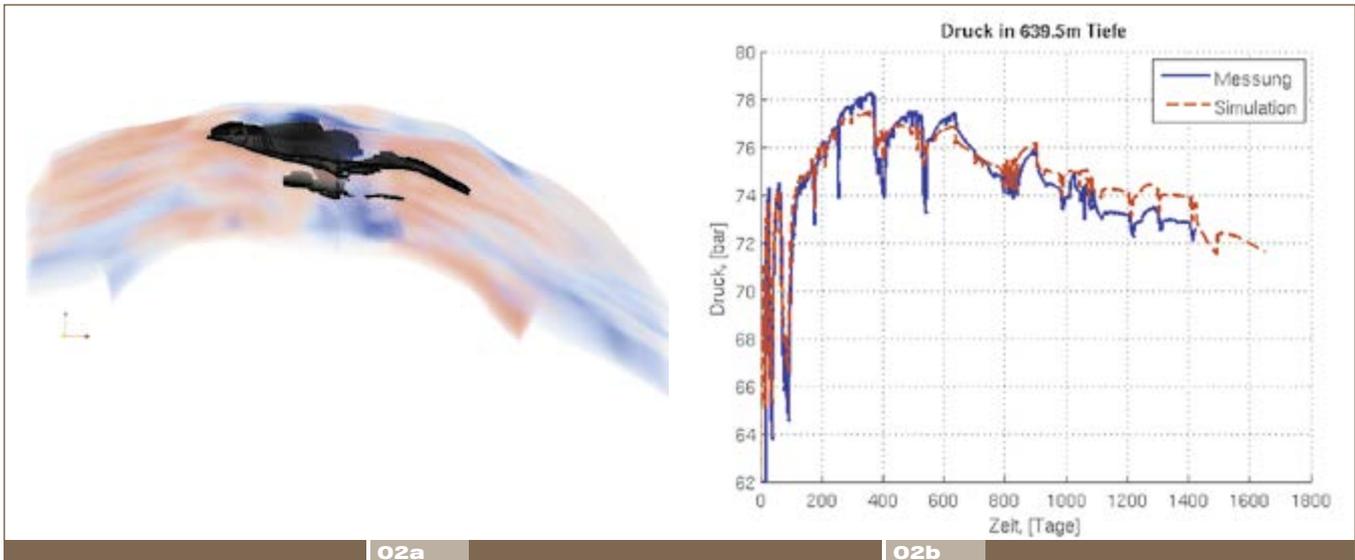
unter Leitung des Deutschen GeoForschungsZentrums GFZ von 2008 bis 2013 insgesamt knapp 70.000 Tonnen CO₂ gespeichert mit dem Ziel, das Wissen über die Speicherung von CO₂ und über die Prozesse, die dabei im Untergrund auftreten, zu erweitern sowie Erfahrungen mit der praktischen Umsetzung der Technologie zu sammeln. Das CO₂ wird dabei unterhalb eines ehemaligen Erdgasspeichers in 630 bis 650 Metern Tiefe in porösen Sandsteinschichten gespeichert.

Im Jahr 2004 wurde mit den vorbereitenden Arbeiten an der Speicherstätte begonnen. Unter anderem wurden drei Bohrungen, eine für die Injektion des CO₂ (Ktzi 201) und zwei weitere für das Monitoring und die Datenanalyse (Ktzi 200, Ktzi 202), errichtet. Die Beobachtungsbohrungen wurden in den Jahren 2011 und 2012 um zwei weitere ergänzt.

Im Juni 2008 wurde begonnen in die Bohrung Ktzi 201 CO₂ zu injizieren. Die Injektion wurde Ende August 2013 planmäßig nach der Einführung von 67.271 t CO₂ beendet. Für das Monitoring wurde der Druck an der Bohrung Ktzi 201 gemessen und CO₂-Sensoren in den beiden Beobachtungsbohrungen Ktzi 200 und Ktzi 202 angebracht, um so die Ankunftszeiten des CO₂ an den einzelnen Beobachtungsbohrungen zu bestimmen.

Über den gesamten Zeitraum, d.h. bereits beginnend mit der Vorbereitungsphase vor der Injektion wurden begleitende numerische Simulationen durchgeführt. Zunächst wurden Querschnittsaufgaben, wie die Untersuchung von Temperatureffekten angegangen. Diese unterstützten die Entwicklung des geologischen Modells, das auf Grundlage der Ergebnisse aus der Bohrkernanalyse und den seismischen Untersuchungen erstellt werden konnte. Das geologische Modell beinhaltet Daten über die Porositäts- und Permeabilitätsverteilung im Reservoir und es weist u.a. vergleichsweise gut durchlässige Sandkanäle auf, in welchen sich das CO₂ bevorzugt verteilen kann.

Mit dem bis dahin bestehenden geologischen Modell konnte die Ankunftszeit an der ersten Beobachtungsbohrung – Ktzi 200 – sehr gut abgeschätzt werden. Allerdings wurde der Druck an der Injektionsbohrung sowie die Ankunftszeit an der zweiten Beobachtungsbohrung stark unterschätzt. Eine zentrale Aufgabe der dynamischen Modellierung war das History



02

02a

02b

(a) Simulation der Ausbreitung von Kohlendioxid im Pilotspeicherstandort Ketzin nach 1652 Tagen. In blau und rot sind die unterschiedlichen Durchlässigkeiten der Speicherformation dargestellt.

(b) Vergleich zwischen berechnetem und gemessenem Druck im Injektionsbrunnen.

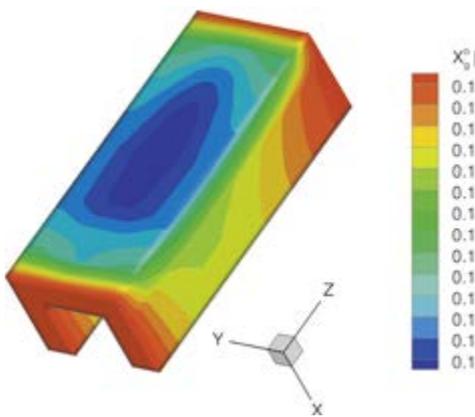
Matching für den Druck und die Ankunftszeiten mit dem laufend aktualisierten geologischen Modell [6]. Hierfür können verschiedene Herangehensweisen gewählt werden, die im Reservoir-Engineering zum Teil seit Jahren eingesetzt werden. Bei dem von uns gewählten Ansatz wurde das Modell zunächst durch inverse Modellierung kalibriert und anschließend ein geologisches Features (Sandkanals bzw. Ablagerung) lokal modifiziert. Dadurch konnte sowohl der Druck als auch die beiden Ankunftszeiten im numerischen Modell abgebildet werden.

Das **Wassermanagement** in Brennstoffzellen hat eine herausragende Bedeutung für das Leistungsverhalten einer Brennstoffzelle. Bei PEM (Polymer-Elektrolyt-Membran) Brennstoffzellen reagieren Sauerstoff und Wasserstoff zu Wasser. Die Membran leitet die Protonen von der Anodenseite zur Kathodenseite, wo ausreichend Sauerstoff vorliegen muss, um eine erfolgreiche Reaktion zu erzielen. Durch das Reaktionsprodukt Wasser werden die Porenräume auf

der Kathodenseite jedoch gefüllt, so dass es unter Umständen zu einer Limitierung des Sauerstofftransports vom kathodischen Gaskanal kommt. Dieser kann seinerseits nicht als ein poröses Medium beschrieben werden, da dort eine Gasströmung bei kleinen bis moderaten Reynolds-Zahlen statt-

findet. Die Aufgabe des Gaskanals ist es neben der Versorgung mit Sauerstoff auch für den Abtransport von Wasser (in Form von Dampf oder Tröpfchen) zu sorgen. Die Beschreibung der dort entstehenden Wassertropfen und der Interaktion zwischen Tropfen, Gasströmung und porösem Medium ist Gegenstand aktueller Forschung. Ein bestehendes Modell zur Kopplung freier und poröser Strömung wird dabei um Tropfenbildung, Tropfenwachstum und Ablösung erweitert. Darauf aufbauend soll der Transport der Tropfen in der Gasströmung und die Interaktion mit den hydrophilen Wänden des Gaskanals beschrieben werden.

Besonderes Augenmerk bei der Modellierung liegt daher auf der Grenzfläche zwischen poröser Gasdiffusionsschicht und Gaskanal. Dort kommt es zu Austauschprozessen und Tropfenbildung, wodurch die Wasserverteilung und damit die Leistung der Brennstoffzelle signifikant beeinflusst werden. Eine Herausforderung besteht in der Beschreibung eben dieser Grenzfläche, an der die unterschiedlichen Strömungskompartimente (poröses Medium – freie Strömung) zusammentreffen. Des Weiteren gilt es die vorwiegend hydrophoben Eigenschaften der Gasdiffusionsschicht zu beschreiben. Während der natürliche Untergrund typischerweise hydrophil ist, sodass Wasser in der Regel immer diejenige Fluidphase ist, die die Porenoberfläche am stärksten benetzt, ist dies in der Gasdiffusionsschicht einer Brennstoffzelle infolge der hydrophoben Beschichtung genau umgekehrt. Dem



03

Zu sehen ist der Sauerstoffanteil in der Gasphase im simulierten Modellgebiet einer PEM Brennstoffzelle. Dieses umfasst einen Ausschnitt der Gasdiffusionsschicht mit zwei halben Gaskanälen. Durch die Reaktion, welche in der Reaktionsschicht – der nach oben gewandten Fläche – stattfindet, wird die Sauerstoffkonzentration reduziert.

ZUSAMMENFASSUNG

Die Entwicklung eines Open-Source-Simulators zur Modellierung von Strömungs- und Transportprozessen in porösen Medien für komplexe Ingenieur Anwendungen ist das zentrale Anliegen des Projekts DuMu^x (dumux.org). In diesem Beitrag werden das Entwicklungskonzept vorgestellt und Einsatzmöglichkeiten aufgezeigt. Anhand von Beispielen werden einerseits aktuelle Methodenentwicklungen (z.B. Kopplung von Modellen, Upscaling und Multi-Skalen-Ansätze, Adaptivität) und andererseits interessante Anwendungsbereiche (z.B. CO₂-Speicherung, Brennstoffzellen) diskutiert. Daran wird deutlich, dass die Entwicklung grundlegender Methoden nicht isoliert von den Problemen der Anwendungsbereiche erfolgt, und dass durch die Implementierung in DuMu^x eine Anwendung auf problemrelevanter Skala leichter realisiert werden kann.

muss in entsprechend angepassten Konstitutivbeziehungen für relative Permeabilität und Kapillardruck Rechnung getragen werden. Die zuverlässige Bestimmung dieser Beziehungen ist allerdings noch ein weitgehend ungelöstes Problem.

Schlussbemerkungen

Mit DuMu^x, so konnte gezeigt werden, können also unterschiedlichste Strömungs- und Transportprozesse in porösen Medien simuliert werden und für diverse Anwendungen nutzbar gemacht werden. Die Einhaltung von Open-Source-Entwicklungsprinzipien garantiert, dass die Software nachhaltig für jeden interessierten Nutzer zur Verfügung steht. Damit schafft DuMu^x eine Grundlage für mehr Transparenz und Reproduzierbarkeit der durchgeführten Simulationen. Die Simulationstechnologie benötigt dringend diese Transparenz, um in Zeiten immer komplexer werdender Rechenmodelle und anwachsender Datenmengen glaubhaft und nachvollziehbar zu bleiben. •

Bernd Flemisch,
Holger Class,
Markus Wolff,
Lena Walter,
Rainer Helmig

Referenzen

- [1] Flemisch, B., Darcis, M., Erbertseder, K., Faigle, B., Lauser, A., Mosthaf, K., Müthing, S., Nuske, P., Tatomir, A., Wolff, M. and R. Helmig. DuMu^x: DUNE for Multi-Phase, Component, Scale, Physics ... } Flow and Transport in Porous Media. *Advances in Water Resources* 34, 110–1112, (2011).
- [2] Helmig, R., Flemisch, B., Wolff, M., Ebigbo, A. und H. Class: Model coupling for multiphase flow in porous media. *Advances in Water Resources* 51, 52–66, (2013).
- [3] Wolff, M., Flemisch, B., and R. Helmig. An adaptive multi-scale approach for modeling two-phase flow in porous media including capillary pressure. *Water Resources Research*, accepted.
- [4] Faigle, B., Helmig, R., Aavatsmark, I., and B. Flemisch. Efficient multi-physics modelling with adaptive grid-refinement using a MPFA method. *Computational Geosciences*, submitted.
- [5] Christie, M. A., and M. J. Blunt. Tenth SPE comparative solution project: A comparison of upscaling techniques. *SPE Reservoir Evaluation & Engineering*, 4, 308–317, (2001).
- [6] Kempka, T., Class, H., Görke, U.-J., Norden, B., Kolditz, O., Kühn, M., Walter, L., Wang, W. und B. Zehner. A dynamic flow simulation code intercomparison based on the revised static model of the Ketzin pilot site. *Energy Procedia* 40, 418–427 (2013).

DIE AUTOREN



BERND FLEMISCH

studierte von 1997 bis 2001 an der Universität Augsburg und der Iowa State University Mathematik. Zwischen 2001 und 2006 war er wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Universität Stuttgart und promovierte dort Ende 2006 im Bereich Angewandte Mathematik. Seit 2007 ist er am Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung tätig und leitet dort die Entwicklung von DuMu^x (*dumux.org*). Er habilitierte sich im Jahr 2013.



HOLGER CLASS

studierte von 1992 bis 1997 an der Universität Stuttgart Bauingenieurwesen, promovierte an der Technischen Universität Braunschweig im Jahr 2000. Seitdem arbeitet er an der Universität Stuttgart und habilitierte sich dort im Jahr 2008. Er ist u.a. verantwortlich für die Arbeitsgruppe CO₂-Speicherung innerhalb des Lehrstuhls für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung.



MARKUS WOLFF

studierte von 2002 bis 2008 an der Universität Stuttgart Umweltschutztechnik und promovierte im Jahr 2013 im Bereich der Simulationstechnik für Strömungsprozesse in porösen Medien am Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung.



LENA WALTER

studierte von 2003 bis 2008 an der Universität Stuttgart Umweltschutztechnik und promovierte im Jahr 2013 am Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung über die Risikoabschätzung der CO₂-Speicherung mit Hilfe von Simulationsmodellen.



RAINER HELMIG

leitet den Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung seit dem Jahr 2000. Zuvor war er nach Promotion an der Universität Hannover (1993) und Habilitation an der Universität Stuttgart (1996) in den Jahren 1997 bis 2000 Professor an der TU Braunschweig. Er ist Mitglied des Direktoriums von SimTech und Sprecher des Internationalen Graduiertenkollegs Nupus.

Kontakt

Universität Stuttgart, Institut für Wasser- und Umweltsystemmodellierung, Lehrstuhl für Hydromechanik und Hydrosystemmodellierung
 Pfaffenwaldring 61, D-70569 Stuttgart
 Tel. +49 (0) 711/685-64749, Fax +49 (0) 711/685-60430
 E-Mail: rainer.helmig@iws.uni-stuttgart.de
 Internet: <http://www.hydrosys.uni-stuttgart.de>

Auf dem Weg zu einer Cyber-Infrastruktur für die Simulationstechnik



Simulationstechnik ist seit Jahrzehnten unersetzlich bei der Erforschung komplexer, naturwissenschaftlicher und ingenieurwissenschaftlicher Phänomene, aber auch in den Lebenswissenschaften und den Geisteswissenschaften. Der Fortschritt in den Techniken für Modellierung und Simulation und auch im Bereich des Hardware- und Software-Komponentenentwurfs hat dazu beigetragen, neuartige Synergien zwischen Wissenschaftlern und den Informationstechnologien zu identifizieren. Im Rahmen des Exzellenzclusters „Simulation Technology“ (SimTech) der Universität Stuttgart liegt ein Fokus auf der Entwicklung von Methoden und Techniken für die IT-Unterstützung. Die bis dato isolierten Simulationsansätze und IT-Infrastrukturen sollen zusammengebracht, also integriert, werden, um so eine ganzheitliche Systemwissenschaft zu entwickeln.

1. Einführung

Ein Hauptziel von SimTech ist es, mit einer neuartigen und mächtigen IT-Infrastruktur die IT-Unterstützung für Simulationen zu verbessern. Diese soll den Wissenschaftlern helfen, sich auf die eigentlichen Aufgaben ihrer Forschung zu konzentrieren. Eine solche Infrastruktur, auch Cyber-Infrastruktur genannt, umfasst ein Netz von Hochleistungsrechenplattformen, Software-Programmen und -Werkzeugen, Sensornetze, Speicher, Rechenressourcen- und Datenverwaltungssysteme sowie Visualisierungsumgebungen. Auf dem Weg zur Cyber-Infrastruktur wurden bereits in Zusammenarbeit mit Naturwissenschaftlern IT-Ansätze für die Datenverwaltung und Visualisierung entwickelt, mit denen die Effizienz der Modellierung und die Ausführung von Simulationen, sowie die interaktive Visualisierung der Simulationen und der Simulationsergebnisse unterstützt werden. Die Cyber-Infrastruktur soll die Anforderungen heutiger Simulationstechnik erfüllen wie beispielsweise Automatisierung von Simulationsverfahren, Benutzerfreundlichkeit, Wiederverwendbarkeit der Simulations-Software und Ressourcen, effizienter Umgang mit großen Datenmengen und Datenbereitstellung, Langläufigkeit der Simulationen, interaktiver Umgang zwischen Simulationen und Wissenschaftlern, Bereitstellung von Echtzeitdaten aus Sensornetzen und mobilen Geräten für die Simulationen, interaktive Visualisierung und Analyse von großen Datenmengen, die auch Unsicherheiten aufweisen können. Die Cyber-Infrastruktur soll zudem hochskalierbar sein und eine dynamische Ressourcen- und Datenverwaltung bereitstellen.

In diesem Beitrag geben wir eine Übersicht über unsere Forschungserfolge und stellen unsere Ideen für die zukünftige Forschung vor.

2. Infrastruktur für interaktive Simulationen

2.1. Konzepte für die Modellierung und Ausführung von Simulationsworkflows

Ein wichtiges Ziel der bisherigen Forschung von SimTech war die Konzeption und Realisierung einer IT-Infrastruktur für

Simulationen, die an die Bedürfnisse der Wissenschaftler während ihrer Forschung angepasst ist. Haupteigenschaft einer solchen Infrastruktur muss die Benutzerfreundlichkeit sein, also eine einfache Nutzung sowohl bei der Modellierung von Experimenten aus unterschiedlichen naturwissenschaftlichen und ingenieurwissenschaftlichen Bereichen als auch bei der Ausführung und Anpassung des Verlaufs eines Experiments und ebenso bei der Visualisierung der Ergebnisse.

