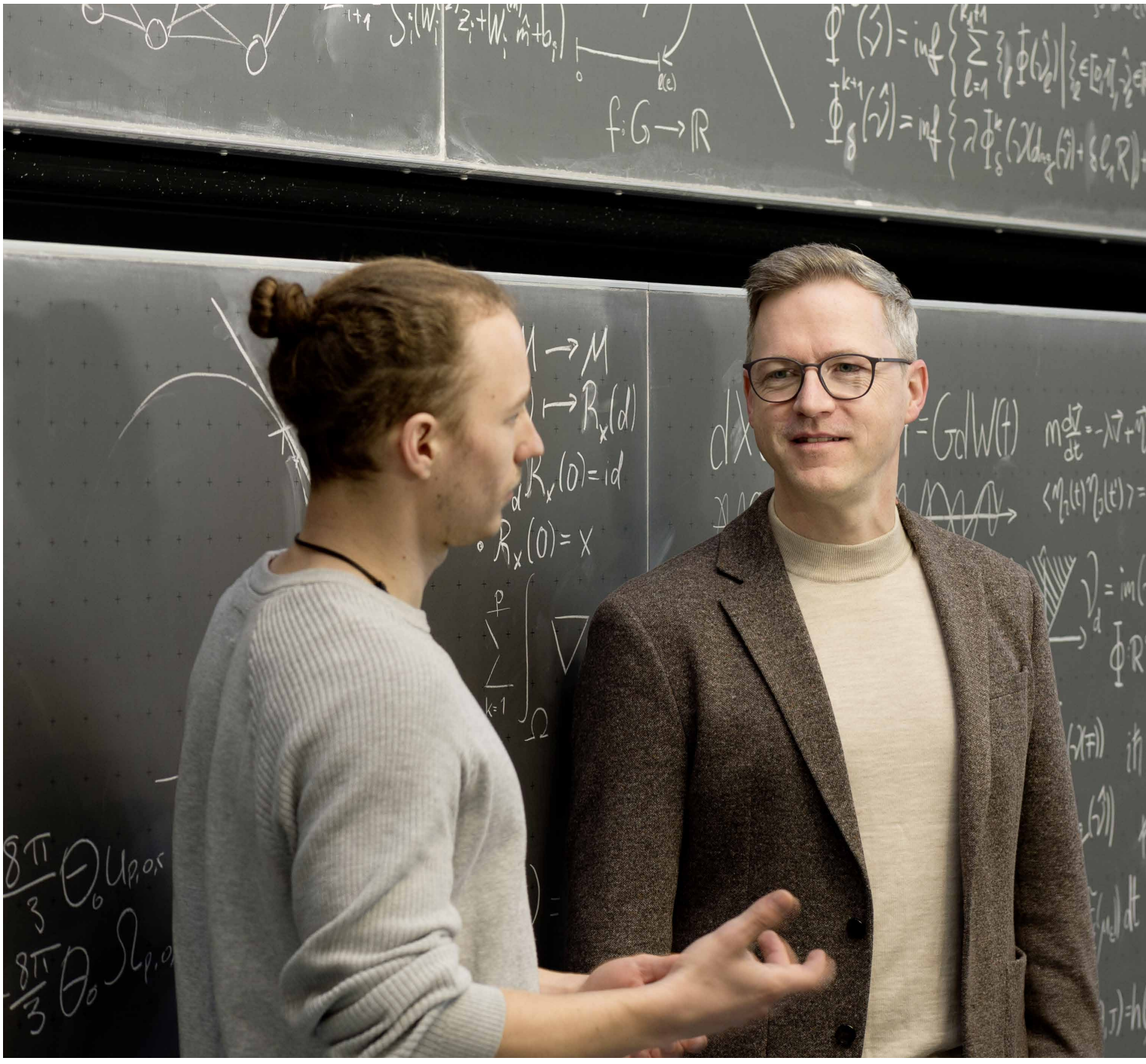
Berechnet, nicht geraten



Im Centre for Advanced Analytics and Predictive Sciences der Universität Augsburg arbeiten Forschende über Instituts- und Fakultätsgrenzen hinweg an Modellen, Simulationen und datenbasierten Methoden. Ihr Ziel: Antworten auf jene komplexen wissenschaftlichen Fragen zu finden, die eine Disziplin allein nicht lösen kann.

