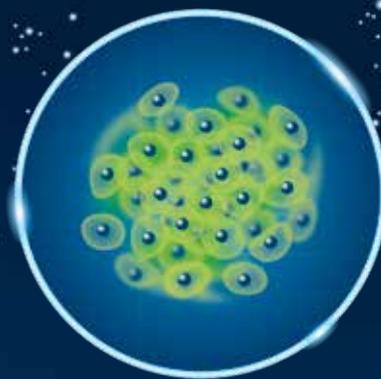
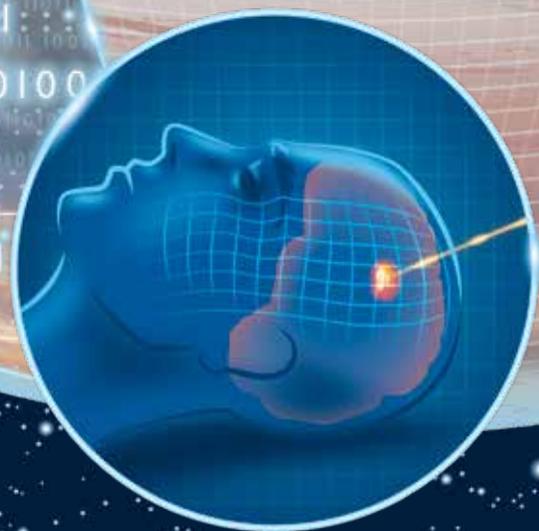