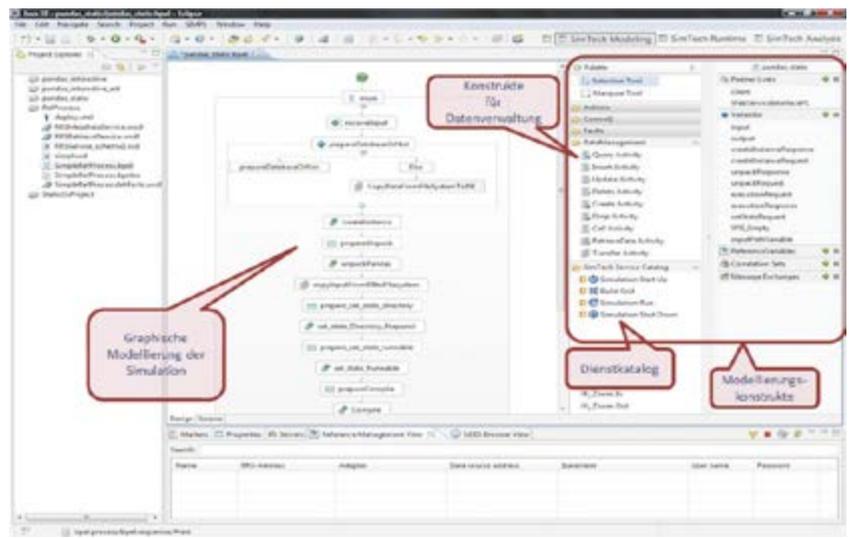
Um diese Ziele zu erreichen, wurden bewährte Konzepte, Techniken und Technologien aus der Informatik und Software-Technik angewandt, die hohe Akzeptanz im Geschäftsbereich genießen, wie etwa die Workflow-Technologie. Unter Verwendung des Workflow-Konzepts wurde die *Modellierung* (siehe **(01A)**) einer Simulation einfacher gestaltet, da die Experimente mit Hilfe eines grafischen Modellierungswerkzeugs schnell, effizient und einfach zu erstellen sind, ohne jegliches Wissen über die Software, die diese Schritte genau umsetzt (also implementiert). Ergebnis der Modellierung ist ein Workflow-Modell, das eine Simulation darstellt. In einem Workflow-Modell werden sowohl die Schritte (auch Aktivitäten genannt) einer Simulation definiert als auch die richtige Reihenfolge, in der diese Schritte ausgeführt werden müssen. Die bedingte Ausführung von Aktivitäten ist einfach zu modellieren, ebenso die sequenzielle als auch parallele Ausführung. Die Aktivitäten in einer Simulation können dabei für Datenbearbeitungsprogramme oder Berechnungsfunktionen stehen, welche in naturwissenschaftlichen Simulationen gebraucht werden. Das erstellte Modell kann parametrisiert werden, sodass es mit unterschiedlichen Parameterwerten ausgeführt werden kann. Diese Parameter werden aber erst bei der Ausführung angegeben, somit wird die Wiederverwendbarkeit der Modelle ermöglicht. Die Wiederverwendbarkeit der Simulationsmodelle wird zusätzlich gesteigert durch die Entkopplung des Modells von den Software-Programmen, mit denen die einzelnen Schritte realisiert werden. Das führt dazu, dass das gleiche Simulationsmodell, also der gleiche Simulationsworkflow, mehrmals verwendet werden kann um unterschiedliche Software für die Ausführung der Simulationsschritte zu kombinieren. Die Verbindung zwischen einer Akti-

lich verwenden zu können. Die Dienstorientierung konnte die Heterogenität der Simulations-Software beseitigen und hat die Integration für die Wissenschaftler erleichtert. Konkret haben wir gängige Service-Middleware um generische Adapter für unterschiedliche Simulations-Software erweitert wie z.B. Opal [3], Dune und PAN-DAS.

Diese Dienste wurden in einem grafischen Modellierungs-Werkzeug zur Verfügung gestellt, so dass sie von den Wissenschaftlern direkt in einem Simulationsmodell eingebunden werden können (siehe (02)). Damit wird die Komplexität der Software-Integration vor den Wissenschaftlern verborgen und die Benutzerfreundlichkeit der gesamten Infrastruktur verbessert.

Viele Schritte während einer Simulation werden von Wissenschaftlern durchgeführt, wie z.B. die Bewertung von Zwischenergebnissen oder die Parametereingabe. Die besondere Berücksichtigung von menschlichen Benutzern in dienstorientierten Simulations-Workflows war eine der Herausforderungen in der Forschungsarbeit. Um für die Wissenschaftlern angepasste Möglichkeiten zu schaffen, über gängige Kommunikationsmittel mit den Simulationsworkflows zu interagieren, wurde die Architektur des WfMS um akzeptierte Interaktionskanäle wie beispielsweise Benachrichtigungen und Rückmeldungen per E-Mail oder Skype erweitert [2]. Mit diesen Techniken ist es zum Beispiel möglich, dass ein Wissenschaftler eine lang laufende Simulation startet und dann auf eine Konferenzreise geht. Treten während der Ausführung der Simulation Fehler auf, so wird der Wissenschaftler per Skype oder, falls er zu diesem Zeitpunkt nicht online ist, per E-Mail benachrichtigt. Er kann dann, wiederum per Skype oder E-Mail, auf diese Meldung reagieren und beispielsweise Parameter so verändern, dass die Simulation weiter ausgeführt werden kann.

Wissenschaftler folgen sowohl bei der Erstellung von Simulationen als auch bei der Durchführung von Experimenten fast immer der Trial-and-Error-Methode, also dem beständigen Wechsel zwischen der Modellierung und der Ausführung einer Simulation, ein Kennzeichen der interaktiven Natur der naturwissenschaftlichen Experimente. Dieser Hauptunterschied sowie weitere Unterscheidungen zu den herkömmlichen Workflows werden in (01)



Modellierungswerkzeug
für Simulations-Workflows

dargestellt. Um die Trial-and-Error-Methode weiter zu unterstützen, wurden die Workflow-Technologie und die entsprechende Infrastruktur, also Modellierungswerkzeug, Ausführungsumgebung und Monitoring erweitert. Dieser Ansatz wird *Model-as-You-Go* genannt und hilft den Wissenschaftlern, einen unvollständigen Simulations-Workflow während der Ausführung zu vervollständigen, also weiter zu modellieren. Dies war in den existierenden Workflow-basierten Ansätzen nicht möglich, weil die Vollständigkeit des Workflow-Modells für eine Ausführung vorausgesetzt war. Der *Model-as-You-Go-Ansatz* gibt den Wissenschaftlern die Möglichkeit, die laufenden Simulationen zu verändern und dabei mit ihnen wie bei der Erstellung eines Simulationsmodells zu interagieren. Dies wurde durch die Integration des Modellierungswerkzeugs mit dem WfMS ermöglicht. Dabei werden die Änderungen im Modell an das WfMS und die Informationen über den Verlauf der Simulation an das Modellierungswerkzeug übertragen. Um den Verlauf der Simulationen zu beobachten, wurden die Monitoring-Mechanismen aus der herkömmlichen Workflow-Technologie übernommen und erweitert, um die oben genannte bidirektionale Interaktion zu ermöglichen [4]. Beispielsweise kann ein Wissenschaftler, der die Strukturänderung von Knochen simulieren möchte, einen oder mehrere Schritte im Simulationsworkflow zurückgehen, wenn er erkennt, dass die bisher angenommenen Parameter nicht zu dem gewünschten Ergebnis führen. Dabei

bleiben die Ergebnisse bisheriger Workflow-Schritte erhalten, was insbesondere bei lang laufenden Simulationen wünschenswert ist.

Weitere Herausforderungen beim Einsatz von Simulationsworkflows bestehen in der Verwaltung der Datenmengen, die eine Simulation benutzt oder produziert, und in der Unterstützung von Echtzeiteigenschaften sowie der Visualisierung der Ergebnisse der Simulationen. Die neuartigen Konzepte zur Unterstützung von Simulationsworkflows, die oben beschrieben wurden, lassen sich mit generischen Konzepten und Mechanismen, die diese Herausforderungen bewältigen, erweitern. Diese Aspekte werden in den nächsten Kapiteln im Detail diskutiert.

2.2. Unterstützung von verzahnten Simulationen

In Zukunft sollen die Konzepte und die Infrastruktur so erweitert werden, dass es möglich wird, auch komplexe Interaktionen zwischen einzelnen Simulationen zu modellieren und auszuführen. Ziel ist die Erstellung von Multiskalen-, Multi-Physik-Simulationen auf Basis von einzelnen Simulationsworkflows, die in unterschiedlichen naturwissenschaftlichen Bereichen bereits vorhanden sind. Simulationen, die sich zu einer komplexeren Simulation – wie z.B. der ganzheitlichen Simulation des menschlichen Körpers (also von der Molekularebene, Zellebene bis zur Skelett-Simulation) und Simulationen von Festkörpern (auf Atomebene, Molekularebene und Makroebene) – zusammensetzen lassen, sind verzahnt und tauschen ständig Daten in einer bestimmten Interaktionsreihenfolge aus. Die Durchführung solcher komplexen Simulationen und die Integration der oft verteilten Simulationen soll von einer *Cyber-Infrastruktur* übernommen werden. Durch dieses Zusammenspiel wird auch die Kooperation von Wissenschaftlern aus unterschiedlichen Organisationen und Bereichen wesentlich vereinfacht.

Die verzahnten Simulationen werden mit Hilfe von so genannten *Choreographien* modelliert. Choreographien definieren die korrekte Interaktionsreihenfolge und den Datenaustausch von Workflows und sind bereits ein erprobtes Konzept bei Geschäftsanwendungen. Die dort bekannten Modellierungskonzepte und Korrelations-

mechanismen sollen auch für die Modellierung von verzahnten Simulationen übernommen und angepasst werden, um die komplexe Kopplung und die Kontextabhängigkeiten zwischen den Simulationen zu ermöglichen. Ein Beispiel ist die Kopplung einer Festkörpersimulation, die das Verhalten von Kupferatomen im Eisenatomgitter im Lauf der Zeit simuliert, mit einer Molekulardynamiksimulation, die die Scherkräfte, d.h. in unterschiedliche Richtungen ziehende Kräfte auf ein Eisengitter simuliert. Die Ergebnisse dieser so genannten Kinetischen Monte-Carlo-Simulation sollen vollautomatisch in die Molekulardynamiksimulation fließen. Bisher sind diese Simulationen nicht automatisch gekoppelt und der Datentransfer erfolgt durch manuelles Kopieren. Eine Modellierung mit Hilfe von Choreographien soll hier eine automatisierte Verzahnung der beiden Simulationen ermöglichen. Dadurch kann die Durchführung umfangreicher und komplexer Parameterstudien deutlich beschleunigt und damit erst sinnvoll anwendbar gemacht werden.

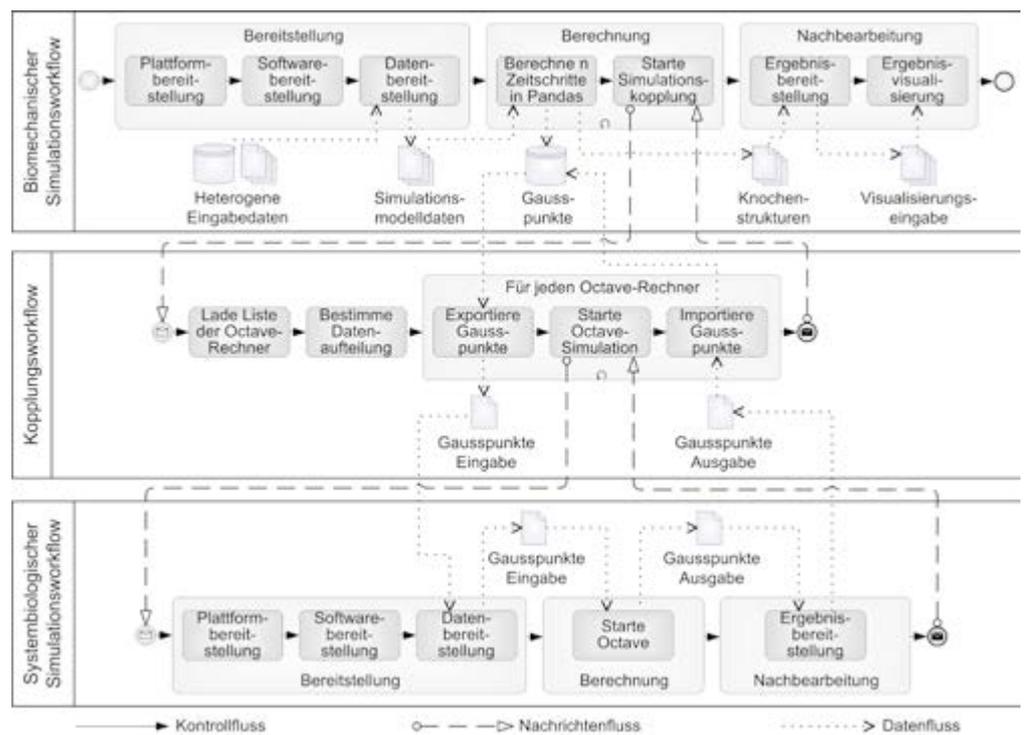
Um die Ausführung verzahnter Simulationen effizienter zu gestalten, soll vor allem das Potenzial existierender Cloud-Infrastrukturen genutzt werden. Cloud-Infrastrukturen stellen Zugriff auf Rechen- und Speicherressourcen nach dem Pay-Per-Use-Modell zur Verfügung. Es gehört zu den Zielen der aktuellen Forschung, das SimTech WfMS selbst in der Cloud bereitzustellen, um diese Ressourcenkapazität auszunutzen. Auch die verzahnten Simulationen sollen einmal in der Cloud ausgeführt werden können [5].

3. Der Umgang mit Daten für Simulationsworkflows

Simulationsworkflows müssen oftmals große Datenmengen verarbeiten, die in einer Vielzahl unterschiedlicher Formate vorliegen. Damit diese Daten von den im Workflow eingebundenen Programmen verarbeitet werden können, müssen sie entsprechend bereitgestellt und dabei in die passenden Formate transformiert werden. Der in (03) gezeigte Kopplungsworkflow muss z.B. Daten von einem Datenbank-basierten Format der biomechanischen Simulation in ein spezifisches Dateiformat der systembiologischen Simulation transformieren. Außerdem benötigt die systembiologische Simulation nur einen

Teil der Daten der biomechanischen Simulation, so dass dieser Teil der Daten entsprechend aus der Datenbank ausgewählt und extrahiert werden muss. Dies erhöht die Komplexität der Workflowmodellierung. Die Workflows werden dabei i.d.R. von den an den Simulationsergebnissen interessierten Wissenschaftlern selbst modelliert. Da Wissenschaftler aber selten vertiefte Kenntnisse im Bereich der Workflowmodellierung und der Datenbereitstellung besitzen, bedeutet dies, dass sie sich weniger auf ihre Kernaufgaben konzentrieren können, d.h. auf die Entwicklung von mathematischen Simulationsmodellen, die Durchführung der Simulationen und die Interpretation der Ergebnisse.

Zur Behebung dieses Problems wurde ein Rahmenwerk entwickelt (*SIMPL – SimTech, Information Management, Processes, and Languages*), mit dem die Aktivitäten zur Datenbereitstellung in Simulationsabläufen auf einfache Weise modelliert werden können [6, 7]. Wissenschaftler sollen keine Implementierungsdetails spezifizieren müssen, sondern lediglich die Kernaspekte der Datenbereitstellung in Form von Patterns (Muster) beschreiben, welche typische Datenbereitstellungsschritte in Simulationsworkflows darstellen. Jedes Pattern fasst mehrere feingranulare Workflow-Schritte zusammen, was bereits die Anzahl der für Wissenschaftler sichtbaren Schritte reduziert. Weiterhin müssen Wissenschaftler nur wenige abstrakte Parameterwerte für die Patterns spezifizieren. Wenn für eine Simulation beispielsweise Daten von einem Computer auf einen anderen transferiert werden müssen, so nutzen Wissenschaftler hierfür ein entsprechendes Datentransferpattern. Als Parametrisierung dieses Patterns werden lediglich der Speicherort der Eingabedatei sowie das Programm, für welches die Datei bereitgestellt werden soll, festgelegt. Um komplizierte Details, wie z.B. die oben beschriebene Transformation der Daten zwischen verschiedenen Formaten, müssen sich die



03

Wissenschaftler dabei nicht kümmern. Über diese Abstraktionsunterstützung hinaus wurden Maßnahmen zur Effizienzsteigerung der Datenverarbeitung in Simulationsworkflows untersucht. Dabei wurde insbesondere ein Ansatz entwickelt, welcher die Verarbeitung von Daten im lokalen Speicher eines Workflows optimiert [8].

Auf Basis des SIMPL-Rahmenwerks wurde das so genannte „Comprehensive Data Management Layer“ (CDML) entwickelt [9]. Das CDML wird speziell im Maschinenbau eingesetzt und löst die Heterogenität von Programmen und Datenquellen aus verschiedenen Projektphasen oder Organisationseinheiten eines Unternehmens auf. Es ermöglicht insbesondere, computerbasierte Simulationen mit echten physischen Tests, z.B. Crashtests von Autos, zu kombinieren und damit die Kosten von Produkttests zu reduzieren.

In Zukunft soll das beschriebene SIMPL-Rahmenwerk für die Datenbereitstellung in Simulationsworkflows zu einer vollständig datengetriebenen Simulationsinfrastruktur weiterentwickelt werden. Dabei wird insbesondere die Reproduzierbarkeit und Nachvollziehbarkeit von Simulationen und ihren Ergebnissen sowie die Bewertung von Simulationsmodellen unterstützt. Hierzu ist die umfassende

Workflows für eine Simulation des Knochenwachstums, welche z.B. bei Osteoporose-Patienten eingesetzt wird. Die Simulation koppelt zwei mathematische Simulationsmodelle. Das biomechanische Modell beschreibt den Knochen auf einer makroskopischen Gewebeebene. Das systembiologische Modell arbeitet etwas genauer, indem es die Interaktion von Zellen innerhalb des Knochengewebes betrachtet. Jedes Modell wird durch einen eigenen Simulationsworkflow realisiert, während der zusätzliche Kopplungsworkflow den Datenaustausch zwischen diesen beiden Modellen durchführt.

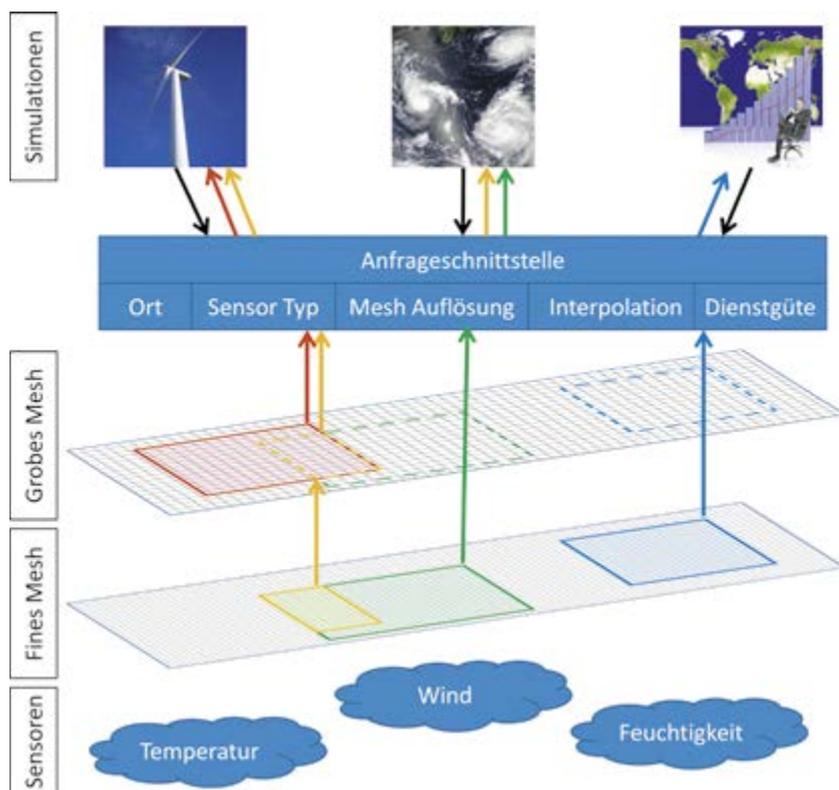
Sammlung und Verwaltung so genannter Provenance-Informationen erforderlich. Dies sind Metriken und Beschreibungsdaten zu den Simulationsabläufen und den Simulationsergebnissen. Diese Provenance-Informationen beschreiben u.a., wann welcher Workflow-Schritt ausgeführt wurde, welches Programm mit welchen Eingabedaten dabei verwendet wurde und wie lange diese Ausführung gedauert hat. Das Erfassen von Provenance-Informationen ist aber nur der erste Schritt. Hat man diese erst einmal erfasst, dann können sie die Grundlage für vielfältige Analysen bilden, wobei fortgeschrittene Analysemechanismen hierfür erst noch entwickelt werden müssen. Die Provenance-Analyse wird Wissenschaftlern maßgeblich helfen, ihre Simulationsergebnisse und Simulationsmodelle besser verstehen

lyse helfen, indem sie Zusammenhänge zwischen solchen Parameteränderungen und den Simulationsergebnissen untersucht und z.B. Empfehlungen gibt, inwieweit der CO₂-Ausstoß verringert werden sollte. In Kombination mit dem bereits entwickelten SIMPL-Rahmenwerk wird diese Analyse von Provenance-Informationen die Produktivität der Wissenschaftler weiter deutlich erhöhen.