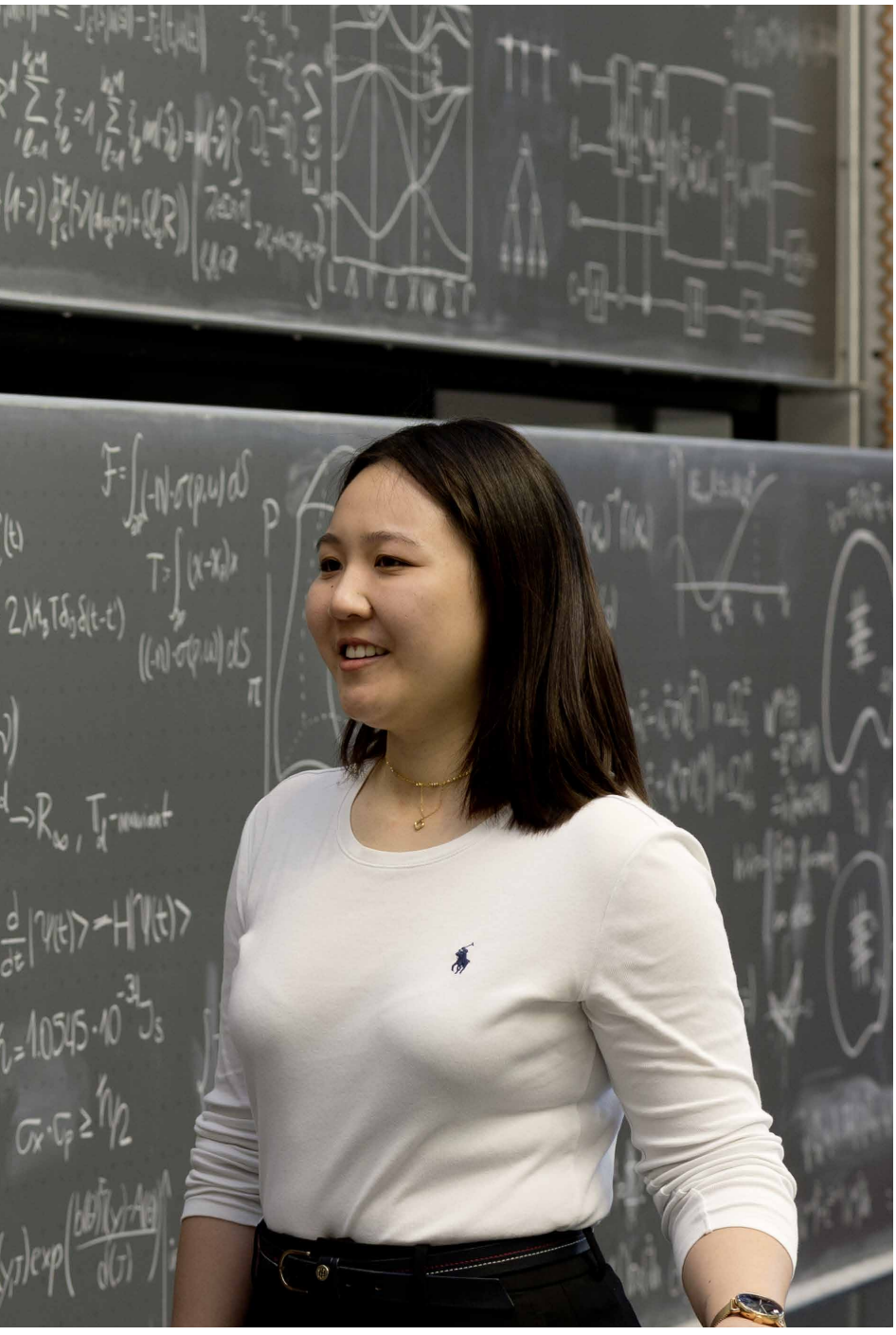


Foto: Bernd Müller

Ideen entstehen im Gespräch: CAAPS-Gründungsdirektor Prof. Dr. Daniel Peterseim (Mitte) im Gespräch mit den Nachwuchs-Forschenden Julian Salmon und Thuy Truong.