KÜNSTLICHE INTELLIGENZ

Schubkraft für die
Forschung



Wo die Jugend hackt

Spielerisch in Datenwelten eintauchen

Nobelpreisträgerin Donna Strickland

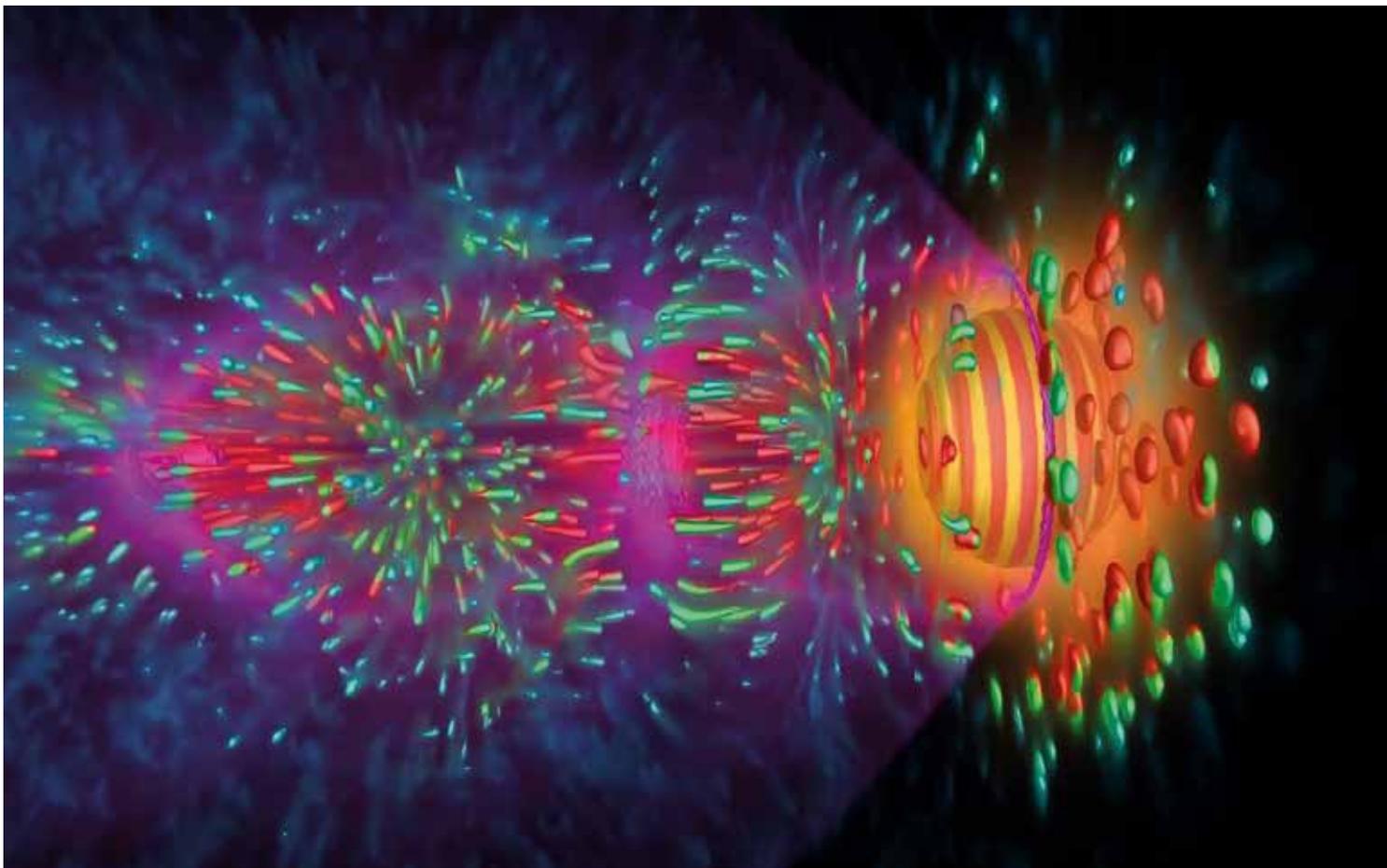
Zu Besuch im „Extremlabor“

Schwerelos strömend – Datenschätze aus dem All

Den Auftrieb für sechs Minuten ausschalten

Kunstwerk aus dem Exascale-Computer

Was passiert, wenn ein ultrakurzer und zugleich äußerst intensiver Laserblitz auf das Edelgas Helium trifft? Eine Explosion, prächtig wie ein Gemälde! Der Laser (orangefarbener Bereich) erzeugt einen exotischen Materiezustand: ein Plasma aus ionisierten Helium-Atomen. Wie eine purpurfarbene Welle treibt das Laserlicht die Elektronen aus dem Plasma vor sich her und beschleunigt die Elektronenpulse (rot, grün und blau) zu hohen Energien.



Extrem vielseitiger Simulationscode

Um den Beschleunigungsprozess simulieren und sichtbar zu machen, braucht es die weltweit leistungsfähigsten Rechner. Und die richtigen Werkzeuge wie den Simulationscode PIconGPU (Particle-In-Cell on Graphics Processing Units) aus dem HZDR. Seine Besonderheit: der asynchrone Datentransfer. Das bedeutet, dass die Software hunderte Milliarden von Makropartikeln auf einem GPU-Rechencluster parallel berechnen kann.

Schnellster Rechner der Welt

PIconGPU läuft auf Grafikkarten aller Hersteller. Forschungsgruppen aus dem HZDR gelang es, die Software an den US-amerikanischen FRONTIER-Rechner am Oak Ridge National Laboratory anzupassen. Das Exascale-System kann eineinhalb Trillionen Gleitkomma-Rechenoperationen pro Sekunde durchführen. Mit diesen 1,5 ExaFLOPS sind großangelegte Simulationen möglich, die noch vor wenigen Jahren unvorstellbar waren.

Datenströme ins Bild gesetzt

Das Kunstwerk verdankt sich auch ISAAC, einem Tool für die Echtzeit-Bildgebung von Simulationen auf dem Supercomputer FRONTIER. ISAAC visualisiert die Daten genau dort, wo sie von PIconGPU berechnet werden: direkt auf den Grafikkarten. Aus jedem Simulationsschritt erzeugt ISAAC sofort ein Gesamtbild und muss dafür pro Minute einen Datenstrom von 22 Petabyte verarbeiten. Zum Vergleich: Pro Minute fließt ein Datenvolumen von weniger als zehn Petabyte in den USA durch das Internet.

22

Petabyte pro Minute

Interaktive Datenanalyse

Die aneinandergereihten Einzelbilder ergeben einen fortlaufenden Film in Echtzeit. Per Internet können die Forscherinnen in Dresden verfolgen, welche Daten PIconGPU gerade in den USA produziert. Sie können wählen, welche Bilder sie sehen möchten, den Blickwinkel verändern, hinein- und herauszoomen und sogar mit der Simulation interagieren. So können sie herausfinden, welche Daten für eine detaillierte Analyse interessant sind und längerfristig gespeichert werden sollten.



↗ [Film auf YouTube](#)

Das Frontier Center for Accelerated Application Readiness (Zentrum für beschleunigte Anwendungsbereitschaft) wählte 2019 acht Forschungsprojekte aus, die den Aufbau des Hochleistungsrechners begleiten – darunter auch das PIconGPU-Team der University of Delaware in Zusammenarbeit mit dem HZDR.