4. Simulationen in Echtzeit – Das Global Sensor Grid

Echtzeitsimulationen werden immer wichtiger, um Entscheidungen anhand der Entwicklungen eines physischen Phänomens zu treffen. Beispielsweise ermöglichen Kenntnisse über die zukünftige Entwicklung eines Windfeldes zahlreiche Anwendungen, z.B. die Optimierung der Stromerzeugung aus Windkraft bis hin zur Analyse der Ausbreitung von Schadstoffen. Um die Qualität der Simulationsergebnisse zu verbessern, nutzen Simulationen zur Parametrisierung verstärkt Echtzeitdaten aus Sensoren. Dabei können Simulationen auf eine ständig wachsende Infrastruktur aus vielen weltweit verteilten Sensoren und Sensornetzen zurückgreifen. So wurden allein im Rahmen des Earthscope-Projektes [10] tausende von seismischen Sensoren primär an der Westküste der USA ausgebracht, um zukünftig besser auf Erdbeben reagieren zu können. Andere Projekte wie das CENSE-Projekt von HP [11] gehen gar von Billionen von Sensoren in absehbarer Zukunft aus, auf welche jeweils eine Vielzahl verschiedener Echtzeitsimulationen gleichzeitig zugreifen können.

Die enormen Datenvolumina und die Heterogenität, mit der Daten von Simulationen bereitgestellt werden müssen, stellen IT-Infrastrukturen vor enorme Herausforderungen hinsichtlich der skalierbaren Integration dieser Daten. Dazu wurde das Global Sensor Grid (GSG) entwickelt, welches ein breites Spektrum von Methoden bietet, um eine skalierbare Integration von Sensordaten in Simulationen sicherzustellen. Das GSG wird durch eine Menge global verteilter Rechner realisiert, die die Vermittlung von Sensordaten zwischen verschiedenen Sensornetzen und Konsumenten, also den angebundenen Simulationen, sicherstellen. Diese Rechner bilden ein Netzwerk von Vermittlungsknoten,



und validieren zu können. Weiterhin wird die Analyse Empfehlungen für Optimierungen von sowohl Simulationsworkflows als auch Simulationsmodellen geben. In der Klimaforschung möchten Wissenschaftler z.B. mithilfe von Simulationen die Auswirkungen von Änderungen des CO₂-Ausstoßes auf das Weltklima erforschen. Hierbei kann die Provenance-Ana-

die an strategisch wichtigen Punkten sitzen, beispielsweise nahe an den jeweiligen Sensoren oder den Konsumenten sowie an zentralen Umschlagpunkten im Netzwerk, um bei der Übertragung und Vermittlung von Daten sowohl eine möglichst geringe Verzögerung als auch eine effiziente Nutzung der Bandbreite im vermittelnden Netz zu garantieren.

Die Anbindung eines Sensornetzes an das GSG erfolgt durch die Bereitstellung eines oder mehrerer als Gateway bezeichneter Vermittlungsknoten. Zu diesen werden sensornetzspezifische Daten übertragen und vorverarbeitet, so dass diese den Simulationen in einem globalen Koordinatensystem zugänglich gemacht werden können. Konsumenten können an beliebige Vermittlungsknoten angebinden werden und über eine einfache Anfrageschnittstelle (siehe (04)) definieren, welche Sensordaten gefunden und zugänglich gemacht werden sollen. Dies beinhaltet insbesondere die Art der Sensordaten, die geografische Ausdehnung sowie die Häufigkeit mit der Sensordaten gemessen und gesendet werden sollen. Beispielsweise kann eine Windfeld-Simulation sämtliche verfügbaren Winddaten in der Umgebung von Stuttgart mit einer Aktualisierungsrate von zehn Minuten fordern. Die Vermittlungsknoten ermitteln dann kooperativ Gateways und optimale Pfade im Netz zwischen Gateways und Konsumenten. Zur Minimierung der Bandbreite werden insbesondere Überlappungen in den Datenströmen zwischen Gateways und Konsumenten genutzt [10], um gemeinsame Vermittlungsstrecken im Vermittlungsnetz zu nutzen. Sollte also eine weitere Simulation sich für Windfelddaten interessieren, werden diese möglichst gemeinsam im Netz übertragen und somit redundante Übertragungen vermieden. Ferner ermöglicht der Einsatz von Prädiktionstechniken [13] eine signifikante Reduktion der Verzögerungen und der genutzten Bandbreite. Falls also keine Änderung der gemessenen Winddaten erfolgt oder sich das Windfeld gemäß des Modells eines Prädiktors verändert, müssen diese nicht über das Netz übertragen werden, sondern stehen der Simulation direkt durch das Prädiktormodell zur Verfügung. Die für das GSG entwickelten Methoden zur autonomen Anpassung ermöglichen eine hohe Anpassungsfähigkeit an geänderte Anfragen der Konsumenten. Gerade bei Anfra-

gen, die sich auf ein bewegliches physisches Phänomen konzentrieren, kann somit der Anfragebereich dynamisch und effizient angepasst werden. Gleichzeitig können neue Vermittlungsknoten und Sensornetze einfach und effizient integriert werden. Mit dem rasanten Fortschritt bei der Verbreitung mobiler Geräte wird die Fragestellung der Integration dieser Geräte im Kontext von Echtzeitsimulationen immer bedeutender. Die Forschung an dem GSG richtet sich daher in Zukunft insbesondere auf zwei wichtige Anwendungsfälle. Einerseits sollen Echtzeitsimulationen verstärkt von der Nutzung der auf mobilen Geräten befindlichen Sensoren profitieren können. Dies erfordert insbesondere Konzepte zur Integration der mit Unsicherheiten behafteten Daten in eine Echtzeitsimulation. Andererseits soll eine effiziente Integration der Sensordaten in Simulationen erfolgen, so dass sogar eine Ausführung von Echtzeitsimulationen auf eher ressourcenschwachen mobilen Geräten erfolgen kann. Zur Unterstützung der Ausführung von Simulationen soll dazu die Anbindung an moderne IT-Infrastrukturen untersucht werden, auf denen die Berechnungen der Simulationen teilweise aus der Ferne ausgeführt werden können. Weiterhin soll durch eine Reduktion der Modelle einer Simulation [14] der Ressourcenbedarf einer Echtzeitsimulation reduziert werden, so dass letztlich sogar eine vollständige Ausführung auf einem ressourcenschwachen Gerät erfolgen kann. Da die Reduktion der Simulationsmodelle typischerweise auch eine Abnahme der Qualität der Simulation erzeugt, werden im Rahmen des GSG Methoden untersucht, um den erforderlichen Ressourcenbedarf und den Energieverbrauch von Echtzeitsimulationen zu minimieren und gleichzeitig eine für den Nutzer genügende Qualität der Echtzeitsimulation bei reduzierten Modellen und unsicheren Daten zu garantieren.

5. Visualisierung für die Simulationstechnik

Die Visualisierung ist ein wichtiges Werkzeug bei der Analyse von Simulationsergebnissen. Häufig können die komplexen Daten, die bei Simulationen entstehen, nur durch eine geeignete visuelle Darstellung verstanden werden. Zum Beispiel kann die Bewegung von Teilchen in Luft-

strömungen viel leichter untersucht werden, wenn Bahnlinien visuell dargestellt werden. Daher spielt die Visualisierung im heutigen Arbeitsablauf der Simulationstechnik eine entscheidende Rolle und ist als Analysewerkzeug nicht mehr wegzudenken. Gerade bei komplexen Simulationen, die durch Simulationsworkflows gestaltet werden, ist die Visualisierung unverzichtbar.

Neben der Entwicklung vollständig neuer Visualisierungsmethoden spielt die Beschleunigung bestehender Verfahren eine wichtige Rolle, da die Visualisierung häufig interaktiv eingesetzt wird und deshalb schnell genug auf Benutzereingaben reagieren muss. Ein typisches Beispiel hierfür ist die Visualisierung von Strömungssimulationen: Hierfür müssen typischerweise sehr viele Bahnlinien oder ähnliche Kurven berechnet und dargestellt werden, was bei großen Datensätzen leicht mehrere Minuten in Anspruch nehmen kann. Ein neuartiges Berechnungsverfahren [15] erlaubt seit kurzem – zusammen mit der Ausnutzung der Leistungsfähigkeit moderner Grafik-Hardware (engl. Graphics Processing Units: GPUs) – die hoch-effiziente und parallele Berechnung dieser Kurven.

Wenn die Berechnungen, die der Visualisierung zugrunde liegen, schnell genug für die Benutzerinteraktion sind, bietet sich die interaktive Erkundung der Simulationsdaten an. Beispielsweise können Parameter für eine optimale

Darstellung angepasst werden; oder der Benutzer vergrößert bestimmte Bereiche oder lässt sich zusätzliche Informationen an relevanten Punkten der Simulation anzeigen, z.B. die Bahnkurven von dort startenden Partikeln. Bei den komplexen Daten aus heutigen Simulationsrechnungen ergeben sich jedoch sehr feine Strukturen in der visuellen Darstellung. Deshalb ist es wichtig, eine exakte Navigation und Positionierung durch den Benutzer zu gewährleisten.

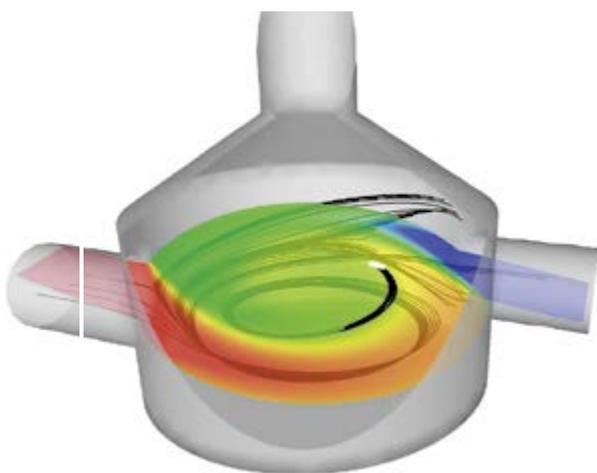
Wir haben eine entsprechende Interaktionstechnik entwickelt, die die Positionierungsgenauigkeit bei Strömungsvisualisierungen automatisch an die Daten

anpasst und so die Analyse selbst von feinsten Strukturen erlaubt [16]. So kann der Benutzer auch in komplexen 3D-Strömungsdaten mit seiner gewohnten Mausgeschwindigkeit die Bahnlinien sehr genau positionieren (siehe (05)).

Eine weitere Herausforderung ist die Visualisierung zeitabhängiger Daten. Die einzelnen Zeitschritte einer Simulation können nacheinander visualisiert und wie in einem Film abgespielt werden. Mit diesem naheliegenden Ansatz ist er aber schwierig, verschiedene Resultate zu vergleichen oder die zeitliche Entwicklung und die Zusammenhänge richtig abzuschätzen. Diese Beschränkung ergibt sich aus den Grenzen der menschlichen Kognition: Es ist für den Benutzer sehr schwierig, komplexe Sachverhalte in Animationen zu erkennen und sich diese zu merken. Eine gute Visualisierung ist deshalb an die kognitiven Fähigkeiten der Nutzer angepasst. Beispielsweise haben wir eine neue Methode für die Strömungsvisualisierung entwickelt, welche die zeitabhängigen Daten in einem einzelnen Bild zusammenfasst und dabei ohne Animation auskommt [17]. So können etwa verschiedene Simulationsdurchläufe sehr einfach miteinander verglichen werden. Eine Anwendung hierfür ist z.B. die Simulation von verunreinigtem Grundwasser. Häufig ist hierbei die genaue Beschaffenheit des Untergrunds nicht bekannt, weswegen viele Simulationsdurchläufe mit veränderten Parametern durchgeführt werden.

Aber auch vermeintlich simple Visualisierungsmethoden wie Balkendiagramme können noch verbessert werden. Ein Problem von Balkendiagrammen ist die Darstellung von Daten, die einen großen Wertebereich abdecken, wie z.B. die Dauer des radioaktiven Zerfalls verschiedener chemischer Elemente. Eine direkte Darstellung solcher Daten würde darin resultieren, dass nur die großen Werte sichtbar wären; die Balken der kleinen Werte wären einfach zu klein. Unsere Methode nutzt nun mehrere Skalen, um solche Daten darzustellen [18]. Dabei bleiben auch sehr kleine Werte sichtbar, und alle Daten können visuell miteinander verglichen werden.

Die zukünftige Forschung wird sich auf die visuelle Analyse sehr großer und komplexer Daten konzentrieren, die mit bisherigen Visualisierungstechniken oder anderen Analyseverfahren nicht gehandhabt



Vom Benutzer platzierte Bahnlinien in einem Mischer, in dem kalte (blau) und heiße Luft (rot) vermischt wird. Durch eine präzise Platzierung der Linien kann das Mischverhalten sehr genau analysiert werden.

werden können. Eine umfassende Untersuchung solcher Daten durch eine direkte Visualisierung ist sehr zeitaufwändig, und es besteht die Gefahr, dass wichtige Details übersehen werden. Dies kann z.B. der Fall sein, wenn der Wissenschaftler viele hunderte oder gar tausende Simulationen durchläufe miteinander vergleichen möchte. Daher sollen die Nutzer der Visualisierung durch Verfahren aus dem Bereich des Data-Mining und des maschinellen Lernens unterstützt werden. So kann der Computer beispielweise die Datenmenge vorab auf relevante Informationen einschränken oder den Anwender auf potentiell interessante Bereiche hinweisen. Diese Art der Datenreduktion beeinflusst auch die Entwicklung neuer Visualisierungsmethoden, indem diese so gestaltet werden, dass sie nur die relevanten Strukturen und Informationen darstellen, z.B. nur die Grenzschichten zwischen verschiedenen Bereichen einer Strömung. Zudem sollen die Visualisierungsmethoden hocheffizient sein, um eine schnelle Darstellung ständig wachsender Datenmengen zu gewährleisten. Hierfür sollen Ansätze aus dem Höchstleistungsrechnen verfolgt werden.

Die umfassende Analyse komplexer Daten erfolgt typischerweise in Teamarbeit. Daher soll die Visualisierung die kollaborative Arbeit mehrerer Experten unterstützen. Gemeinsames Arbeiten kann beispielsweise an großen Display-Wänden oder aber auch an verteilten Arbeitsplätzen erfolgen. Dabei ist es unter anderem wichtig, dass die Anwender über den gegenseitigen Fortschritt informiert sind und sich über interessante Datenbereiche und Informationen problemlos austauschen können. Die visuellen Schnittstellen und Interaktionstechniken müssen gerade auch für Nicht-Informatik-Experten zugänglich gemacht werden – was beim Umfang der Simulationsdaten und der Komplexität der Analyseaufgaben eine Herausforderung für die Visualisierungsforschung ist.

Schluss

Im Rahmen des Exzellenz Clusters „Simulation Technology“ (SimTech) wird der Fokus auf die Entwicklung einer ganzheitlichen Systemwissenschaft gelegt, die den Wissenschaftlern bei der Erforschung und Simulation von Naturphänomenen hilft. In diesem Beitrag haben wir unsere For-

ZUSAMMENFASSUNG

Dieser Beitrag gibt einen Überblick der bisherigen Forschungsergebnisse auf dem Gebiet integrierte Datenverwaltung, Workflows und Visualisierung für integrative Systemwissenschaft und unsere Zukunftspläne und Forschungsschwerpunkte auf dem Weg zu einer Cyber-Infrastruktur für die Simulationstechnik. Unter anderem wird ein Workflow Management System vorgestellt, welches speziell auf die Anforderungen und Bedürfnisse der Wissenschaftler zugeschnitten ist und aus unserer Forschung auf dem Gebiet Simulationstechnik entstanden ist. Des Weiteren wurde ein Rahmenwerk entworfen und umgesetzt, mit dem Aktivitäten zur Datenbereitstellung in Simulationsabläufen benutzerfreundlich modelliert und ausgeführt werden können. Für die skalierbare Integration von Sensordaten in Echtzeitsimulationen wurde das Global Sensor Grid entwickelt. Für die Analyse von Simulationsergebnissen wurden sowohl komplett neue Visualisierungstechniken erarbeitet als auch bestehende Techniken beschleunigt. Auf Basis unserer Forschungsergebnisse soll in Zukunft eine Simulations-Cyber-Infrastruktur zur Unterstützung von verteilten und gekoppelten Simulationen entstehen. Dabei wird die Reproduzierbarkeit und Nachvollziehbarkeit von Simulationen und ihren Ergebnissen, im Allgemeinen bezeichnet als Provenance, eine bedeutende Rolle spielen. Für Echtzeitsimulationen steht die Integration von mobilen Geräten im Vordergrund. Bei der Visualisierung wird der Fokus auf der Analyse sehr großer und komplexer Daten liegen, die bisher nicht gehandhabt werden können.

schungsergebnisse kurz zusammengefasst und unsere zukünftigen Forschungsziele auf dem Weg zu einer Cyber-Infrastruktur für die Simulationstechnologie umrissen. •

Dimka Karastoyanova, Karolina Vukojevic-Haupt,
Andreas Weiß, Frank Leymann,
Peter Reimann, Bernhard Mitschang,
Holger Schwarz, Boris Koldehofe, Kurt Rothermel,
Marcel Hlawatsch, Daniel Weiskopf

Literatur

1. Görlach, Katharina; Sonntag, Mirko; Karastoyanova, Dimka; Leymann, Frank; Reiter, Michael: *Conventional Workflow Technology for Scientific Simulation*. In: Yang, Xiaoyu (Hrsg.); Wang, Lizhe (Hrsg.); Jie, Wei (Hrsg.): *Guide to e-Science*, Springer-Verlag, 2011
2. Karastoyanova, Dimka; Dentsas, Dimitrios; Schumm, David; Sonntag, Mirko; Sun, Lina; Vukojevic, Karolina: *Service-based Integration of Human Users in Workflow-driven Scientific Experiments*. In: *Proceedings of the 8th IEEE International Conference on eScience (eScience 2012)*
3. Sonntag, Mirko; Hotta, Sven; Karastoyanova, Dimka; Molnar, David; Schmauder, Siegfried: *Using Services and Service Compositions to Enable the Distributed Execution of Legacy Simulation Applications*. In: Abramowicz, W. (Hrsg.); Llorente, I.M. (Hrsg.); Surridge, M. (Hrsg.); Zisman, A. (Hrsg.); Vayssière, J. (Hrsg.): *Towards a Service-Based Internet, Proceedings of the 4th European Conference ServiceWave 2011, Poznan, Poland, 2011*