Wie verhält sich ein neuartiges Material unter extremen Bedingungen? Wie entwickelt man neue Stoffe für Energietechnik, ohne tausend Versuche durchführen zu müssen? Wie macht man Quantencomputer für wissenschaftliches Rechnen nutzbar? Wie entdeckt man seltene Krankheitsmuster in großen medizinischen Datensätzen? Wie kann man Medikamente schneller entwickeln, obwohl klinische Daten knapp sind? Und wie lassen sich auch aus kleinen Datenmengen belastbare Vorhersagen gewinnen? Viele der spannendsten wissenschaftlichen Fragen beginnen dort, wo man nicht einfach mehr messen, testen oder direkt beobachten kann, was man wissen will.

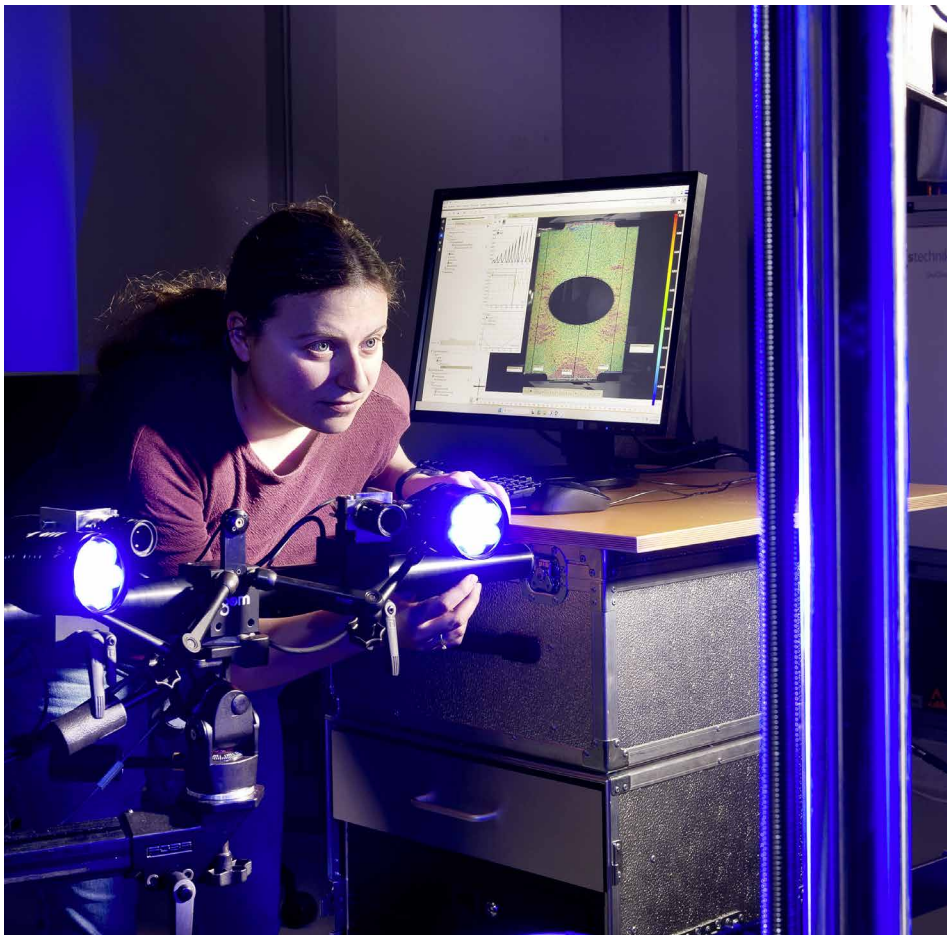
Am Centre for Advanced Analytics and Predictive Sciences, kurz CAAPS, der Universität Augsburg entstehen Modelle und Simulationen für genau diese Fälle. Forschende aus so unterschiedlichen Disziplinen wie Medizin, Materialwissenschaft, Physik, Informatik, Mathematik und den quantitativen Lebenswissenschaften arbeiten hier gemeinsam daran, neue Erkenntnisse zu gewinnen. Im Zentrum stehen nicht einzelne Fächer, sondern ihre Vernetzung.