1,5

ExaFLOPS

Kontakt

_CASUS – Center for Advanced Systems Understanding am HZDR, gemeinsam gegründet von HZDR, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung, Max-Planck-Institut für molekulare Zellbiologie und Genetik, TU Dresden, Universität Wrocław

Dr. Michael Bussmann
m.bussmann@hzdr.de

Lieber Leser, liebe Leserin,

weder Zufall noch Hype haben den Schwerpunkt für diese entdeckt-Ausgabe bestimmt. Vielmehr waren es die vielfach beachteten Erfolge, auf die das CASUS als Institut für digitale, interdisziplinäre Systemforschung nach nur knapp vierjähriger Gründungs- und Aufbauphase verweisen kann. Dass nun bereits ein weiterer Standort in Görlitz angemietet werden muss, weil es für die Datenforscherinnen in ihrem Domizil am Untermarkt zu eng wird, freut den neuen Direktor Thomas Kühne, sieht er dies doch als Beleg für die internationale Attraktivität seines HZDR-Instituts.

Künstliche Intelligenz (KI) verändert die Wissenschaft ebenso rasant wie alle Bereiche unseres Lebens. Etwa in der Medizin. Für den OP-Saal entwirft die Informatikerin Stefanie Speidel vom Nationalen Centrum für Tumorerkrankungen Dresden echtzeitfähige Algorithmen, damit Krebsoperationen optimal verlaufen und das medizinische Personal bei etwaigen Komplikationen schnell eingreifen kann. Oder bei der Rohstoffsuche in entlegenen Gebieten. Hier arbeiten Wissenschaftler mit Methoden des Maschinellen Lernens, um wertvolle Informationen aus unterschiedlichsten Datensätzen zu gewinnen. Die neuen Werkzeuge der Künstlichen Intelligenz beschleunigen den Erkenntnisgewinn und überwinden die Grenzen der Disziplinen, den Menschen jedoch ersetzen sie weder im OP-Saal noch in der Wissenschaft.

Ich wünsche Ihnen eine erkenntnisreiche Lektüre.

Christine Zimmermann
Abteilung Kommunikation und Medien am HZDR



Ausgehend von einer Stichwortliste entstand zunächst der linke Text. Das KI-gestützte Textgenerator-Tool ChatGPT (Modell 3.5 Turbo) von Open AI erhielt anschließend die Aufgabe, ein Editorial anhand der Liste und teils ausformulierter Sätze zu verfassen. Der Text in der rechten Spalte, der mit minimalem Aufwand zustande kam, bricht unvermutet nach Erreichen der vorgegebenen Anzahl an Zeichen ab.

Die Bedeutung von Künstlicher Intelligenz (KI) und Datenwissenschaften in der Forschung nimmt stetig zu. Daher ist es kein Zufall, dass das entdeckt nun den Schwerpunkt auf dieses Thema setzt. Ein Grund dafür ist die Übernahme der Leitung des HZDR-Dateninstituts, dem Center for Advanced Systems Understanding (CASUS), durch den Experten für rechnergestützte Wissenschaften, Prof. Thomas Kühne. Das CASUS wurde vor knapp vier Jahren in Görlitz gegründet und hat bereits beachtliche Erfolge vorzuweisen. Das Institut ist stark gewachsen und muss nun einen weiteren Standort für seine Mitarbeiter anmieten. Dies verdeutlicht den wachsenden Einfluss von KI und Datenwissenschaften in der Forschung.

Ein Bereich, in dem die digitale Transformation bereits große Fortschritte gemacht hat, ist die Medizin. Hier entwirft die Informatikerin Stefanie Speidel vom Nationalen Centrum für Tumorerkrankungen Dresden echtzeitfähige Algorithmen für den OP-Saal. Durch den Einsatz von KI können die Chancen auf erfolgreiche Operationen erhöht und die Patientensicherheit verbessert werden. Auch in der Rohstoffsuche in entlegenen Gebieten spielen KI-Methoden eine wichtige Rolle. Wissenschaftler nutzen hier Methoden des Maschinellen Lernens. Dies ermöglicht eine effizientere und genauere Suche nach Rohstoffen, was wiederum die Ressourcengewinnung und -nutzung nachhaltiger gestaltet.