4. Sonntag, Mirko; Hahn, Michael; Karastoyanova, Dimka: Mayflower – Explorative Modeling of Scientific Workflows with BPEL. In: *Proceedings of the Demo Track of the 10th International Conference on Business Process Management (BPM 2012)*, CEUR Workshop Proceedings, 2012
5. Vukojevic-Haupt, Karolina; Karastoyanova, Dimka; Leymann, Frank: On-demand Provisioning of Infrastructure, Middleware and Services for Simulation Workflows. In *Proceedings of SOCA 2013*.
6. P. Reimann, H. Schwarz: Datenmanagementpatterns in Simulationsworkflows. In: *Datenbanksysteme für Business, Technologie und Web*, Magdeburg, Germany, 2013.
7. P. Reimann, M. Reiter, H. Schwarz, D. Karastoyanova, F. Leymann: SIMPL – A Framework for Accessing External Data in Simulation Workflows. In: *Datenbanksysteme für Business, Technologie und Web*, Kaiserslautern, Germany, 2011
8. P. Reimann, H. Schwarz, B. Mitschang: Design, Implementation, and Evaluation of a Tight Integration of Database and Workflow Engines. *Journal of Information and Data Management* 2(3), SBC – Brazilian Computer Society, 2011.
9. P. Janowski, B. Mitschang, A. Gollmann: Issues and Characteristics of Testing as Part of the Design Process in Mechanical Engineering. In: *Tagungsband der 15. International Conference on Computer Supported Cooperative Work in Design*, Lausanne, Switzerland, 2011.
10. M. Williams, K. Fischer, J. Freymueller, B. Tikoff, A. Tréhu et al., *Unlocking the secrets of the north american continent: An earthscope science plan for 2010–2020*, EarthScope, Tech. Rep., February 2010.
11. P. Hartwell, Cense: A central nervous system for the earth, in *Technologies Beyond 2020 (TTM)*, 2011 IEEE Technology Time Machine Symposium on, 2011, pp. 1–1.
12. A. Benzing, B. Koldehofe, and K. Rothermel. Efficient Support for Multi-Resolution Queries in Global Sensor Networks. In *Proc. of the 5th International Conference on COMMunication System softWAre and middleware (COMSWARE 2011)*, pp.1–12, ACM.
13. A. Benzing, B. Koldehofe, and K. Rothermel. Multilevel Predictions for the Aggregation of Data in Global Sensor Networks. In *Proc. of the 14th International Symposium on Distributed Simulation and Real Time Applications (DS-RT 2010)*, pp. 169–178, IEEE.
14. B. Haasdonk, M. Dihlmann, M. Ohlberger: A Training Set and Multiple Bases Generation. Approach for Parametrized Model Reduction Based on Adaptive Grids in Parameter Space. *Math. Comp. Model. Dyn. Vol.17(4)*: 423–442, 2011, Taylor & Francis.
15. M. Hlawatsch, F. Sadlo, D. Weiskopf: Hierarchical Line Integration. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* 17(8):1148–1163, 2011
16. M. Hlawatsch, F. Sadlo, D. Weiskopf: Predictability-Based Adaptive Mouse Interaction and Zooming for Visual Flow Exploration. *International Journal for Uncertainty Quantification* 3(3):225–240, 2013
17. M. Hlawatsch, P. Leube, W. Nowak, D. Weiskopf: Flow Radar Glyphs – Static Visualization of Unsteady Flow with Uncertainty. *IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics* 17(12):1949–1958, 2011
18. M. Hlawatsch, F. Sadlo, M. Burch, D. Weiskopf: Scale-Stack Bar Charts. *Computer Graphics Forum* 32(3):181–190, 2013

DIE AUTOREN

Kontakt

IAAS – Institut für Architektur von Anwendungssystemen
 Universität Stuttgart
 Universitätsstraße 38
 D–70569 Stuttgart
 Jun.-Prof. Dr. Dimka Karastoyanova
 Tel. +49 (0) 711/685-88476
 E-Mail: dimka.karastoyanova@iaas.stuttgart.de
 Web: <http://www.iaas.uni-stuttgart.de/>

■ **ABBILDUNG 1**

JUN.-PROF. DR. DIMKA KARASTOYANOVA (v.r.) ist Juniorprofessorin für Simulationsworkflows am IAAS und im Rahmen des Exzellenzclusters SimTech. Ihre Forschung umfasst Themen wie flexible Simulationsworkflows und verzahnte Workflows für Simulationen und Geschäftsanwendungen.

PROF. DR. FRANK LEYMANN (h.l.) ist geschäftsführender Direktor des Instituts für Architektur von Anwendungssystemen (IAAS) an der Universität Stuttgart. Er forscht auf den Gebieten Cloud Computing, Service-orientierte Architekturen, Anwendungsarchitekturen und Integration für Geschäftsprozesse und Simulationstechnik.

KAROLINA VUKOJEVIC-HAUPT

(v.l.) ist Doktorandin am IAAS und im Rahmen von SimTech. Ihre Forschung konzentriert sich auf die Konzipierung und Entwicklung von Ansätzen zur Bereitstellung von Simulations-Workflow-Management-Systemen in der Cloud.

ANDREAS WEISS (h.r.) ist Doktorand am

IAAS und im Rahmen von SimTech. In seiner Forschung beschäftigt er sich damit Konzepte und Systeme zur Unterstützung von flexiblen, verzahnten Simulationsworkflows für Cloud-basierte, Multi-Skalen- und Multi-Physik-Simulationen zu entwickeln.

DIE AUTOREN

■ ABBILDUNG 2

DR. BORIS KOLDEHOFE (l.) ist Forscher und Dozent an der Universität Stuttgart. Seine Forschungsinteressen umfassen skalierbare Kommunikationssysteme, insbesondere Internet-basierte Sensornetze, Publish/subscribe Systeme und Ereignisverarbeitungssysteme.

ANDREAS BENZING (m.) ist Doktorand an der Graduiertenschule in SimTech. In seinem Dissertationsvorhaben erforscht er Stromverarbeitungssysteme zur Unterstützung von wissenschaftlichen Simulationen.

PROF. DR. KURT ROTHERMEL (r.) leitet den Lehrstuhl Verteilte Systeme an der Universität Stuttgart. Seine Forschungsinteressen liegen in den Bereichen Verteilte Systeme, Rechnernetze, Mobile Systeme und Sensornetze. In SimTech leitet er die Forschung am GlobalSensorGrid Projekt.

■ ABBILDUNG 3

PROF. DR. BERNHARD MITTSCHANG (r.) leitet die Abteilung Anwendersoftware am IPVS.

PETER REIMANN (m.) ist Doktorand am IPVS und an der Graduierten Schule SimTech.

PD DR. RER. NAT. HOLGER SCHWARZ (l.) ist Dozent und Forscher in der Abteilung Anwendersoftware am IPVS.

Diese Autoren beschäftigen sich im Rahmen des Exzellenzclusters Simulation Technology primär mit der Datenbereitstellung und Datenverwaltung in Simulationen. Hauptsächliches Augenmerk liegt dabei darauf, die Komplexität der für Wissenschaftler sichtbaren Datenverwaltungsaufgaben soweit zu reduzieren, dass sich Wissenschaftler verstärkt auf ihre Kernproblematik konzentrieren können, nämlich auf die eigentliche Simulation.

■ ABBILDUNG 4

PROF. DR. DANIEL WEISKOPF (r.) ist am Institut für Visualisierung und Interaktive Systeme (VIS) und am Visualisierungsinstitut der Universität Stuttgart (VISUS) tätig. Das Forschungsgebiet von Prof. Daniel Weiskopf umfasst die Visualisierung, visuelle Analytik und Computergrafik. Im Rahmen von SimTech konzentriert er sich auf die Entwicklung und Untersuchung von Methoden für die wissenschaftliche Visualisierung innerhalb von Simulationsworkflows.

MARCEL HLAWATSCH (l.) ist Doktorand am Visualisierungsinstitut der Universität Stuttgart (VISUS) und erforscht im Rahmen seiner Arbeit für SimTech neue Methoden für zeitabhängige Graphen und Workflows, sowie für Skalar-, Vektor- und Tensorfelder. Die von ihm entwickelten Methoden können u.a. für die Strömungsvisualisierung eingesetzt werden.



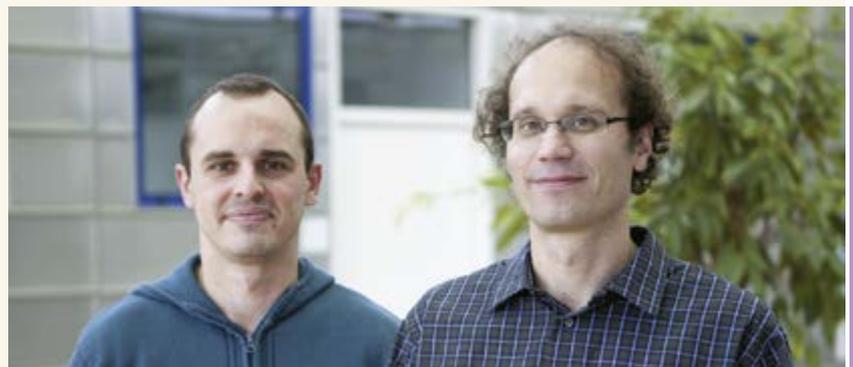
1



2



3



4

Simulationstools für Mensch-Computer- Interaktionen



Als zentrale Werkzeuge sind computergestützte Simulationen schon jetzt aus Wissenschaft und Industrie nicht mehr wegzudenken. Ziel ist es, dass auch Laien diese Tools zukünftig ohne Anleitung bedienen und bei alltäglichen Entscheidungsprozessen – Nehme ich das Fahrrad oder den Bus? – einsetzen können.

1. Einleitung

Computergestützte Simulationen haben in den letzten Jahren eine so große Verbreitung gefunden, dass ihre Ergebnisse vielfältige Lebensbereiche betreffen. Die Bandbreite reicht dabei von Simulationen, die Endnutzer direkt betreffen, wie die Vorhersage des Wetters, bis hin zu Simulationen, die bei der Herstellung von optimierten Produkten, wie beispielsweise in der Automobilherstellung, helfen. Gleichzeitig sprechen Simulationstools neue Nutzergruppen an. Als zentrale Werkzeuge sind computergestützte Simulationen in Wissenschaft, industrieller Forschung und bei der Entwicklung vielfältiger Produkte damit nicht mehr wegzudenken. Trotzdem nutzen vor allem Experten Simulationstools, und der Aufwand für die Einarbeitung ist weiterhin sehr groß. Dabei könnte der Einsatz dieser „Simulation Tools“ schon flächendeckender sein, zumindest was die erforderliche Re-

chenleistung angeht, die den Endnutzer in ihren Computern zur Verfügung steht. Dass sich die Simulation Tools trotzdem noch nicht im Alltagsgebrauch durchgesetzt haben, liegt auch an der weiterhin hochkomplexen Bedienbarkeit dieser Werkzeuge.

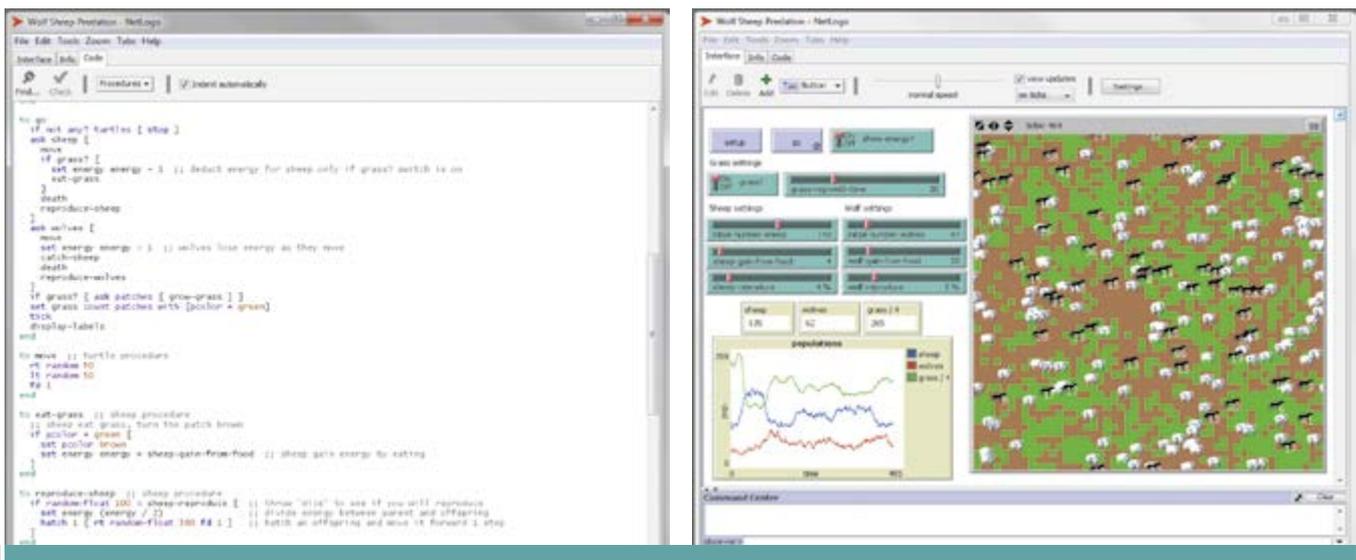
Welches enorme Potenzial freigesetzt werden kann, wenn Werkzeuge auch vom Laien handhabbar werden, ließ sich in anderen Bereichen bereits gut beobachten. In der Mitte der 1970er-Jahre war es etwa noch schwer vorstellbar, dass ein durchschnittlicher Benutzer in der Lage sein könnte, Texte in Buchdruckqualität selbst zu setzen und druckreife Informationsgrafiken zu erstellen. Die gängige Interaktionsform, um Texte zu setzen, waren über lange Zeit Beschreibungssprachen, welche ähnlich der Programmierung sind (z.B. TeX oder später LaTeX). Durch die Entwicklung von sogenannten „What You See Is What You Get“-Textverarbeitungen ist es heute hingegen selbstverständlich, dass bereits Schulaufsätze zumindest im Layout und Satz eine professionelle Qualität aufweisen. Einfach zu benutzende Textverarbeitungen haben zu einer dramatischen Verbesserung der Satz- und Layoutqualität von Dokumenten geführt, die auch von normalen Anwendern erreicht werden kann. Vergleicht man universitäre Abschlussarbeiten von 1980 und 2010, so ist dieser Unterschied sehr auffällig. Anders als vielleicht zu erwarten war, hat diese Entwicklung professionelle Satzsysteme für die Nutzung durch Experten mitnichten verdrängt. Viele Wissenschaftler und professionelle Layouter verwenden immer noch Beschreibungssprachen wie LaTeX. So kann vermutet werden, dass sich die Entwicklung von einfach zu benutzenden Textverarbeitungssystemen für Endnutzer und professionellen Desktop-Publishing-Systemen eher gegenseitig befruchtet hat. Dem Durchschnittsnutzer wurden somit ganz neue Möglichkeiten eröffnet, während Experten bessere Ergebnisse in kürzerer Zeit erzeugen können.

Für die heute gängigen Simulationswerkzeuge gilt, dass sie darauf ausgerichtet sind, Experten möglichst gut zu unterstützen. Als Experten werden hier vor allem Personen verstanden, die sowohl in dem Feld, in welchem die Simulation ihre Anwendung findet, fachkundig sind, als auch in der

SUMMARY

Computer-assisted simulations gained momentum in academia and industry. Today, simulation tools are widely used but still for experts only. In other domains we saw the enormous potential when tools for experts become available to end users. When word processors became easy to use they became widespread and dramatically increased the quality of the documents created by non-expert users. In this article we review the interaction paradigms for simulation tools. To make simulation tools usable by end users it will be necessary to provide expressive means for input and output. The bandwidth of the communication channel between computers and humans must be increased. Computers will react on implicit input that includes eye movement and other physiological characteristics. Through this we envision that easy to use ubiquitous simulation tools will empower everyone to make more founded decisions. Running a simulation will be as easy and common as writing a letter in a word processor today.

Programmierung und Nutzung von Simulationssystemen. Solche Umgebungen und Werkzeuge zeichnen sich durch eine große Ausdrucksstärke aus, d.h. die mit ihrer Hilfe simulierten Szenarien sind detailliert gestaltbar und damit umso aussagekräftiger, lassen sie doch Rückschlüsse auf einzelne, variable Parameter zu. Darüber hinaus bieten sie einen effizienten und effektiven Umgang mit den zugrundeliegenden Algorithmen. Die Experten sollen durch die Systeme nicht in dem eingeschränkt werden, was sie simulieren wollen. Der vergleichsweise hohe Lernaufwand, den die entsprechend komplexen Systeme in ihrer Bedienung erfordern, wird dafür in Kauf genommen. Personen, welche hingegen „nur“ Experten in ihrem eigentlichen Fachgebiet sind, in welchem Sie die Simulation nutzen möchten, aber keine Kenntnis im Umgang mit dem Simulationssystem haben, können dementsprechend die Simulationen nicht nutzen. Ohne Wissen über die Eigenschaften der verfügbaren Algorithmen, ihrer Schwächen und Möglichkeiten, finden sie keinen direkten Zugang und benötigen Unterstützung von Simulationsexperten. Die Balance zwischen einer hohen Funktionalität und einfachen Bedienbarkeit ist daher eine grundlegende Frage in der Gestaltung von Simulationswerkzeugen für eine breite Nutzerschicht. In unseren Forschungsarbeiten beschäftigen wir uns damit, wie die Interaktion mit Simulationssystemen vereinfacht werden kann. Unsere Vision ist, dass durch die von Endanwendern einfach zu nutzenden Simulationswerkzeuge ein ähnliches Potenzial freigesetzt werden kann, wie wir es in den vergangenen Jahrzehnten im Bereich Desktop Publishing beobachten



01

Beispiel eines Simulationsprogramms und der grafischen Darstellung in NetLogo. Auf der linken Seite ist ein „typischer“ Quellcode zu sehen, auf der rechten die grafische Oberfläche, wie sie sich dem Nutzer darstellt. Auf dieser Ebene kann der Nutzer auch ohne Programmier-Know-how die Simulation „bedienen“ und z.B. einzelne Parameter setzen und den Ablauf der Simulation beobachten.

konnten. Im Kasten am Ende des Beitrags sind verschiedene Beispiele für diese Vision aufgeführt.

2. Interaktionsparadigmen

Für ein besseres Verständnis, wie nah oder fern die Umsetzung dieser Vision ist, soll zunächst ein Überblick über verschiedene Interaktionsparadigmen und Formen der Mensch-Computer-Interaktion gegeben werden, welche in der Simulationstechnik relevant sind. Ihre Vor- aber auch Nachteile in der Nutzung müssen zwingend bedacht werden, will man die intuitive Interaktion mit Simulationssystemen erreichen.

2.1 Programmierung

In vielen technischen Fächern und insbesondere in der Simulationstechnik ist die Erstellung von Softwareprogrammen (Programmierung) eine gängige Form der Mensch-Computer-Interaktionen. Wissenschaftler und sogenannte Domänenexperten mit Programmierkenntnissen legen in Form von Computerprogrammen und Datenmodellen das spezifische System und sein Verhalten fest. Bei diesem Ansatz können Softwareprogramme in Programmier-Hochsprachen wie C/C++ oder Java direkt für eine bestimmte Plattform (z.B. PC oder Großrechner) entwickelt werden. Alternativ werden die Programme als interpretierbare Skripte implementiert. In der Simulationstechnik können durch spezifische und für einen bestimmten

Zweck erstellte Programme Simulationen wie auch die zu Grunde liegenden Modelle beschrieben werden. Zur Durchführung der Simulation wird dann dieses spezifisch für die jeweilige Aufgabenstellung erstellte Programm ausgeführt. Im Allgemeinen wird das Programm durch zusätzliche Eingabeparameter und Daten ergänzt. Ein Beispiel für eine solche Simulationsumgebung ist NetLogo, ein programmierbares Modellierungs- und Simulationstool, welches besonders für die agentenbasierte Simulation von natürlichen und sozialen Phänomenen wie beispielsweise der Bewegung von Menschenmassen in Notfallsimulationen geeignet ist.