„Das CAAPS bündelt datengetriebene Forschungsschwerpunkte der Universität und schafft gezielt Synergien zwischen experimenteller Datenerhebung, Sensorik, Bildgebung, intelligenter Datenverarbeitung sowie mathematischer Modellierung und Simulation“, erklärt die Geschäftsführerin Dr. Ursula Weiß. „Gerade aus diesem Zusammenspiel entstehen neue Ansätze zur Arbeit an wissenschaftlichen Fragen, die sich von einzelnen Fachgebieten allein kaum beantworten ließen.“

Von Daten zum Werkzeug

Denn Daten allein reichen oft nicht aus. Erst ihre Verbindung mit theoretischen Modellen, statistischen Methoden und simulationsgestützter Analyse macht sie zu einem Werkzeug wissenschaftlicher Erkenntnis. „Wir nutzen Daten nicht nur zur Beschreibung eines Ist-Zustandes, sondern schöpfen ihren Informationsgehalt weiter aus“, erklärt Dr. Ursula Weiß. Ziel ist es, auch kleine oder schwer zugängliche Datenmengen so zu nutzen, dass daraus belastbare Aussagen über komplexe Prozesse möglich werden.

Das Zentrum versteht sich dabei als gemeinsamer Forschungsraum für datenbasierte Wissenschaft. Hier treffen unterschiedliche Methoden und Perspektiven aufeinander: Messung und Modellierung, Experiment und Simulation, Theorie und Anwendung. Die besondere Stärke des CAAPS liegt genau in dieser engen interdisziplinären Zusammenarbeit und in den neuen wissenschaftlichen Möglichkeiten, die aus ihr entstehen. Dreh- und Angelpunkt des Zentrums ist der methodische Kern, der durch die Grundlagenforschung in Mathematik, Informatik und Physik und deren Methoden und Modellen getragen ist. Dieser Kern fungiert als Schnittstelle zwischen den verschiedenen Anwendungsgebieten: Quantum Science, Quantitative Life Sciences, Computational Medicine und Data-driven Materials. Das CAAPS ermöglicht so die Übertragung von Wissen zwischen Bereichen, die vielleicht auf den ersten Blick nicht viel gemeinsam haben.



Wie belastbar sind neue Werkstoffe? Doktorandin Michèle Legat untersucht das im Anwendungsfeld Data-driven Materials.

Wege der Zusammenarbeit

Interdisziplinarität entsteht dabei im CAAPS nicht abstrakt, sondern an einem bestimmten Punkt: dort, wo eine konkrete wissenschaftliche Frage auf Methoden trifft, die sie erst bearbeitbar machen. Dabei sieht der Direktor des Zentrums, Prof. Dr. Daniel Peterseim, zwei typische Wege, wie Forschende mit sehr unterschiedlichen Hintergründen zusammenfinden.

Der erste beginnt mit einer Frage aus der Anwendung. In der Medizin kann das etwa eine klinische Beobachtung sein, für die es noch kein ausreichendes mechanisches oder mathematisches Modell gibt. Damit daraus ein Forschungsprojekt werden kann, muss diese Beobachtung in eine Form gebracht werden, an der andere Disziplinen weiterarbeiten können. Relevante Messgrößen müssen bestimmt, Belastungen beschrieben, Strukturen modelliert und geeignete Simulationen entwickelt werden.

Ein Beispiel kommt aus der Orthopädie. Dort interessierte sich ein Mediziner für bislang weniger untersuchte Strukturen im Kniegelenk, die bei Verletzungen geschädigt werden können. Über ein „CAAPS Connect“-Format fanden kurzfristig Arbeitsgruppen aus Medizin, Mathematik und Ingenieurwissenschaften zusammen. In der gemeinsamen Diskussion wurde aus der klinischen Beobachtung ein mechanisch und rechnerisch bearbeitbares Problem. „Genau darin liegt ein Mehrwert des CAAPS“, betont Peterseim. „Es bringt nicht nur Personen zusammen, sondern hilft, eine Fragestellung so zu übersetzen und zu präzisieren, dass daraus ein bearbeitbares Forschungsprojekt werden kann.“ Inzwischen ist aus der Anfrage ein erstes Projekt an der Schnittstelle von Orthopädie und simulationsgestützter Mechanik angelaufen.