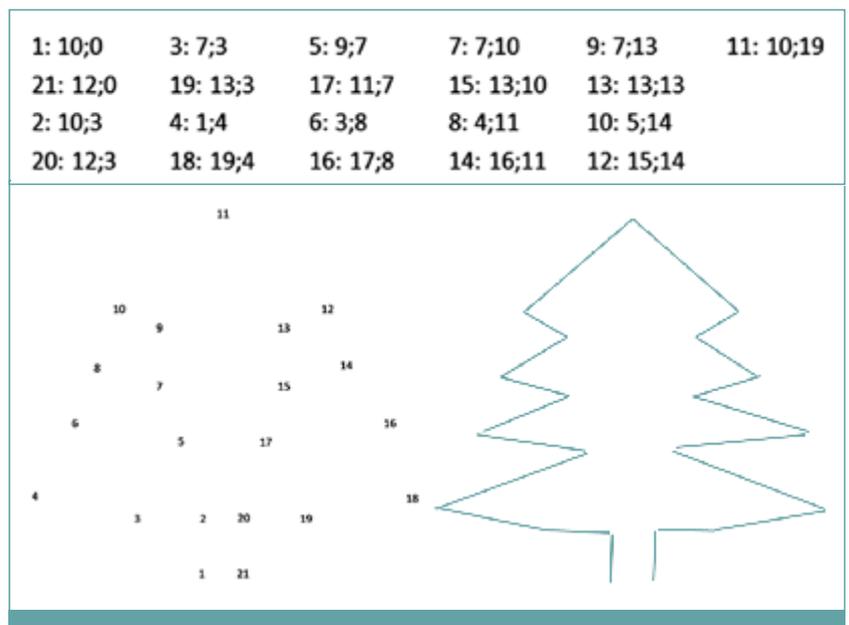
Der zentrale Vorteil der Programmierung als Schnittstelle zwischen Mensch und Simulationswerkzeug ist die bereits erwähnte Ausdruckstärke einer Programmiersprache. Mittels Programmierung können nahezu beliebige Simulationen und Modelle realisiert werden. Die Möglichkeiten, eine bestimmte Simulation zu verwirklichen, sind eigentlich nur durch die Fähigkeiten des Entwicklers und die eventuell notwendige Rechenleistung begrenzt. Der große Nachteil besteht jedoch darin, dass Entwickler und Nutzer der Simulation gleichermaßen über Fähigkeiten zur Programmierung verfügen oder aber sich aneignen müssen. So ist in vielen wissenschaftlichen Anwendungen der Entwickler der Simulation auch gleichzeitig der Nutzer. Sind Entwickler und Nutzer unterschiedliche Personengruppen, ist es hingegen sinnvoll, auch unterschiedliche Benutzungsschnittstellen zur Verfügung zu stellen.

2.2 Grafische Benutzungsschnittstellen und direkte Manipulation

Die meisten Computersysteme verfügen heute über grafische Benutzungsschnittstellen, welche mittels direkter Manipulation von sichtbaren Objekten bedient werden. Die grundlegende Idee bei der direkten Manipulation ist, dass für relevante Daten und Funktionen eine grafische Repräsentation auf dem Bildschirm geschaffen wird, mit welcher interagiert werden kann [1]. Die Interaktion geschieht mit einem Zeigegerät (z.B. einer Maus) oder direkt am Bildschirm (z.B. Touchscreen). Grafische Benutzungsschnittstellen und der Interaktionsstil der direkten Manipulation vereinfachen die Interaktion mit Computern und Anwendungen wesentlich, da die auf dem Bildschirm dargestellten Objekte den Interaktionsraum bestimmen und dem Benutzer Hinweise auf mögliche Interaktionen geben. Dadurch wird der Aufwand für das Erlernen eines Systems stark verringert, und Benutzer können durch Ausprobieren die Funktion des Systems erkunden. Gute grafische Benutzungsschnittstellen verwenden solche grafische Darstellungen, welche es dem Benutzer ermöglichen, die einzelnen Aktionen intuitiv zu erfassen. Darüber hinaus haben sie zusätzlich noch die Eigenschaft, dass alle Aktionen, die der Benutzer durchführt, rückgängig zu machen sind.

Im Gegensatz zu einer Programmierschnittstelle sind die Möglichkeiten des Benutzers durch die grafische Oberfläche natürlich eingeschränkt. Ist für eine Variable ein Schieberegler vorhanden, welcher nur ganze Zahlen zulässt, so ist es eben nur möglich, ganze Zahlen einzugeben. Ist für einen Wert kein Interaktionselement vorhanden – wie z.B. für die Farbe der Schafe in (01) – kann dieser Parameter auch nicht verändert werden. Durch die Verwendung einer grafischen Oberfläche wird zwar die Bedienung vereinfacht, allerdings auf Kosten einer geringen Ausdrucksstärke. Grafische Benutzungsschnittstellen werden somit häufig zur interaktiven Steuerung von Simulationen und zur Parametrisierung verwendet.

In der Anwendung der Simulationstechnologie findet man daher häufig den Fall, dass Nutzer der Simulation mit einer weniger mächtigen grafischen Schnittstelle interagieren und die Entwickler gegebenenfalls auf den Quellcode zurückgreifen.



Die Semantik der geordneten Punkte (oben) ist ohne Hilfsmittel nur schwer zu sehen, geschweige denn zu verstehen. Eine Darstellung im Koordinatensystem (unten links) macht es einfacher; werden noch Hilfslinien eingefügt, ergibt sich ein klar zu erkennendes Bild (unten rechts).

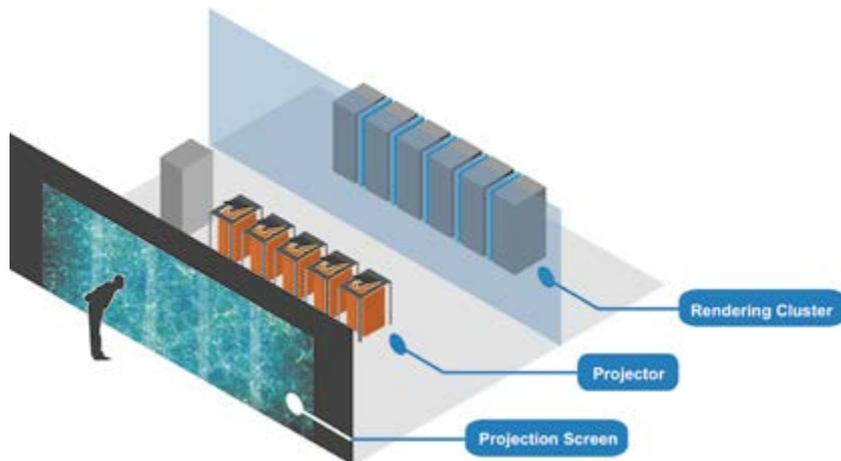
Damit eine größere Nutzergruppe Simulationswerkzeuge verwenden kann, ist es zentral, dass diese einfacher zu bedienen sind. Wie eingangs erwähnt, bedeutet das aber, dass eine Vereinfachung der Nutzung die Möglichkeiten einschränkt, welcher der Nutzer hat. Historisch hat sich gezeigt, dass durch einfachere Benutzungsschnittstellen und Konzepte neue Nutzer hinzukommen, dass jedoch die bisherigen Benutzer nur bedingt auf neue Bedienkonzepte umsteigen, da sie die Ausdrucksstärke nicht vermissen möchten.

2.3 Interaktion mit Visualisierungen

Generell ist es schwierig, numerische Daten ohne weitere Hilfsmittel zu verstehen.

D.h. eine Reihe von Punkten als Menge oder Liste geschrieben gibt wenig Aufschluss über deren Zusammenhang. Hingegen kann bereits eine Darstellung dieser Daten in einem Koordinatensystem helfen, dass die Zusammenhänge auf den ersten Blick erkennbar sind: (02). Dieses kleine Beispiel zeigt, dass die gewählte Darstellungsform von Informationen und insbesondere die Darstellung von Ergebnissen einer Simulation einen sehr großen Einfluss auf die Verständlichkeit haben.

Typische Aufgaben, die durch die visuelle Darstellung von Daten erleichtert und ermöglicht werden, sind z.B. Datenvergleiche, das Erkennen von Strukturen und Beziehungen oder das Herausfiltern von für die Aufgabe relevanten Daten.



03

Hochauflösende Großprojektionswand im VISUS Visualisierungslabor an der Universität Stuttgart, siehe <http://www.visus.uni-stuttgart.de/institut/visualisierungslabor.html>.

In heutigen Simulationen entstehen häufig sehr groß Datenmengen, welche auf normalen Bildschirmen (z.B. Full-HD mit 1920×1080 Pixeln) nicht mehr vollständig dargestellt werden können. So mussten unterschiedliche Ansätze entwickelt werden, um auch mit größeren Datenmengen visuell umzugehen. Eine Strategie ist die Visualisierung auf größeren Displays, wie zum Beispiel an der Universität Stuttgart im VISUS Visualisierungslabor, wo eine hochauflösende Großprojektionswand mit 6 mal 2,25 Meter Größe Darstellungen in 2D und 3D erlaubt. Dabei ist bei der 3D-Darstellung eine Auflösung von 44 Millionen Pixeln je Auge möglich: (03). Eine andere Strategie ist die Reduktion der Daten auf eine Menge, die auf bereits vorhandenen Displays dargestellt werden kann. Wie das gelingen kann, verrät das „Visualisierungsmanttra“ von Shneiderman pointiert: „Überblick, Zoom und Filter, Detailbetrachtung“ [2].

Im Umgang mit großen Datenmengen ist es also extrem hilfreich, wenn der Benutzer selbst die Visualisierung steuern kann. Dabei ist es möglich, interaktiv festzulegen und zu verschieben, welcher Teil der Daten betrachtet wird, welche Parameter und welche Zusammenhänge dargestellt werden oder mit welchem Detaillierungsgrad Informationen angezeigt werden sollen. Der Begriff „Visual Analytics“ beschreibt in Konsequenz eine wissenschaftliche Vorgehensweise, bei der analytische Schlussfolgerungen aus großen Datenmengen durch interaktive Benutzungsschnittstellen unterstützt werden [3]. Eine grundlegende Annahme ist hier, dass durch die Interaktion mit den Daten und der gezielten visuellen Darstellung einzelner Ele-

mente neue Einsichten gewonnen werden können. Im Entwurf von solchen Systemen ist es zentral, die Aufgabenteilung zwischen Mensch und System sinnvoll zu gestalten. Die Aufgabe des Computers wäre es etwa spezifische Suchanfragen, das Sortieren und Ordnen, Filtern oder aber arithmetische Operationen schnell und effizient bereitzustellen. Der Part des menschlichen Nutzers ist im Gegensatz, Hypothesen aufzustellen und zu prüfen, Strukturen zu erkennen, Zusammenhänge zu erkunden oder Schlussfolgerungen zu ziehen. Diese Prozesse lassen sich gut verallgemeinern und auf die Entdeckung von Kausalitäten anwenden [4].

Eine Vielzahl an Visualisierungstechniken und Diagramm-Typen steht dabei für unterschiedlichste Datenstrukturen bereit. Beispiele sind einfache zweidimensionale Karten, auf welchen Daten überlagert werden, dreidimensionale räumliche Strukturen, Parallelkoordinaten für die Darstellung multidimensionaler Daten oder verschiedene Baumdarstellungen und Netzwerkvisualisierungen. Typische Interaktionsmechanismen wie Scrollen oder „Drag & Drop“ werden hier für die Navigation und die Auswahl von Daten benötigt.

2.4 Multimodale Interaktion mit Simulationen

Der visuelle Kanal ist bei der Ausgabe von Informationen durch Computersysteme vorherrschend. Wie bereits beschrieben, können verschiedene Formen der grafischen Darstellungen genutzt werden, um große Datenmengen und deren Zusammenhänge (auf einen Blick) sichtbar zu machen. Die visuelle Vermittlung bietet sich allein schon deswegen an, da Menschen so eine besonders große Menge an Informationen wahr- und aufnehmen können. Doch welche Rolle spielen Sinnesorgane wie das Hören oder Tasten für die Informationsaufnahme bei Simulationen? Das Konzept der multimodalen Interaktion setzt hier an und beruht auf der Idee, verschiedene Modalitäten beziehungsweise Sinneskanäle bei der Interaktion einzubeziehen. Systeme können dabei so gestaltet sein, dass verschiedene Sinne gleichzeitig genutzt werden. Ein Beispiel ist die Datenvermittlung durch eine Kombination aus visueller Darstellung, Tonwiedergabe und haptischer Ausgabe.



04

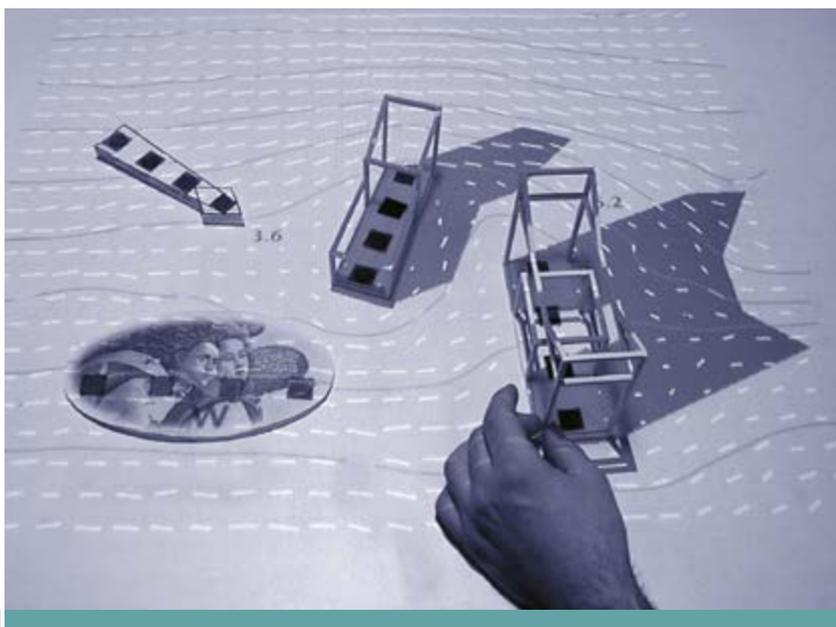
Eine andere Form der Multimodalität ist die Bereitstellung diverser Modalitäten für die gleiche Funktion, wobei der Benutzer auswählen kann, welche er verwendet. Ein Beispiel hierfür ist eine moderne grafische Oberfläche mit Sprachsteuerung. Hier können Befehle alternativ mit der Tastatur, der Maus oder mit Sprache eingegeben werden. Multimodalität ist dabei in beide Richtungen der Mensch-Computer-Interaktion denk- und anwendbar, also sowohl für die Kommunikation vom Computer zum Menschen als auch vom Menschen zum Computer.

Für Simulationen bleibt der visuelle Kanal sicherlich am bedeutsamsten, dennoch eröffnen weitere Modalitäten ganz neue Möglichkeiten, Vorgänge und Daten für den Menschen erfahrbar zu machen. Wie fühlt es sich z. B. an, bestimmte Schnitte bei einem chirurgischen Eingriff durchzuführen? Dies ist visuell oder akustisch nur schwer zu vermitteln, lässt sich aber haptisch gut darstellen. Gleiches gilt für den anschaulichen und einfacheren Vorgang, bei dem eine Kirsche mit einem Messer durchgeschnitten werden soll.

Dabei wird zuerst die Haut eingedrückt bevor der Schnitt durch sie durchgeht und letztlich auch das tieferliegende Fruchtfleisch zerteilt wird. In der Mitte wird das Messer durch den Kern abgelenkt. Wenn nun die Kräfte auf Basis der Materialeigenschaften simuliert werden, stellt sich die Frage, wie sie dargestellt werden können. Mit einem haptischen Interaktionsgerät, wie dem Geomagic Touch X (04), hält der Benutzer einen Stift, der ein Messer oder Skalpell simuliert. Das Gerät erzeugt Kräfte auf sechs Achsen und kann so authentisch das Gefühl des Messers, das durch eine Kirsche schneidet, vermitteln.

In traditionellen Systemen werden Ein- und Ausgabekanäle zwischen Mensch und Computer bislang klar getrennt. Eingaben werden über Geräte wie Maus, Tastatur oder Mikrofone getätigt. Ausgaben werden für den Benutzer grafisch, akustisch oder auch haptisch dargestellt. Das vorher angesprochene haptische Interaktionsgerät Geomagic Touch X ist beispielhaft für die Zusammenführung von Ein- und Ausgabe. Während der Eingabe (also der Bewegung des Stifts) wird gleichzeitig und

Ein Nutzer bei Verwendung einer Geomagic Touch X zur Interaktion mit einem am Centre for Applied Reconstructive Technologies in Surgery (Cartis) entwickelten Modellierungswerkzeug. © 3D Systems geomagic Solutions Be-greifbare Interaktion mit Simulationswerkzeugen.



05

Simulation der Auswirkung von Gebäuden auf Schatten und Wind in einer urbanen Umgebung (Bild aus: Underkoffler und Ishii 1998).

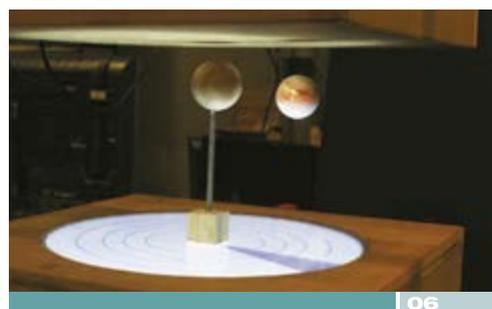
(06) Begreifbare Simulation der Interaktion zwischen Planeten in einem Sonnensystem (aus: Lee et al. 2011).

unmittelbar die Ausgabe (also die Kräfte in den verschiedenen Dimensionen) erfahren. Durch diesen Ansatz werden Daten und Informationen im ursprünglichen Sinn des Wortes begreifbar gemacht.

Begreifbare Interaktion (engl. *Tangible Interaction*) verallgemeinert dieses Konzept nun und hat es sich zum grundlegenden Design-Prinzip gemacht, Daten und Informationen direkt anfassbar und manipulierbar zu machen [s. 5 und 6]. Die physikalische Repräsentation von Daten scheint dem Benutzer deren Verständnis und Handhabung wesentlich zu erleichtern. Neben den eigentlichen Daten können mit diesem Ansatz auch Operatoren, welche die Daten verändern oder Programme steuern, so umgesetzt werden, dass sie eine einfache Form der Interaktion ermöglichen. Bei Schachrobotern ist dies etwa der Fall.

Erste Ansätze zur Entwicklung spezifischer Simulationswerkzeuge, die für Endanwender benutzbar sind, verwenden solche begreifbaren Benutzungsschnittstellen. Interessant ist dabei, dass schon die frühen und richtungweisenden Arbeiten aus dem Bereich der Tangible User Interfaces die Interaktion von Endnutzern mit Simulationen als zentrales Anwendungsfeld sehen. Viele grundlegende Konzepte von Tangible User Interfaces sind dadurch motiviert, dass solche Benutzungsschnittstellen eine niedrigere Einstiegshürde für die Interaktion bieten und darüber hinaus eine gleichzeitige und kooperative Inter-

aktion mehrerer Benutzer erlauben. Dadurch, dass die Interaktion mit den digitalen Inhalten über die Bewegung/Manipulation physikalischer Objekte abläuft, können klassische Ansätze der Koordination und Verständigung von Menschen untereinander sowie der Antizipation zukünftiger Handlungen auf die digitale Welt übertragen werden.



06

Ein klassisches Beispiel hierfür sind die Arbeiten von Underkoffler und Ishii zu Planungswerkzeugen für urbane Gebiete [7], die u.a. Simulationsumgebungen entwickelt haben, in denen physikalische und anfassbare Modelle von verschiedenen Gebäuden vom Benutzer frei auf einem Tisch verschoben werden können. Die Position und Orientierung der Modelle wird dabei von einem Computer erfasst und findet so Eingang in eine Simulation. Der Simulationsalgorithmus ermittelt für die aktuelle Lage der Gebäudemodelle verschiedene Aspekte, wie die jeweiligen Licht- oder Windverhältnisse an verschiedenen Stellen des simulierten Stadtgebiets. Das Simulationsergebnis wird auf die Szene projiziert und so für den Benutzer direkt erfahrbar: (05). Weitere Freiheitsgrade in dieser Simulation, wie der Sonnenstand, die Windrichtung oder die Windgeschwindigkeit können durch den Benutzer interaktiv verändert werden. Hierzu werden ebenfalls physikalische Objekte verwendet (z.B. ein Pfeil für die Windrichtung, der an einer beliebigen Stelle positioniert werden kann). Durch diese Form der Interaktion werden Benutzer in die Lage versetzt, verschiedene Szenarien auszuprobieren und anschließend zu bewerten. Dabei können Einzelne oder auch Gruppen sehr schnell und ohne vorherige Anleitung bestimmte Simulationen durchführen und deren Ergebnisse quasi hautnah erfahren. Gleichzeitig zeigt dieses Beispiel, dass mit dieser Form der Interaktion nur sehr spezifische

Simulationen durchgeführt und parametrisiert werden können.