Der zweite Weg entsteht aus der internen Vernetzung. Hier steht nicht eine einzelne Anfrage am Anfang, sondern ein gemeinsames Thema, an dem mehrere Disziplinen aus unterschiedlichen Richtungen arbeiten. Ein Beispiel ist das Quantencomputing. Dort reicht kein einzelner fachlicher Zugang aus. Die Physik hilft, Quantensysteme zu verstehen und zu kontrollieren. Die Mathematik entwickelt Modelle, Gleichungen und Algorithmen. Basierend auf diesen Grundlagen entwickelt die Informatik Algorithmen und Software, welche in ausführbare Prozesse übersetzt werden. So entstehen Kooperationen oft schon, bevor ein fertiges

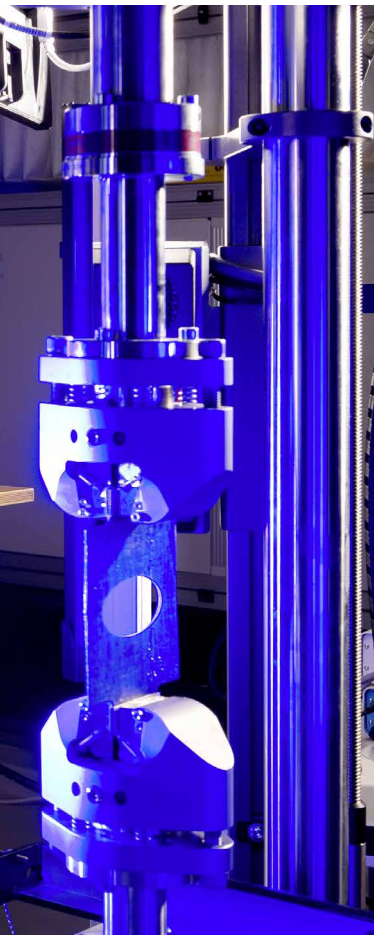


Foto: Bernd Müller

„Die Verbindung der Fakultäten und der einzelnen Disziplinen im CAAPS ist ein wunderbares Beispiel für dieses Netzwerk – und damit für die Einzigartigkeit, für die Augsburg steht."

Prof. Dr.-Ing. Michael Schlottke-Lakemper

Projekt formuliert ist. Forschende erkennen, dass sie mit verschiedenen Methoden an verwandten Fragen arbeiten.

Das CAAPS schafft den Raum, in dem solche Überschneidungen sichtbar werden und aus ihnen gemeinsame Forschung entsteht. Wie aus dieser Vernetzung im Zentrum dann konkrete Forschung wird, zeigt sich an drei sehr unterschiedlichen Beispielen: dem Aufbau künftiger Quantencomputer, der Untersuchung von Belastung der Aortenwand (medizinischer Begriff, die dreischichtige Wand der Hauptschlagader) und der Suche nach geeigneten Lipid-Nanopartikeln.

Forschung für den Quantencomputer

In der Forschung zum Quantencomputing greifen Arbeiten aus Mathematik, Informatik und Physik ineinander. Die Vernetzung wird dabei an zwei miteinander verbundenen Seiten des Quantencomputings sichtbar: auf der Hardwareseite, wo physikalische Systeme für Quantenhardware modelliert, simuliert und experimentell untersucht werden, und auf der Softwareseite, wo Simulationsmodelle und Algorithmen entwickelt werden, um Quantencomputer für wissenschaftliche Fragestellungen nutzbar zu machen.