Ein weiteres Beispiel aus dem Bereich begeibarere Benutzungsschnittstellen ist ZeroN, ein System, bei dem Objekte durch Magnetismus im freien Raum platziert werden können: (06). ZeroN wurde unter anderem schon dazu eingesetzt, physikalische Vorgänge wie die Bewegung von Planeten im Sonnensystem zu simulieren [8]. Der Nutzer kann hierbei die Position eines Planeten im simulierten Sonnensystem verändern und die Auswirkungen seiner Manipulation direkt beobachten.

3. Natürliche und Intuitive Interaktion mit Simulationen

Zusätzlich zu den oben beschriebenen Interaktionsparadigmen steht im Mittelpunkt zahlreicher anwendungsorientierter Forschung die Frage, wie die Interaktion zwischen Mensch und Computer auf natürliche und intuitive Weise unterstützt werden kann [9]. Die grundlegende Idee hierbei ist, dass Menschen ihre Interaktionserfahrungen, Verhaltensmuster aus der realen Welt einsetzen können um mit Computern und Anwendungen zu interagieren. Die Analogiebildung wird in der Literatur als Konzept realitätsbasierter Interaktion (engl. Reality-based Interaction) definiert [10]. In diesem Ansatz werden Benutzungsschnittstellen so umgesetzt, dass sie auf Basis des Weltwissens der Anwender intuitiv zu bedienen sind. Dieses Know-how umfasst etwa die Kenntnis der grundlegenden physikalischen Phänomene, die Wahrnehmung des eigenen Körpers und der Umgebung sowie elementare soziale Fähigkeiten. Solche quasi natürlichen Formen der Interaktion setzen jedoch voraus, dass die Kommunikationsbandbreite zwischen Computer und Mensch, und insbesondere in der Ausrichtung vom Menschen zum Computer, erhöht wird und erhöht werden kann.

3.1 Bandbreite der Kommunikation zwischen Mensch und Computer

Die Entwicklung der letzten 30 Jahre führte zu einer stärker werdenden Asymmetrie im Spektrum der Kommunikations- bzw. Interaktionskanäle zwischen Mensch und Computer. Hochauflösende Displaytechnologien, stereoskopische 3D-Darstellung

und räumliche Audiowiedergabe haben die Möglichkeiten in der Vermittlung vom Computer zum Menschen enorm erhöht. In der entgegengesetzten Richtung „sieht“ der Computer vom Menschen immer noch recht wenig, typischerweise lediglich die X/Y-Bewegung der Maus und die Tastaturanschläge. Selbst aktuelle Büroarbeitsplätze und Workstations bieten kaum mehr Eingabemöglichkeiten für den Benutzer. Im Spielektor vollzieht sich indes gerade ein Wandel: Computer erhalten hier immer mehr Informationen vom Menschen (z.B. durch eine Tiefenkamera, die Bewegungen und Gesten erfasst), die in der Folge eine natürlichere Interaktion ermöglichen. Ein Forschungsziel der Zukunft wird es in vielen weiteren Bereichen, und eben auch in der Simulationstechnik sein, die Bandbreite dessen, was ein Computer wahrnehmen kann, auszubauen.

3.2 Implizite Interaktion

In heute verwendeten Systemen wird nahezu ausschließlich die explizite Form der Interaktion via Eingabegeräten wie einer Tastatur und Maus genutzt, um Befehle an den Computer zu übermitteln. Die Initiative der Interaktion kann dabei sowohl vom Menschen als auch vom Computer ausgehen, jedoch sind die Eingaben spezifisch und auf eine Aufgabe ausgerichtet. Inzwischen ist es aber technisch sehr wohl möglich, auch implizite Eingabekanäle zu nutzen [9]. Die Idee hinter einer impliziten Interaktion ist, dass Informationen, welche der Computer über den Benutzer erfassen kann, ebenfalls als Eingabe ans System genutzt werden. Im Falle der Bedienung von Maus und Tastatur können dies etwa Parameter wie die Schreibgeschwindigkeit oder die Klick-Präzision sein. Diese Informationen helfen, das System und die Benutzungsoberfläche für den User zu optimieren, ohne dass dieser explizit dem System Präferenzen mitteilen muss.

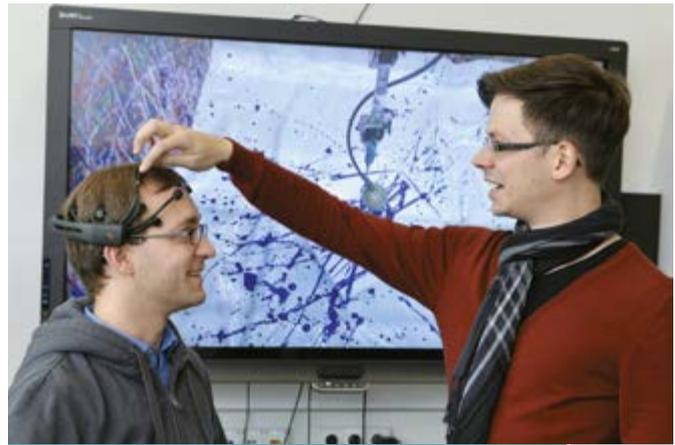
Implizite Interaktion wird besonders dann interessant, wenn neue Informationskanäle zur Verfügung stehen und erschlossen werden können. Denkbar ist hier z.B. die Verwertung physiologischer Informationen, etwa der Stressanstieg bei einer komplexen Darstellung oder Blickbewegungsdaten. Diese können als implizite Eingaben des Benutzers an das System genutzt werden und somit gleichfalls eine natürlichere Interaktion ermöglichen.



07

Mithilfe eines Eye Trackers – hier in der mobilen Variante als Brille – lässt sich gut nachvollziehen, wie gut die zu testenden Programme funktionieren. Der aufgezeichnete Blick des Nutzers verrät dabei eventuelle Schwachstellen in der Bedienbarkeit aber auch durchgängige Muster, die bei der Programmierung berücksichtigt werden müssten.

(08) Brain Computer Interface



08

3.3 Blickbewegung zur Interaktion

Mit einer kamerabasierten Erfassung von Blickmustern und Blickpositionen ist es möglich nachzuvollziehen, wo ein Benutzer während der Interaktion mit einem Computersystem hinschaut. Solche Systeme sind entweder integriert in einen Bildschirm oder sind als „Brille“ ausgeführt. Im ersten Fall kann die Blickposition auf einem stationären Bildschirm mit hoher Genauigkeit erfasst werden, wobei die Kopfbewegung des Benutzers kompensiert wird. Im mobilen Fall können auch die Blickbewegungen bei Interaktionen mit verschiedenen Systemen und mit mobilen Geräten betrachtet werden. Kommerziell werden diese Geräte zur Blickerfassung meist für die Benutzbarkeitsanalyse von z.B. Webseiten eingesetzt.

Werden die Blickdaten in Echtzeit erfasst, können diese als zusätzliche Eingaben für Anwendungen verwendet werden. Somit wird es z.B. möglich, Visualisierungen durch konzentriertes Hinschauen zu steuern. Wird länger auf eine bestimmte Stelle geschaut, können dort z.B. Zusatzinformationen angezeigt werden.

Nutzt man den Ansatz der impliziten Interaktion, kann mittels Blickerfassung beispielsweise verfolgt werden, welche Aspekte einer Simulation der Benutzer bereits wahrgenommen hat. Aktuelle Forschungsarbeiten unserer Gruppe fokussieren z.B. darauf, inwieweit der Computer ermitteln kann, ob der Benutzer die aktuellen Einstellungsmöglichkeiten versteht, ob er gelangweilt ist oder gar überfordert. Hierdurch wird es möglich, die Benutzungsoberfläche nicht nur an den Kenntnisstand des Benutzers, sondern auch an

seine aktuelle Leistungsfähigkeit anzupassen.

3.4 Physiologische Sensoren

Die eben beschriebene Blickerfassung ist nur ein Beispiel für einen physiologischen Sensor, der Informationen über einen Benutzer als implizite Eingabe nutzbar macht. Weitere Beispiele sind Sensoren, mit denen die Pulsfrequenz, die Leitfähigkeit der Haut oder aber die Körpertemperatur registriert werden kann. Durch die Erfassung dieser weiteren Parameter können Informationen über die Anspannung, den erfahrenen Stress oder über Veränderungen im Wohlbefinden des Benutzers ermittelt werden. Diese verschiedenen physiologischen Sensoren zu berücksichtigen erweitert das Mitteilungsspektrum vom Menschen zum Computer enorm. Das System erhält so ein detaillierteres Bild vom Zustand des Benutzers. Damit lässt sich der Kreislauf zwischen der Ausgabe des Computers, der Reaktion des Benutzers und eine darauffolgende Anpassung des Computers verbessern und eine natürliche Interaktion bewirken. Mit unseren Arbeiten erforschen wir, wie solche physiologischen Sensoren verwendet werden können, um die Ausgabe des Computers dynamisch an den Benutzer und seine aktuelle Leistungsfähigkeit anzupassen und wie sich damit letztlich Benutzungsschnittstellen vereinfachen lassen.

3.5 Gehirn-Computer-Interaktion

Ein schon in Teilen erprobtes Anwendungsgebiet für die komplexen physiologischen Sensoren ist die Aktivitätsmessung in ver-

schiedenen Gehirnregionen: (08). Wenn Menschen kognitive oder motorische Aufgaben lösen, spiegelt sich dies durch Aktivitäten im Gehirn wieder. Gilt es z.B. eine mathematische Lösung zu berechnen, ist eine spezifische Region aktiv, die sich von der unterscheidet, welche aktiv ist, wenn der Benutzer liest oder gerade eine feinmotorische Aufgabe mit den Fingern löst. Zusätzlich sind die Aktivitäten durch verschiedene Wellen gekennzeichnet, durch die etwa Schlaf, Entspannung oder Konzentration unterschieden werden können. Gehirn-Computer-Interfaces machen sich diese Eigenschaften zunutze und erfassen entweder die Aktivitäten in verschiedenen Bereichen oder die verschiedenen Wellenformen. In (08) wird ein kommerzielles Gehirn-Computer-Interface gezeigt, welches sowohl zwischen verschiedenen Regionen unterscheidet als auch unterschiedliche emotionale und kognitive Zustände des Benutzers erkennt. Die Signale dieser einfachen mobilen Geräte sind bislang noch fehlerbehaftet, aber sie lassen sich dennoch für die Mensch-Computer-Interaktion nutzen. In unseren Forschungsarbeiten betrachten wir, ob es möglich ist, verschiedene kognitive Aufgaben, welche im Rahmen der Nutzung eines Programms vorkommen, über das Gerät deutlich voneinander zu unterscheiden. Mit dieser Information können einerseits neue Systeme entwickelt oder andererseits bestehende Systeme so erweitert und optimiert werden, dass sich das System an die situativen Bedürfnisse der Benutzer dynamisch anpasst.

3.6 Natürliche Interaktion mit verschiedensten Geräten

Um eine natürliche Interaktion zu unterstützen, ist es wichtig, Lösungen für verschiedene Geräte aus den unterschiedlichsten Anwendungskontexten zu entwickeln. Aktuelle Simulationswerkzeuge werden beinahe ausschließlich im Arbeitskontext verwendet und sind deshalb für die Verwendung mit Desktop Computern optimiert. Doch wie verhält es sich mit all den Endgeräten, wie Smartphones oder Tablets, die im Consumer Bereich zunehmend die Aufgaben versehen, die traditionell von Desktop Computern übernommen wurden? Zahlreiche andere Platt-

ZUSAMMENFASSUNG

Erfolgversprechenden Ansätzen von für Endverbraucher zugängliche und benutzbare Simulationswerkzeuge ist gemein, dass sie die direkte und intuitive Manipulation der Simulationsparameter erlauben. Im Gegensatz zu klassischen Simulationswerkzeugen kann der Benutzer direkt in die Simulation eingreifen und sieht auch unmittelbar, wie die Veränderungen an Parametern, Modellen und Daten das Ergebnis beeinflussen. Direkte Manipulation war auch einer der Kernaspekte, welche der simpel zu erfassenden und zu bedienenden Textverarbeitung den Weg ebnete und so einer breiten Nutzergruppe zugänglich machte. Bei den auch von Laien anwendbaren Programmen zur Dokumentbearbeitung hat es sich als essentiell erwiesen, den aktuellen Zustand des Systems permanent sichtbar zu halten und so die intuitive Bedienung, das Verschieben von Parametern, wie etwa das eigenhändige Verstellen der Schriftgröße, zu ermöglichen. Ähnliches gilt für Simulationen, die von jedermann bedient werden sollen. Auch hier wird es wichtig sein, den Systemzustand transparent zu machen und dem Nutzer so den Gestaltungsspielraum aufzuzeigen. Simulationen für den Hausgebrauch, wie z.B. solche, die die Folgen des Transportweges – Fahrrad oder Bus – für die eigene Gesundheit oder Klimabilanz darstellen, wären dann bald keine verschwommene Vision mehr, sondern eine reale Gestaltungskraft in unserem Alltag.

formen wie Smart TVs oder Smart Watches aber auch leichtgewichtige Head-Mounted Displays wie Google Glass (09) finden gerade Verbreitung oder stehen kurz davor. Für viele Aufgaben können Benutzer inzwischen zwischen mehreren Geräten je nach Situation und Bedürfnis wählen. Um diesem Nutzungsmuster gerecht zu werden, sollten Simulationswerkzeuge für Endanwender auf verschiedenen Plattformen benutzbar sein und so den einfachen Wechsel zwischen Geräten ermöglichen.

Im Alltag getragene Head-Mounted Displays blenden beispielsweise Simulationsergebnisse durch Augmented Reality direkt in das Sichtfeld des Benutzers. Die Grenze zwischen Simulation und Wirklichkeit kann verschwimmen, Simulationsergebnisse lassen sich so direkter erfassen. Mit mobilen Geräten wie Tablets und Smartphones ist der Benutzer jederzeit in der Lage, Simulationen abzurufen, ähnlich wie heute bereits Suchmaschinen zu jedem Zeitpunkt konsultiert werden können. Neue Formen von Computern benötigen allerdings auch neue Formen der Ein- und



Google Glass

INFORMATION

Ubiquitäre Nutzung von Simulation

Klassische Simulationswerkzeuge setzen ein umfangreiches Wissen über die Domäne der Simulation und die Möglichkeiten des Werkzeugs voraus. Da Endanwender nicht über das notwendige Wissen über die Domäne oder die verwendeten Simulationsverfahren verfügen, ist es notwendig, die Möglichkeiten des Simulationswerkzeugs gezielt einzuschränken und Simulationswerkzeuge so für ganz spezifische Aufgaben zur Verfügung zu stellen. Im Folgenden stellen wir kurz zwei Visionen vor, wie Simulationen von Endbenutzern in der Zukunft verwendet werden könnten.

Vermeidung kardiovaskulärer Erkrankungen

Die Behandlung von Krankheiten setzt häufig erst dann ein, wenn es eigentlich schon zu spät ist. Vorbeugung kann jedoch die Wahrscheinlichkeit dramatisch verringern, überhaupt zu erkranken. Insbesondere kardiovaskuläre Erkrankungen – weltweit Todesursache Nr. 1 – könnten vermieden werden. Gesunde Ernährung, Sport und der Verzicht auf Suchtmittel nehmen großen Einfluss auf die Wahrscheinlichkeit kardiovaskulärer Erkrankungen. Da die Risikoindikatoren hinlänglich bekannt sind, könnten kardiovaskuläre Erkrankungen im jungen Alter in den meisten Fällen einfach vermieden werden. Jedoch wirkt sich das Verhalten erst langfristig aus. Aufgrund der vielfältigen Faktoren können Laien daher nicht abschätzen, wie und ob sich ein bestimmtes Verhalten auf ihr Risiko für kardiovaskuläre Erkrankungen auswirkt. Simulationswerkzeuge, die Menschen aus Risikogruppen die Möglichkeit geben, die Auswirkung von Verhaltensänderungen auf ihre Tendenz, zu kardiovaskulären Erkrankungen vorherzusagen, könnten ihnen helfen, abzuwägen, wie sie ihr Verhalten verändern sollten, ohne krank zu werden oder vollends auf geliebte Gewohnheiten verzichten zu müssen.

Simulation der Fahrzeugnutzung und Kosten

Der Kauf eines neuen Autos ist meist eine langfristige Entscheidung. Beim Autokauf gibt es vielfältige, zumeist nutzungsabhängige Aspekte, die berücksichtigt werden wollen. Dies schließt nicht nur den Benzinverbrauch, die Höhe der Kraftfahrzeugsteuer und die Höhe der Versicherungsprämie ein. Auch sekundäre Aspekte, wie die Frage, ob das neue Auto noch in die alte Garage passt oder ob das neue Auto über genügend Stauraum verfügt, sind relevant. Des Weiteren könnte für den potenziellen Käufer interessant sein, wie sich unterschiedliche Optionen auf die Zeit von und zum Arbeitsplatz auswirken und wie sie bei einem Unfall das Verletzungsrisiko beeinflussen. Die Fülle an Parametern ist den meisten Autobesitzern nicht einmal bewusst. Ein Simulationswerkzeug, das Autokäufer bei ihrer Kaufentscheidung unterstützt, könnte diese Wissenslücke schließen, und auf zahlreiche Datenquellen zugreifen. Beispielsweise können Prognosen über die Benzinpreisentwicklung Eingang in so ein Tool finden. Als wichtigste Datenquelle wäre jedoch das alte Auto des Käufers heranzuziehen. Bereits jetzt sammeln viele Fahrzeuge vielfältige Daten, wie über die zurückgelegten Kilometer oder die Dauer von Fahrten. Das Zusammenführen dieser Daten in einem interaktiven Simulationswerkzeug würde es erlauben, beim Autokauf gezielter das jeweils passende Modell auszuwählen.

Ausgabe. Während Maus und Tastatur im Desktop-Bereich die dominierenden Eingabegeräte sind, sind im mobilen Bereich gestenbasierte Eingabetechniken deutlich besser geeignet. Insbesondere bei so neuartigen Computerformen wie Smart TVs,

Smart Watches und Google Glass, werden natürliche, gestenbasierte Interaktionsformen notwendig, um eine einfache Benutzung überhaupt zu ermöglichen. •

Albrecht Schmidt

Niels Henze

DIE AUTOREN

ALBRECHT SCHMIDT

studierte Informatik in Ulm und Manchester und forschte anschließend an der Universität Karlsruhe sowie der Lancaster University, wo er 2003 seine Promotion abschloss. Von 2004 bis 2006 leitete er die Emmy Noether-Nachwuchsgruppe „Eingebettete Interaktion“ an der Ludwig-Maximilians-Universität in München. Anschließend wurde er Professor für praktische Informatik/Medieninformatik an der Universität Bonn und Abteilungsleiter beim Fraunhofer Institut für Intelligente Informations- und Analysesysteme (IAIS). Von 2007 bis 2010 war er Professor für Pervasive Computing an der Universität Duisburg-Essen. Seit Dezember 2010 leitet er als Professor am Institut für Visualisierung und Interaktive Systeme die Arbeitsgruppe Mensch-Computer-Interaktion.



NIELS HENZE

studierte Informatik an der Universität Oldenburg und wurde dort 2012 mit Auszeichnung promoviert. Anschließend war er Post-Doc an der Universität Stuttgart. Seit November 2013 ist er Juniorprofessor für Socio-Cognitive Systems im Exzellenzcluster Simulation Technology an der Universität Stuttgart.