Beteiligt sind unter anderem die Gruppen von Prof. Dr. Jakob Kottmann (Informatik), Prof. Dr. Mónica Benito González (Physik) und Prof. Dr. Peterseim (Mathematik). Sie bringen unterschiedliche Perspektiven ein: Die Physik hilft Quantensysteme zu verstehen und zu kontrollieren, die Mathematik liefert Modelle, Gleichungen und numerische Verfahren. Die Informatik übersetzt diese schließlich in Algorithmen, Softwarestrukturen und ausführbare Rechenprozesse. Methodisch ist diese Arbeit überwiegend analytisch und numerisch: „Analytisch werden Laufzeit und Ressourcen abgeschätzt. Numerisch werden Gleichungen und Algorithmen explizit simuliert", erklärt Kottmann. Das heißt: Die Forschenden prüfen, welcher Rechenaufwand nötig ist, welche Ressourcen ein Verfahren braucht und wie sich physikalische oder mathematische Fragestellungen in Modelle übersetzen lassen. Zugleich untersuchen sie Gleichungen, Modelle und Algorithmen rechnerisch, bevor solche Verfahren auf Quantenhardware eingesetzt werden können. „Wir arbeiten daran, Quantencomputer für wissenschaftliche Fragestellungen nutzbar zu machen."

Auf der Hardwareseite wird diese Verbindung bei der Arbeit an sogenannten Quantenpunkten sichtbar. Hier kommen physikalische Fragestellungen und rechnergestützte Modellierung zusammen: Die Forschenden bilden das physikalische System im Computer nach, simulieren das Verhalten der Elektronen und vergleichen die Modelle mit Beobachtungen. „Wir setzen dabei die neuesten maschinellen Lern- und Simulationswerkzeuge ein sowie komplexe Simulationsverfahren", erklärt Kottmann. „Ziel ist es, besser zu verstehen, unter welchen Bedingungen sich Quantenpunkte als Grundlage für die skalierbare Realisierung sogenannter Qubits eignen könnten, mit denen Quantencomputer Informationen speichern und verarbeiten", ergänzt Benito González.

Auf der Softwareseite geht es darum, mathematische Verfahren in Rechenprozesse und gemeinsame Forschungssoftware zu übersetzen. Denn ein Quantencomputer allein löst noch kein wissenschaftliches Problem. Dafür braucht es Algorithmen, die auf seine besondere Funktionsweise zugeschnitten sind. Ein Beispiel dafür ist das Projekt Unitaria. Auf klassischen Computern können Forschende für viele Simulationen auf etablierte Software zurückgreifen: Die zugrunde liegenden Gleichungen werden in einzelne Rechenschritte zerlegt, die häufig auf Operationen mit Zahlenfeldern, sogenannten Matrizen, beruhen. Quantencomputer können solche klassischen Routinen jedoch nicht einfach übernehmen. Ihr möglicher Vorteil entsteht erst, wenn Rechenoperationen so umformuliert werden, dass sie zur besonderen Arbeitsweise von Qubits passen. Genau dafür entwickeln die Forschenden im Projekt Unitaria Software: Sie automatisiert solche Umformulierungen und schafft die Grundlage dafür, Quantencomputer für spezifische Forschungsfragen einzusetzen.

„Darauf bauen wir dann konkrete Anwendungen auf, etwa die Untersuchung chemischer Reaktionen in der Quantenchemie oder die Vorhersage von Bauteilversagen in der Mechanik", erläutert Peterseim.

Gerade an diesen Beispielen zeigt sich, wie interne Vernetzung im CAAPS funktioniert. Zusammenarbeit wächst dort, wo Forschende aus Physik, Informatik und Mathematik erkennen, dass Quantensysteme, Algorithmen, gemeinsame Forschungssoftware und mathematische Modelle verschiedene Seiten verwandter Probleme berühren.

Der Blick in die Schlagader

Ein weiteres Beispiel der Zusammenarbeit im CAAPS zeigt sich am Risiko einer Aortendissektion, also einem Einriss der inneren Gefäßwand. „Am Anfang stand die klinische Erkenntnis der Mediziner, solch ein Vorkommnis nicht allein durch Kriterien wie den Gefäßdurchmesser erklären zu können. Und die Frage nach weiteren Erklärungsmöglichkeiten", berichtet Prof. Dr.-Ing. habil. Christian Weißenfels. Daraus entstand die Idee, das Zusammenspiel von Blutfluss, Gefäßform und den mechanischen Belastungen in der Gefäßwand am Computer zu analysieren. Schnell wurde deutlich, dass Bildgebung, physikalische Modellierung und Simulationen zusammengeführt werden mussten. „Aus dieser Frage entwickelte sich die Zusammenarbeit zwischen Medizin, Computational Mechanics und High Performance Computing", erklärt der Forscher.

So stieß das Team von Prof. Dr.-Ing. Michael Schlottke-Lakemper, Professor für High-Performance Scientific Computing, zur Gruppe hinzu. Schlottke-Lakemper erzählt: „Schon vor meiner Berufung nach Augsburg hatten wir uns mit dem Thema Aorta beschäftigt – daran konnte ich nun mit den Kollegen über Fachgrenzen hinweg direkt anschließen." Für den Forscher ist die Universität Augsburg als Netzwerkuniversität ein wissenschaftlicher Glücksfall: „Die Verbindung der Fakultäten und der einzelnen Disziplinen im CAAPS ist ein wunderbares Beispiel für dieses Netzwerk – und damit für die Einzigartigkeit, für die Augsburg steht."

„Wir nutzen Daten nicht nur zur Beschreibung eines Ist-Zustandes, sondern schöpfen ihren Informationsgehalt weiter aus."

Dr. Ursula Weiß

Die klinische Grundlage liefert eine Kooperation mit der Herzchirurgie um Prof. Dr. Evaldas Girdauskas (Universitätsklinikum Augsburg/ UKE Hamburg). Ausgehend von der aus CT-Angiographie (Untersuchung der Blutgefäße mit einem modernen Computertomographen) gewonnenen Gefäßgeometrie wird die Aorta in ein berechenbares Modell überführt. Eine weitgehend automatisierte Vorverarbeitung wandelt dabei die komplexe Anatomie in eine simulationsfertige Ausgangskonfiguration um. Auf dieser Grundlage führen die Wissenschaftler Simulationen durch, die das Zusammenspiel von Strömung und Deformation abbilden. Dabei ist die realistische Berechnung der nachgiebigen Gefäßwand deutlich aufwendiger als eine starre Modellannahme. Die patientenindividuelle und hochaufgelöste Simulation wird daher erst durch den Einsatz effizienter numerischer Verfahren auf modernen Grafikprozessoren möglich. „Unser Fokus liegt hier nicht auf der Vorhersage, sondern auf der Identifikation des Geschehens", erläutert Weißenfels. „Durch den Vergleich von simulierten und gemessenen Größen wollen wir zukünftig auf die Materialeigenschaften der Aortenwand schließen können."

Das Ziel: Aus der Kopplung dieser Disziplinen Indikatoren abzuleiten, die eine verbesserte Bewertung der Aortenwand ermöglichen. Sie sollen zukünftig für eine individuelle Risikoabschätzung für Patienten genutzt werden.

Ein Turbo für die Medikamentenentwicklung

Dem Patientenwohl dient auch ein weiteres Projekt des CAAPS. Es beschäftigt sich mit der Identifikation optimaler Lipid-Nanopartikel und wird im Team um Prof. Dr. Christoph Westerhausen aus der Medizin, um Prof. Dr.-Ing. Lars Mikelsons aus der Informatik sowie von Dr. Nicolas Färber, CEO des Start-ups Lipospec, vorangetrieben.

Ausgangspunkt ist die Tatsache, dass Lipid-Nanopartikel als „Transportkapseln" für RNA-Wirkstoffe, aber auch für Therapien von Krebs oder Alzheimer genutzt werden sollen. Dabei entsteht die Notwendigkeit, viele unterschiedliche Varianten von Lipid-Nanopartikeln auf ihre Brauchbarkeit zu testen. „Dies geschieht heute immer noch in einem Trial-and-Error-Verfahren", erklärt Prof. Westerhausen. „Und das bedeutet: hoher Zeit- und Kostenaufwand, hohe Unsicherheit sowie viele Fehlschläge." Hinzu tritt ein weiteres Problem: Eigenschaften wie die Wirksamkeit, Stabilität und Nebenwirkungen sind mit den bisherigen Methoden kaum zuverlässig vorhersagbar.

Das Ziel des Projektes war damit vorgegeben: Die Identifikation geeigneter Lipidformulierungen sollte in schneller Entwicklung mit wenig Fehlversuchen gelingen und dabei sowohl eine bessere Vorhersage der Eigenschaften ermöglichen als auch geringere Kosten verursachen.