Kontakt

Institute of Visualization and Interactive Systems
Universität Stuttgart
Pfaffenwaldring 5a
D-70569 Stuttgart
Tel.: +49 (0) 711/685-60049
E-Mail: albrecht.schmidt@visus.uni-stuttgart.de

Referenzen

- [1] Shneiderman, Ben. 1983. *Direct Manipulation. A Step Beyond Programming Languages*. IEEE Transactions on Computers, Vol. 16, No. 8, August, pp. 57–69.
- [2] Ben Shneiderman, *The Eyes Have It: A Task by Data Type Taxonomy for Information Visualizations*. In *Proceedings of the IEEE Symposium on Visual Languages*, pages 336–343, Washington. IEEE Computer Society Press, 1996.
- [3] Thomas, James J., and Kristin A. Cook. „A visual analytics agenda.“ *Computer Graphics and Applications*, IEEE 26, no. 1 (2006): 10–13.
- [4] Chen, Min, Anne Trefethen, René Bañares-Alcántara, Marina Jirotko, Bob Coecke, Thomas Ertl, and Albrecht Schmidt. „From Data Analysis and Visualization to Causality Discovery.“ *Computer* (2011): 84–87.
- [5] Ishii, H., & Ullmer, B. (1997, March). *Tangible bits: towards seamless interfaces between people, bits and atoms*. In *Proceedings of the ACM SIGCHI Conference on Human factors in computing systems* (pp. 234–241). ACM.
- [6] LE Holmquist, A Schmidt, B Ullmer. 2004. *Tangible interfaces in perspective*. *Personal and Ubiquitous Computing* 8 (5), 291–293.
- [7] Underkoffler, J., & Ishii, H. (1999, May). *Urp: a luminous-tangible workbench for urban planning and design*. In *Proceedings of the SIGCHI conference on Human factors in computing systems* (pp. 386–393). ACM.
- [8] Lee, J., Post, R., & Ishii, H. (2011, October). *ZeroN: mid-air tangible interaction enabled by computer controlled magnetic levitation*. In *Proceedings of the 24th annual ACM symposium on User interface software and technology* (pp. 327–336). ACM.
- [9] Schmidt, A., Pfleging, B., Alt, F., Sahami, A., & Fitzpatrick, G. (2012). *interacting with 21st-Century Computers*. *Pervasive Computing, IEEE*, 11(1), 22–31.
- [10] Jacob, R. J., Girouard, A., Hirshfield, L. M., Horn, M. S., Shaer, O., Solovey, E. T., & Zigelbaum, J. (2008, April). *Reality-based interaction: a framework for post-WIMP interfaces*. In *Proceedings of the SIGCHI conference on Human factors in computing systems* (pp. 201–210). ACM.

Philosophie der Simulation

Fragen – Themen – Problemfelder



„La scuola di Atene“, Raffael (1509)

Das Ziel des großangelegten Forschungsvorhabens des Stuttgarter Science Research Centers „Simulation Technology“ (SimTech) ist der Aufbau eines neuen Wissenschaftszweigs, der sich zwischen mathematischer Grundlagenforschung, Informatik und Ingenieurwesen verortet. Dies wird im Motto von SimTech deutlich “von isolierten numerischen Ansätzen zu einer integrativen Systemwissenschaft”. Wo findet in dieser modernen Aufgabenstellung eine altherwürdige Disziplin wie die Philosophie ihren Platz? Welche Aufgabe steht den Philosophen in dieser Konstellation zu? Diesen und weiteren Fragen wird im Folgenden nachgegangen.

1. Philosophisches Fragen

Im Wesentlichen hängt der Schlüssel zur Beantwortung der o.g. Fragen an dem kleinen aber doch weitreichenden Wort „Wissenschaft“. Philosophie gilt als die Mutter aller Wissenschaften, Philosophieren als das Urprinzip menschlichen Erkenntnisgewinns. Dabei sind nicht nur die Anfänge mathematisch-geometrischen Denkens (man denke an Pythagoras oder Euklid), der Geschichtsforschung, der Physik, der Politikwissenschaften oder der Biologie gemeint, sondern vor allem die systematische Methode der Wissenserschließung und –gewinnung, die seit jeher im Zentrum philosophischen Arbeitens standen und immer noch stehen.

Philosophisches Fragen zielt stets in zwei Richtungen: eine Richtung macht das Phänomen zum Gegenstand der Betrachtung, hier wären zum Beispiel Phänomene wie Gerechtigkeit, Wahrnehmung, Gleichberechtigung oder Evolution zu nennen; eine zweite Richtung zielt auf unsere eigene Zugangsweise zum Gegenstandsbe-

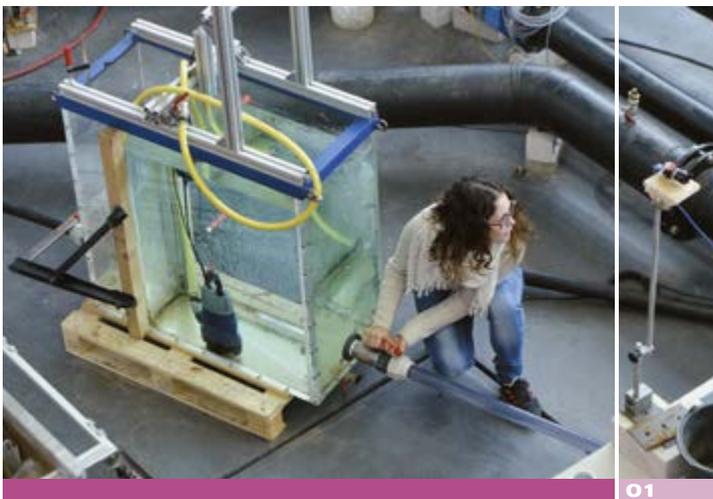
die philosophische Arbeit innerhalb des Clusters soll dem Gesamtprojekt „integrative Systemwissenschaft“ Vortrieb verleihen.

1.1 Reflexion

Strukturell wird dieses Projekt durch die Plattform „Reflexion und Kontextualisierung“ widergespiegelt, in die der Fachbereich Philosophie zusammen mit der Soziologie, den Diversity Studies und dem Fachbereich Human-Computer-Interaction angesiedelt ist. Die doppelte Aufgabenstellung „Reflektion“ und „Kontextualisierung“ nimmt dabei wieder die beiden Stoßrichtungen philosophischen Arbeitens auf. Im Zuge der Reflektion fragen Philosophen, oder genauer, Wissenschaftstheoretiker, nach den Konsequenzen, Möglichkeiten aber auch Grenzen, die ein neues wissenschaftliches Instrument wie die Simulationstechnologie für das wissenschaftliche Arbeiten mit sich bringt.

ABSTRACT

Philosophizing about simulation technology opens a broad array of questions and issues, such as: How does simulation technology become an independent branch of applied science? Which consequences can we expect from the ubiquitous use of computer simulations in science, economics and politics? The article discusses the role of philosophical research within the Stuttgart Cluster of Excellence SimTech and introduces the main research topics as well as current research projects.



reich: unsere Art, über diese Phänomene nachzudenken, sie wahrzunehmen, und darüber, wie und auf welche Art und Weise wir sie adäquat erfassen können. Diese zweite Zugangsweise ist, wenn man sie auf das Phänomen „Wissenschaft“ anwendet, Gegenstand wissenschaftstheoretischer Forschung – Wissenschaftstheorie ist in diesem Sinne ein eigenständiger Teilbereich der Philosophie, der am Standort Stuttgart besonders ausgeprägt vertreten wird. Und damit ist auch die Rolle der Philosophie innerhalb von SimTech verortet:

Worin zum Beispiel bestehen die Vorteile von Simulationen gegenüber klassischen Experimenten? Können sie diese ersetzen? Was genau sind Computersimulationen oder: wo hört das bloß maschinelle Rechnen großer Datenmengen auf und wo beginnt die Simulation? Hier findet aber auch – und das ist eine ganz wichtige Aufgabe innerhalb des Clusters – der Dialog mit den beteiligten Disziplinen quer durch das SRC SimTech statt: wie sehen die Bausteine einer integrativen Systemwissenschaft namens Simulationstechnologie

Neben experimentelle Methoden (01) sowie die theoretische Analyse ist die Simulation getreten. Simulationen finden inzwischen in allen Disziplinen Verwendung. Inwieweit sie damit auch die Fachkulturen verändern oder aber eine neue Systemwissenschaft begründen, ist nur eine der Fragen in der Wissenschaftstheorie. Abbildungen: SimTech/David Ausserhofer



03

Computersimulationen können helfen, die langfristigen Folgen politischer oder gesellschaftlicher Entscheidungen, wie z.B. dem verstärkten Ausbau der erneuerbaren Energien besser abzuschätzen. Aber sind diese Vorhersagen auch zuverlässig? Die Philosophie formuliert Bedingungen, die den Wissenstransfer aus der virtuellen Simulation in die Realität absichern.

Abbildung: shutterstock

aus? Welche Disziplinen leisten welchen Beitrag? Wie werden die Fäden zusammengeführt? Wie lässt sich das in den Einzelbereichen erlangte Wissen zusammenführen, bündeln, austauschen? Die Philosophie bietet sich hier als Gesprächspartnerin an, die, wenn sie auch vielleicht nicht die endgültige Antwort liefern kann, doch zumindest versucht, impulsgebende und zum Nachdenken anregende Fragen zu stellen.

1.2 Kontextualisierung

Die oben erwähnte zweite Stoßrichtung fragt nach der Rolle, die Computersimulationen auch außerhalb des wissenschaftlichen Kontextes spielen könnten. Die Verbreitung und Nutzbarmachung neuer wissenschaftlicher Instrumente – der sogenannte public outreach, um es Neudeutsch auszudrücken – repräsentiert eine immer wichtiger werdende Aufgabe innerhalb des universitären Arbeitens. Angewandt auf die Philosophie der Simulation bedeutet dies, zu erarbeiten, wo die potenziellen Anwendungsfelder für Computersimulationen im Raum außerhalb der Wissenschaft liegen und wie es zum Beispiel um die speziellen Bedürfnisse dieser Anwendungsfelder bestellt ist. Computersimulationen, die als Management-Instrumente in Unternehmen eingesetzt werden, haben sicherlich eine andere Basis und Ausrichtung als solche, die der politischen Ent-

scheidungsfindung oder Bildungszwecken dienen sollen.

Neben der rein theoretischen Analyse dieser Kontexte kommen hier auch verstärkt ethische Überlegungen ins Spiel: wie sieht es beispielsweise mit der Verantwortung für die Reliabilität von computersimulierten Szenarien, beispielsweise im Bereich der Energieversorgung, aus? Sollten politische Entscheidungen auf der Grundlage von Vorhersagen getroffen werden, die aufgrund etwa eines Softwarefehlers nicht eintreffen können, könnte dies nachteilige Konsequenzen sowohl in der Sache als auch für das Image der Simulationstechnologie nach sich ziehen. Sicherlich werden Simulationen den Sachverstand der Experten nie ersetzen können, aber kann eine Simulation auch von Laien richtig interpretiert werden? Die Philosophie hat hier die Aufgabe, die Bedingungen für einen erfolgreichen Wissenstransfer zu eruieren. Dabei gilt es, die impliziten Unterschiede im Wissen von Experten, den Fachexperten und den Machern von Computersimulationen, und dem Wissen der Endnutzer transparent zu machen, sowie Erwartungen, die an die Simulationstechnologie herangetragen werden, aufzudecken und Instrumente zu finden, mit denen sichergestellt werden kann, dass grundlegende Missverständnisse bereits im Ansatz weitestgehend vermieden werden können. So sollten beispielsweise Quellen von Unsicherheiten im Design der Simulation so offen zu Tage treten können, dass die allzu oft trügerische Sicherheit, die die bildliche Darstellung von Prozessen und Phänomenen erzeugt, nicht zu dem Fehlschluss führt, dass das Gezeigte auch automatisch eintreffen wird oder gar der Fall ist. Simulationen, oder genauer, Visualisierungen von dynamischen Modellen, sind die Ergebnisse virtueller Berechnungen – keine Photographien oder Röntgenaufnahmen.

Auch rechtliche Aspekte, Stichwort data mining und der Schutz der Privatsphäre sind gerade dort relevant, wo Simulationen über das world wide web implementiert werden sollen, beispielsweise als groß angelegte soziale Experimente.

Es bedarf ein wenig Kreativität aber auch Misstrauen, um die negativen Potentiale aufzudecken, die neue Technologien mit sich bringen können – aber auch ein gesundes Maß an Pioniergeist und Optimismus, um Visionen zu entwickeln, die

langfristige Gewinne für Gesellschaft und Wissenschaft versprechen.

2. Simulation in der Philosophie

Doch die Philosophie ist im Rahmen von SimTech nicht nur eine Hilfswissenschaft, die die Erkenntnisse der anderen Wissenschaften fundiert und reflektiert. Das Exzellenzcluster bietet auch die Möglichkeit, mit seinen Methoden die philosophische Forschung selbst voranzutreiben. Simulationen gehören von jeher zum methodischen Werkzeugkasten der Philosophie. Allerdings wurden Simulationen in der philosophischen Tradition natürlich nicht mit Computern durchgeführt, sondern in Gedanken. Man bezeichnet diese mentale Form der Simulation deshalb auch als Gedankenexperimente (wobei der Begriff des Experiments hier im weitesten Sinn zu verstehen ist). Es geht darum, bestimmte philosophische Thesen oder eine ganze Theorie zu bestätigen oder zu widerlegen, indem man in Gedanken eine entscheidende Situation simuliert, die dafür oder dagegen spricht.

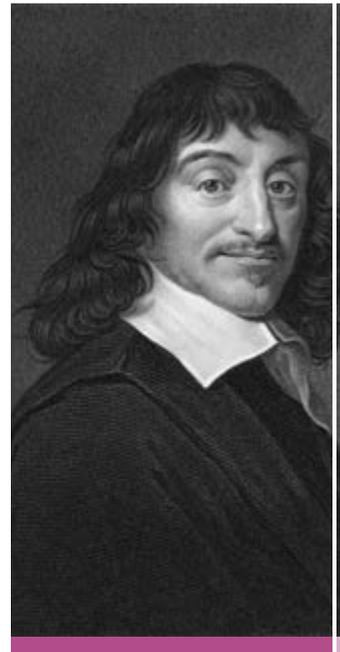
Eines der berühmtesten Gedankenexperimente der philosophischen Tradition geht auf Descartes (1596-1650) zurück. Ihm ging es um eine Frage, die die Philosophie schon sehr lange beschäftigt, nämlich, ob wir davon ausgehen dürfen, dass eine Außenwelt existiert oder nicht, und ob wir erkennen können, wie sie beschaffen ist. Um sich dieser Frage zu nähern, schlug er seinen Lesern folgendes Gedankenexperiment vor: Kann man sich nicht vorstellen, dass wir permanent von einem bösen Dämon getäuscht werden, der uns den Himmel, die Erde, die Sonne, unseren eigenen Körper und die anderen Menschen bloß vorgaukelt, ohne dass sie wirklich existieren? Wir simulieren also in Gedanken eine Welt, in der unsere Vorstellungen von der Welt einen radikal anderen Ursprung haben, als wir normalerweise glauben. Wenn es vorstellbar ist, dass wir von jenem Dämon getäuscht werden, so wüssten wir nicht, ob die Außenwelt existiert. Denn aus der Innenperspektive stellt sich für uns alles genau gleich dar, ob wir nun vom bösen Dämon getäuscht werden oder ob die Welt tatsächlich so beschaffen ist, wie sie uns erscheint. Diese Simulation scheint also zunächst für eine skeptische Haltung gegenüber der Außenwelt zu sprechen. Nun ist Descartes selbst kein

Skeptiker gewesen, sondern er nutzte dieses Gedankenexperiment nur, um die skeptische Position so stark wie möglich zu machen. Er selbst erhob den Anspruch, den Skeptizismus widerlegen zu können. Der Hebelpunkt seiner Argumentation ist, dass der böse Dämon uns zumindest in einer Hinsicht nicht täuschen kann: dass wir denken und somit existieren (das berühmte *cogito ergo sum*). Hiervon ausgehend versucht er zu beweisen, dass wir sehr wohl davon ausgehen dürfen, dass es eine Außenwelt gibt. Es zeigt sich an dieser Stelle, wie wichtig es ist, sich genau zu überlegen, welche Zielsetzung eine Simulation verfolgt. In Descartes Fall dient sie letztlich als ein Säurebad, an dem sich jede antiskeptische Argumentation bewähren muss. Dass das Cartesische Gedankenexperiment auch heute noch die Menschen umtreibt, beweist der populäre Film *Die Matrix*, in dem die Täuschung des bösen Dämons allerdings durch eine Computersimulation ersetzt wird.

Ein anderes berühmtes philosophisches Gedankenexperiment wurde von der Philosophin Philippa Foot (1920-2010) erdacht. Sie stellte sich die Frage, ob man den Tod einiger weniger in Kauf nehmen darf, um viele Menschen zu retten. Um diese Frage zu beantworten, schlug sie folgendes Gedankenexperiment vor: Stellen Sie sich vor,



ein Zug sei außer Kontrolle geraten und droht, fünf Personen zu überrollen, die auf dem Gleis stehen. Nun könnten Sie durch Umlegen der Weichen den Zug auf ein anderes Gleis leiten, auf dem nur eine



Eines der berühmtesten Gedankenexperimente zum Verhältnis von Simulation, Täuschung und Wirklichkeit wurde bereits von René Descartes (1596–1650) aufgestellt. Abbildung: shutterstock

Die moderne Variante des Cartesischen Experiments, nach dem denkbar ist, dass unsere Außenwelt nur simuliert ist, nur Projektion ist, wurde in der erfolgreichen Filmtrilogie „The Matrix“ durchgespielt. Abbildung: shutterstock

Person steht. Sollten Sie die Weichen umstellen oder nicht? Wenn die Antwort ja ist, dann darf man den Tod einiger in Kauf nehmen, um mehrere zu retten. Wenn die Antwort jedoch nein ist, dann ist dies nicht der Fall. Sie gelangen zu der Antwort, indem Sie die genannte Situation in ihrem Kopf simulieren.

Ein drittes Beispiel, das für viel Wirbel in der Philosophie des Geistes sorgte, wurde von John Searle (*1932) entwickelt. Es ist unter dem Namen „das chinesische Zimmer“ bekannt geworden. In diesem Gedankenexperiment geht es um die Frage, ob menschliches Denken auf nichts anderem als einem Computerprogramm basiert. Dies hätte zur Folge, dass grundsätzlich auch entsprechend gebaute Maschinen denken könnten. Searle fordert uns nun auf, uns vorzustellen, wir befänden uns in einem geschlossenen Raum. In diesen Raum werden durch einen Schlitz in der Tür Zettel mit chinesischen Schriftzeichen geschoben. Im Raum befindet sich außerdem ein Stoß Karten mit chinesischen Schriftzeichen und ein Handbuch in unserer Muttersprache, das Anweisungen gibt, welche chinesischen Zeichen als Reaktion auf die Eingaben durch den Schlitz nach außen zu geben sind. Die Anweisungen enthalten jedoch keine Hinweise darauf, was die chinesischen Schriftzeichen bedeuten. Diese Konstellation entspricht nach Searle dem logischen Aufbau eines Computerprogramms. Nun mag es zwar für die

„Computersimulationen können eine sinnvolle Ergänzung des philosophischen Instrumentariums darstellen.“

außerhalb des Raums befindlichen chinesischen Muttersprachler so aussehen, als beherrschten wir, die Insassen des Zimmers, die chinesische Sprache. Aber in Wirklichkeit verstehen wir kein Wort Chinesisch! Dies spricht für Searle dagegen, dass das menschliche Denken allein auf einem Computerprogramm beruht und somit grundsätzlich auch für Maschinen erreichbar ist. Zu dieser Schlussfolgerung gelangt er, wie wir gesehen haben, durch die mentale Simulation des chinesischen Zimmers. Allerdings hat gerade dieses letzte Beispiel

den Widersachern Searles auch Anlass gegeben, an der Methode der mentalen Simulation selbst Kritik anzumelden. Könnte es nicht sein, dass Searles Szenarium viel zu einfach ist? Menschliches Denken besteht natürlich nicht in so simplen Ein- und Ausgabeprozessen, sondern in sehr komplexen, möglicherweise nicht-linearen Vorgängen. Searle könnte auch die relevanten Rechenprozesse falsch modelliert haben - vielleicht basiert menschliches Denken nicht auf linearen Prozessen, sondern ist das Ergebnis dynamischer Vorgänge, wie sie sich etwa durch neuronale Netze modellieren lassen? Das spricht dafür, sich in diesem Fall nicht auf die traditionelle philosophische Methode der mentalen Simulation zu verlassen, sondern zu versuchen, so komplexe Vorgänge wie das menschliche Denken durch Computersimulationen zu modellieren - eine weitere Schnittstelle philosophischer und empirischer Forschung. Wenn es also um komplexe, dynamische und nicht-lineare Prozesse an der Schnittstelle zu den empirischen Wissenschaften geht, stellen Computersimulationen daher eine sinnvolle Ergänzung des philosophischen Instrumentariums dar. Dadurch werden die klassischen Gedankenexperimente der philosophischen Tradition nicht obsolet. Vielmehr handelt es sich, in den Worten des amerikanischen Philosophen Daniel Dennett (*1942), bei Computersimulationen um Denkprothesen (vergleichbar etwa einem Mikroskop als einer Sehprothese), die es erlauben, empirisch kontrollierte Gedankenexperimente mit fast unendlich hoher Komplexität durchzuführen. Auf diese Art und Weise lässt sich im Idealfall die Fähigkeit zur mentalen Simulation erweitern und eine tragfähigere Operationalisierung und Überprüfung philosophischer Hypothesen erreichen.

3. Soziale Simulationen

Die zwei in SimTech vertretenen philosophischen Projekte vereinigen diese beiden Zielsetzungen, einerseits einen Beitrag zur Fundierung und Reflexion der Simulationwissenschaft zu leisten und andererseits deren Nutzung mit dem Ziel, die philosophische Forschung selbst voranzubringen. Das von Prof. Dr. Catrin Misselhorn geleitete Projekt „Simulating Collective Agency and Decision Processes“ beschäftigt sich mit sozialen Simulationen.

Soziale Simulationen sind heute ein funktionsstüchtiges Werkzeug, das für die Simulation verschiedener Formen interaktiver sozialer Prozesse eingesetzt werden kann, die eine große Zahl selbstständiger Akteure einschließen. Beispiele hierfür sind Finanztransaktionen, soziale Unruhen, Paradigmenwechsel in den Wissenschaften oder auch die Planung von Notfallszenarien. Die Aufgabe solcher sozialen Simulationen ist die Modellierung der wesentlichen Merkmale von Gruppenverhalten mit dem Ziel, zukünftige Zustände und Entwicklungen nicht-linearer Systeme und Prozesse vorherzusagen.

Innerhalb der gegenwärtig vorherrschenden Paradigmen sozialer Simulationen gibt es allerdings kaum systematische Auseinandersetzungen mit den verschiedenen Formen kollektiven Handelns und Entscheidens, die unter Philosophen seit den späten 80er Jahren wachsende Aufmerksamkeit erhalten haben. Viele der in diesem Zusammenhang entwickelten Ansätze gehen davon aus, dass kollektive Handlungen und Entscheidungsprozesse Eigenschaften besitzen, die sich nicht allein mit Hilfe der Absichten, Gedanken und Handlungen der beteiligten Individuen erklären lassen.

Ziel des Projekts ist es, diese beiden bislang voneinander getrennten Forschungszweige zu vereinen, um langfristig die Leistungsfähigkeit sozialer Simulationen zu verbessern, und gleichzeitig die innerhalb der Philosophie entwickelten theoretischen Ansätze zu den Grundlagen kollektiven Handelns und Entscheidens überprüfbar zu machen. In enger Zusammenarbeit mit den Kooperationspartnern, insbesondere Prof. Dr. Ortwin Renn, Prof. Dr. Albrecht Schmidt und Prof. Dr. Meike Tilebein, wird konkret untersucht, wie kollektives Handeln im Hinblick auf Energieverbrauch und institutionelle Entscheidungsprozesse optimal simuliert werden kann. Es wird ein umfassendes theoretisches Rahmenwerk entwickelt, welches die Anforderungen formuliert, die soziale Simulationen erfüllen müssen, um verschiedene Formen kollektiven Handelns und Entscheidens in diesen Kontexten adäquat zu simulieren.

Das Projekt leistet jedoch nicht nur einen Beitrag dazu, die Modellierung sozialer Simulationen zu optimieren. Es werden auch Verfahren entwickelt, mit deren Hilfe philosophische Hypothesen bezüglich



kollektiven Handelns und Entscheidens überprüfbar gemacht werden können. Indem diese Hypothesen selbst in die Simulationen eingespeist werden, um so ihre jeweiligen Auswirkungen zu studieren, können etwa philosophische Aussagen über die Natur kollektiven Handelns und Entscheidens auf ihre Tragfähigkeit hin untersucht werden.

Spätestens seit der Weltwirtschaftskrise wird die Art, wie Entscheidungen gefunden, soziale Akteure zusammenwirken, hinterfragt. Simulationen können die wesentlichen Merkmale solchen Gruppenverhaltens modellhaft nachstellen. Die Philosophie wiederum reflektiert die verschiedenen Formen kollektiven Handelns und Entscheidens.

Abbildung: shutterstock



Die Aussicht, komplexe soziale Simulationen in bestimmten Kontexten anzuwenden, beispielsweise als ein Werkzeug für die Vorhersage sozialer Unruhen und großer Proteste, wirft jedoch auch wichtige ethi-

Wann und ob aus einem einzelnen „Nein!“ ein kollektiver Protest wird, lässt sich in Zukunft vielleicht mit Hilfe von Simulationen vorhersagen. Die ethischen Implikationen solcher Prognosen beschäftigt die Philosophie.

Abbildung: shutterstock

sche Fragen auf: Die Möglichkeit, soziale Unruhen vorherzusagen, könnte Leben retten. Ebenso könnten aber auch autoritäre Regime solche Werkzeuge nutzen, um legitimen Protest frühzeitig zu unterdrücken. Diese Risiken müssen beurteilt werden und es gilt zu hinterfragen, welche Konsequenzen sie für die Forschung an sozialen Simulationen haben.

Erste Ergebnisse des Projekts wurden bereits auf der internationalen Tagung „Collective Agency and Cooperation in Natural and Artificial Systems“ vorgestellt, die von Prof. Dr. Catrin Misselhorn gemeinsam mit Prof. Dr. Frank Allgöwer, dem Direktor des Instituts für Systemtheorie und Regelungstechnik der Universität Stuttgart, 2013 organisiert wurde. Im Zentrum der Tagung stand die Erklärung von kollektivem Handeln und Kooperation in natürlichen und künstlichen Systemen. Dieses Thema wurde aus einer multi-disziplinären Perspektive behandelt, die Philosophie, künstliche Intelligenz, Informatik, Psychologie, Neurowissenschaften, Sozialwissenschaften und technische Kybernetik einschloss. Diese disziplinübergreifende Herangehensweise wurde auch durch einen Preis belohnt, den diese Konzeption im Rahmen des Wettbewerbs „Geist trifft Maschine“ an der Universität Stuttgart gewann.

4. Simulation und Wissenstransfer

Im zweiten philosophischen Projekt, das von Juniorprofessorin Dr. Ulrike Pompe-Alama betreut wird, geht es um die Frage, unter welchen Bedingungen Computersimulationen Instrumente eines erfolgreichen Wissenstransfers sein können. Ausgangspunkt des Projekts „Knowledge in Design and Use of Computer Simulations“ ist die Beobachtung, dass, obwohl der Gebrauch und die Benutzung von Computern stetig mehr Raum sowohl im privaten wie auch im öffentlichen Raum einnimmt, das eigentliche Wissen um die der Informationstechnologie zu Grunde liegenden Mechanismen und Funktionsweisen, eher weniger als mehr wird. Computer erscheinen einem Großteil der Laien als quasi-magische Maschinen, die auf Knopfdruck interessante Dinge machen. Kaum jemand ist allerdings in der Lage zu erklären, wie aus Nullen und Einsen eine Benutzeroberfläche entsteht oder was ein Browser eigent-

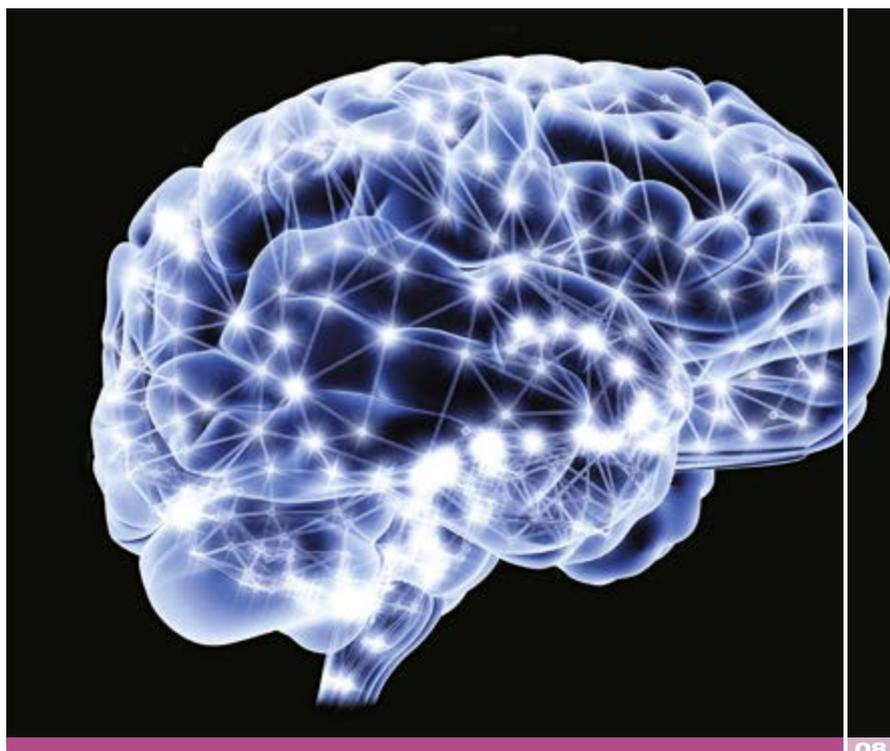
lich macht. Auch die Hersteller von Hard- und Software verfolgen das Ziel, die Benutzung einfacher und intuitiver zu gestalten, so dass eine fundierte Kenntnis der komplexen Zusammenhänge von Programmen und ihrer Implementierung überflüssig ist. Wenn nun in einem solchen Szenario das Ziel verfolgt wird, Simulationen „für den Hausgebrauch“ zu erschaffen, die es dem Endnutzer erlauben sollen, seine persönlichen Daten z.B. zu Zwecken seiner Finanzplanung auszuwerten, muss auf eine entscheidende Eigenschaft von Simulationsergebnissen hingewiesen werden: eine Simulation ist immer nur so „gut“, d.h. erfolgreich in Bezug auf ihre Vorhersagekraft, wie das ihr zu Grunde liegende mathematische Modell – und darüber hinaus natürlich auch extrem abhängig von der „Güte“ der eingespeisten Daten. Wenn ich beispielsweise in meiner Finanzplanungssimulation bei meinem angegebenen Monatseinkommen ein wenig zu großzügig aufrunde, könnte der Urlaub in der Karibik vielleicht doch nicht so bald in unmittelbar greifbare Nähe rücken. Sollen nun Nutzer kompetente Entscheidungen auf der Basis von Simulationen fällen können, muss gewährleistet sein, dass ein ausreichendes Verständnis der Funktionsweise der Simulation, des zu Grunde gelegten Modells und der möglichen Unsicherheiten und Fehlerquellen erlangt werden kann. Dies erfordert geeignete Instrumente, etwa zur Darstellung von Unsicherheiten, aber auch Kompetenzen auf Seiten der Erschaffer und Designer von Computersimulationen „für die breite Masse“, Kompetenzen im Sinne einer Sensibilisierung für die Bedürfnisse von Laiennutzern.

Mit der Frage, welche epistemischen Eigenschaften (also wissensvermittelnde Eigenschaften) Computersimulationen haben, haben sich auch bereits abgeschlossene Projekte befasst. So hat z.B. Marianne Richter in ihrer kürzlich abgeschlossenen Dissertation gezeigt, dass ein ganz wichtiger Aspekt von Computersimulationen, nämlich die Visualisierungen der berechneten Daten, einen ganz wesentlichen Bestandteil wissenschaftlichen Arbeitens ausmachen, da erst die Visualisierung oft sehr großer Datenmengen ihre kognitive Verarbeitung erlaubt. Entgegen klassischer philosophischer Positionen, die lediglich sprachbasierten Medien argumentative Kraft zusprechen wollen, ist es Richter ge-

lungen, zu zeigen, dass bildliche Mittel eine wesentlich größere Rolle spielen, als bloßes Beiwerk „fürs Auge“ zu sein, ja, dass Visualisierungen oft derart stark in wissenschaftliche Publikationen eingebunden sind, dass sie zu integralen Bestandteilen eines wissenschaftlichen Arguments werden. Das Projekt konnte dabei ganz entscheidend von der in SimTech bereitgestellten Infrastruktur profitieren, da die für ihre Arbeit relevanten Fallbeispiele direkt mit den Kollegen aus dem Fachbereich Visualisierung VISUS (Prof. Dr. Thomas Ertl, Martin Falk, Michael Raschke) und dem Fachbereich Systembiologie (Daniela Schittler) diskutiert und reflektiert werden konnten. In ähnlich enger Kooperation hat Juan Durán eine Arbeit zu der Erklärungskraft von Computersimulationen im wissenschaftlichen Kontext verfasst, die die These stark macht, dass die wissensgenerierenden Eigenschaften von Computersimulationen über das bloße theoretische Modellieren des Phänomenkomplexes, der untersucht werden soll, hinausgehen und Simulationen einen echten Mehrwert besitzen, den z.B. klassische Laborexperimente entbehren.

5. Anschließende Themen und Fragen

Wie in den meisten interdisziplinären Forschungsumfeldern streift die Beschäftigung mit einem Schwerpunkt, im hiesigen Fall die Simulationstechnologie, etliche weitere damit verknüpfte Themen, wie die – gerade brandaktuelle – Frage nach der Sicherheit privater Datenübertragung, der ethischen Perspektive auf das sogenannte Data-Mining, dem Phänomen sozialer Netzwerke und der Frage nach damit einhergehenden kulturellen Neuerungen, aber auch sehr theoretischen Aspekten, z.B. der Eruiierung neuer Möglichkeiten im Bereich der Quantencomputation, deren philosophische Reflexion wiederum bereichernde Impulse für den Austausch innerhalb des Exzellenzclusters bringen können. Die methodologische Stärke der Philosophie besteht dabei in der Auseinandersetzung mit relevanten Begriffen, beziehungsweise deren systematischer Analyse. Zum Beispiel wird in einigen simulationsbezogenen Kontexten der Begriff des Multiskalenmodellierens gebraucht. Doch was genau ist damit gemeint? In einem interdisziplinären Doktorandenworkshop



08

unter der Federführung des Instituts für Materialwissenschaften (Prof. Dr. Siegfried Schmauder) und dem Institut für Philosophie (JProf. Dr. Ulrike Pompe-Alama) und deren Mitarbeiter, David Molnar und Marianne Richter, konnte erarbeitet werden, dass das Einbeziehen mehrerer Skalen (sowohl in zeitlicher als auch räumlicher Dimension) in der Theorie angestrebt, in der Praxis aber schwer zu erreichen ist.

Das Aufdecken von Diskrepanzen, die zwischen dem erwarteten und dem aktuellen Nutzen von großangelegten Forschungsagenden besteht, ist ferner Aufgabe einer kritischen Wissenschaftsreflexion. Ein aktuelles Fallbeispiel besteht hier in den versprochenen Erkenntnissen, die durch großangelegte Gehirnsimulationen erzielt werden sollen. Im Human Brain Project, eines der EU-Flagship Projekte, soll ein menschliches Gehirn auf Zellebene virtuell nachgebildet werden – die Erwartungen an das Projekt sind hoch. So soll durch das Simulieren von großen Neuronenverbänden unter anderem aufgedeckt werden, wie das menschliche Denken funktioniert. Fraglich ist jedoch, ob solcherart doch recht unscharfe und begrifflich unterbestimmte Konstrukte wie „Denken“, „Bewusstsein“ oder „Intelligenz“ einfach aus einem virtuellen Gehirn „ablesbar“ gemacht werden können, oder

Die virtuelle Nachbildung des Gehirns, die Simulation ganzer Neuronenverbände steht im Zentrum jüngster Forschungsprojekte. Ob sich das „Denken“ oder „Bewusstsein“ aber bildlich so leicht einfangen lassen, muss auch in der Philosophie reflektiert werden.

Abbildung: picture alliance/Science Photo Library

ZUSAMMENFASSUNG

Wie wird Simulationstechnologie zu einem eigenständigen Wissenschaftszweig? Philosophieren über Simulationstechnologie eröffnet einen breiten Kanon an Fragestellungen und Problemfeldern, die diesem Anliegen Vortrieb geben soll: Welche Vorzüge bieten Computersimulationen gegenüber klassischen Experimenten? Wo liegen Möglichkeiten und Grenzen des Einsatzes von Simulationen in Wissenschaft, Wirtschaft und Gesellschaft? Die Autorinnen stellen ihre Forschungsansätze und laufenden Projekt vor und besprechen die Aufgabenstellung der Philosophie innerhalb des Stuttgarter Exzellenzclusters SimTech.

ob hier nicht zuerst eine grundlegende Analyse des zu erwartenden Desiderats erfolgen sollte, die operationalisierbare Experimente mit einem solchen Instrument ermöglichen.

7. Ausblick: Stuttgarter Philosophie

Die Rolle der Philosophie im Stuttgarter Exzellenzcluster SimTech wirft auch ein Licht auf die Alleinstellungsmerkmale der Stuttgarter Philosophie. Diese zeichnet sich durch einen Ansatz aus, der Grundlagenforschung und Anwendungsbezug verbindet. Die Besonderheit der Stuttgarter

Herangehensweise an philosophische Themen lässt sich durch die drei Schlagworte Innovation, Integration und Interdisziplinarität auf den Punkt bringen. Es werden sowohl neue Perspektiven auf die grundlegenden Fragen der philosophischen Tradition aufgezeigt als auch neue technische, wissenschaftliche und gesellschaftliche Entwicklungen philosophisch reflektiert. Die aktuellen philosophischen Forschungsprobleme und Diskussionen werden weitergeführt und innovative philosophische Theorien und Erklärungsmodelle erarbeitet. Dabei wird berücksichtigt, dass sich viele Fragen und Probleme nicht allein aus der Perspektive der Geisteswissenschaften, der Sozialwissenschaften oder der Natur- und Technikwissenschaften in den Blick bekommen lassen. Die Stuttgarter Philosophie verfolgt daher einen integrativen Ansatz in der Wissenschaftstheorie, der diese verschiedenen Sichtweisen zusammen bringt. Es versteht sich von selbst, dass eine solche Herangehensweise die intensive Zusammenarbeit der Philosophie mit den anderen Disziplinen erfordert, wofür SimTech ein gelungenes Beispiel ist.

• *Catrin Misselhorn, Ulrike Pompe-Alama*

DIE AUTORINNEN



CATRIN MISSELHORN

ist seit 2012 Inhaberin des Lehrstuhls für Wissenschaftstheorie und Technikphilosophie sowie Direktorin des Instituts für Philosophie der Universität Stuttgart. Zu ihren Forschungsschwerpunkten gehören Erkenntnis- und Wissenschaftstheorie, Technikphilosophie sowie Philosophie des Geistes, der Sprache und der Kultur. Im Exzellenzcluster SimTech leitet sie das Projekt „Simulating Collective Agency and Decision Processes.“



ULRIKE POMPE-ALAMA

ist Juniorprofessorin für Philosophie der Simulation im Exzellenzcluster SimTech der Universität Stuttgart. Nach dem Studium der Philosophie, Kunstgeschichte und Biopsychologie an der Ruhr-Universität Bochum wurde sie 2010 im Fach Philosophie promoviert. Seit April 2011 forscht sie zu Fragen über Wissenstransfer, epistemischen Eigenschaften von Simulationen, und simulationsbasierten Modellierungsmöglichkeiten, insbesondere in Bezug auf das menschliche Gehirn.

Kontakt

Universität Stuttgart
Institut für Philosophie
Seidenstraße 36
D-70174 Stuttgart
Tel. +49 (0) 711/685-82491
Fax +49 (0) 711/685-71234
E-Mail: secretariat@philo.uni-stuttgart.de
Internet: www.uni-stuttgart.de/philo