Die Idee der Forscher: Sie kombinieren künstliche Intelligenz, die sie auf Datensätze anwenden, die zusätzlich zur biologischen Wirksamkeit



Foto: Bernd Müller

Die Aorta als Farbkarte: In der Simulation zeigen Farben, wie stark Blutfluss und Gefäßwand belastet werden – ein Weg, das Risiko einer Aortendissektion künftig individuell abzuschätzen.

neue optische Messmethoden mit Information zu Struktur und Stabilität beinhalten. Dabei setzen sie auf die Erkennung von Mustern in Struktur und Funktion. Die Auswertung vieler Messreihen wird dann zum Training einer KI-Architektur genutzt. Deren Erkenntnisse wiederum sollen in die Vorhersage der Eigenschaften auf Basis der optischen Messdaten für bisher unbekannte Partikel einfließen.

Der Fokus der experimentellen Untersuchungen liegt hier unter anderem auf Temperatur, pH-Wert oder mechanischen Einflüssen, die die Struktur der Lipide verändern. „Wir nutzen dazu optische Methoden wie die Fluoreszenz, um Zustände von Lipiden sichtbar zu machen", erklärt Westerhausen.

So gewinnen die Wissenschaftler Erkenntnisse, wie bestimmte Lipidzustände die erforderlichen Eigenschaften der Lipid-Nanopartikel und somit letztlich die Freisetzung von Wirkstoffen in Zellen begünstigen. Um die Daten effizient erfassen zu können, ist der Beitrag von Dr. Färber essenziell. In der Lipospec GmbH werden die Messgeräte und -methoden entwickelt und auf den Markt gebracht. Hierbei besteht wiederum eine enge Zusammenarbeit mit den Grundlagenforschern im Team um Prof. Westerhausen am Lehrstuhl für Physiologie, aus dem das Start-up entstanden ist.

Das Team von Prof. Mikelsons kommt durch die Kombination mit KI ins Spiel: Es ist spezialisiert auf Analyse und Erklärung komplexer Daten und Systeme. Das Team entwickelt Modelle, die Muster in großen Datensätzen erkennen und überträgt Methoden aus dem Engineering technischer Systeme auf medizinische Fragestellungen. „Unsere Auswertung komplexer Messdaten und die daraus folgende Vorhersage von Eigenschaften dient als eine Art Übersetzer zwischen Daten und Vorhersagen", erklärt der Forscher seinen Ansatz. Erst durch das Zusammenspiel von medizinischer Expertise, physikalischen Messverfahren und KI entsteht so ein Gesamtbild, das nicht nur die Analyse komplexer Daten ermöglicht, sondern auch fundierte Vorhersagen für die Entwicklung neuer Lipid-Nanopartikel liefert.

Ein Netz als Uni der Zukunft

Die Projekte des CAAPS zeigen, dass wissenschaftlicher Fortschritt oft dort entsteht, wo unterschiedliche Perspektiven aufeinandertreffen. In der Quantenforschung arbeiten Mathematik, Physik und Informatik gemeinsam an den Grundlagen zukünftiger Quantencomputer. Bei der Erforschung von Aortendissektionen verbinden sich klinische Erfahrung, mechanische Modellierung und Hochleistungsrechnen zu neuen Ansätzen der individuellen Risikobewertung. Und bei der Entwicklung von Lipid-Nanopartikeln entstehen durch das Zusammenspiel von Medizin, physikalischen Messverfahren und künstlicher Intelligenz neue Wege für die Medikamentenentwicklung.

So unterschiedlich diese Projekte sind, folgen sie doch demselben Prinzip: Wissenschaftliche Fragen werden durch die Verbindung von Daten, Modellen und Fachwissen bearbeitbar. Das CAAPS schafft dafür die Voraussetzungen. Es macht methodische Gemeinsamkeiten sichtbar, erleichtert den Austausch über Fachgrenzen hinweg und hilft dabei, aus einzelnen Ideen gemeinsame Forschung zu entwickeln. Das CAAPS macht damit vor, wie Forschung künftig komplexe Herausforderungen lösen kann: vernetzt, datenbasiert und über Grenzen der Disziplinen hinweg.