Es ist wichtig zu betonen, dass KI-Methoden zwar Fachgrenzen überwinden und die Forschung beschleunigen können, sie jedoch die Menschen weder im OP-Saal noch in der Wissenschaft ersetzen. Die menschliche Expertise und das kritische Denken bleiben un...

➤ <https://chatgptx.de/>



Inhalt

34

Titel

KÜNSTLICHE INTELLIGENZ (KI)

Schubkraft für die Forschung

HINTERGRUND

09 KI für die Krebschirurgie

INFOGRAFIK

14 Digitale Brücken vom Kleinsten zum Größten

PROJEKTE

18 Bessere Tumorthérapien dank lernfähiger Algorithmen

PORTRÄT

20 Mit KI-Brille in die Sonne blicken

TRANSFER

23 Wo die Jugend hackt

DATA SCIENTISTS IM GESPRÄCH

24 Teilchenbeschleuniger, Planeten und digitale Zwillinge

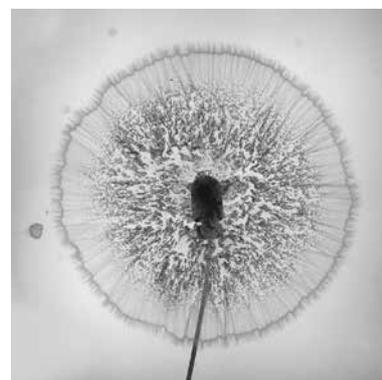
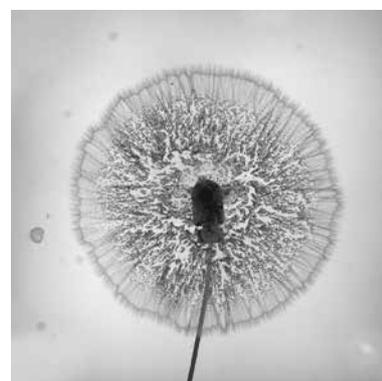
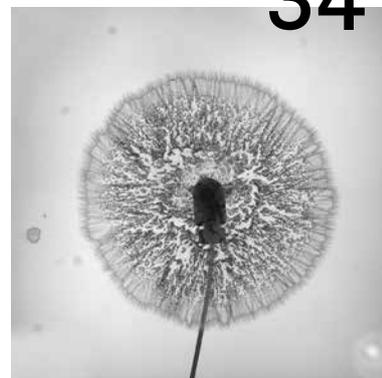
Forschung

28 Unverzichtbar für die Technologien von heute und morgen

Eine große Studie zu Europium ersetzt fehlerhafte Daten aus der Fachliteratur durch solides Wissen – für umweltfreundlicheren Bergbau und höhere Recycling-Quoten.

34 Schwerelos strömend – Datenschätze aus dem All

Vieles kann schiefgehen, wenn Experimente per Höhenforschungsrakete in die Schwerelosigkeit geschossen werden.



Rubriken

- 02 Wie wir forschen
- 04 Editorial
- 06 Woran wir forschen
- 32 Wo wir arbeiten
- 38 Nachrichten
- 40 Impressum
- 41 Die Welt von morgen

Extrem kalt und dennoch flüssig

In einem Magneten „frieren“ die magnetischen Momente, die Spins, in wohlgeordneten oder glasartigen Strukturen ein. Doch es gibt Ausnahmen: Vergleichbar zu Wasser, das einfach nicht gefrieren will, egal wie kalt es ist, bleiben die Spins in einem besonders reinen Kristall aus Zirkonium, Sauerstoff und Praseodym „flüssig“. Und das selbst bei 20 Millikelvin, also einem fünfzigstel Grad oberhalb des absoluten Temperatur-Nullpunkts, wie Experimente einer internationalen Arbeitsgruppe unter Beteiligung des HZDR gezeigt haben. Dass das Material auch im Magnetfeld seinem exotischen Verhalten treu bleibt, werten die Fachleute aus Japan, USA, Indien und Dresden als Beweis für die Existenz einer Quanten-Flüssigkeit. Der neue Werkstoff könnte als Modellsystem für die Entwicklung hochempfindlicher Quanten-Sensoren taugen, mit denen sich zum Beispiel Magnetfelder oder Temperaturen ungleich genauer registrieren lassen als mit konventionellen Messfühlern.

Publikation: N. Tang et al., Nature Physics 2022 (DOI: [10.1038/s41567-022-01816-4](https://doi.org/10.1038/s41567-022-01816-4))

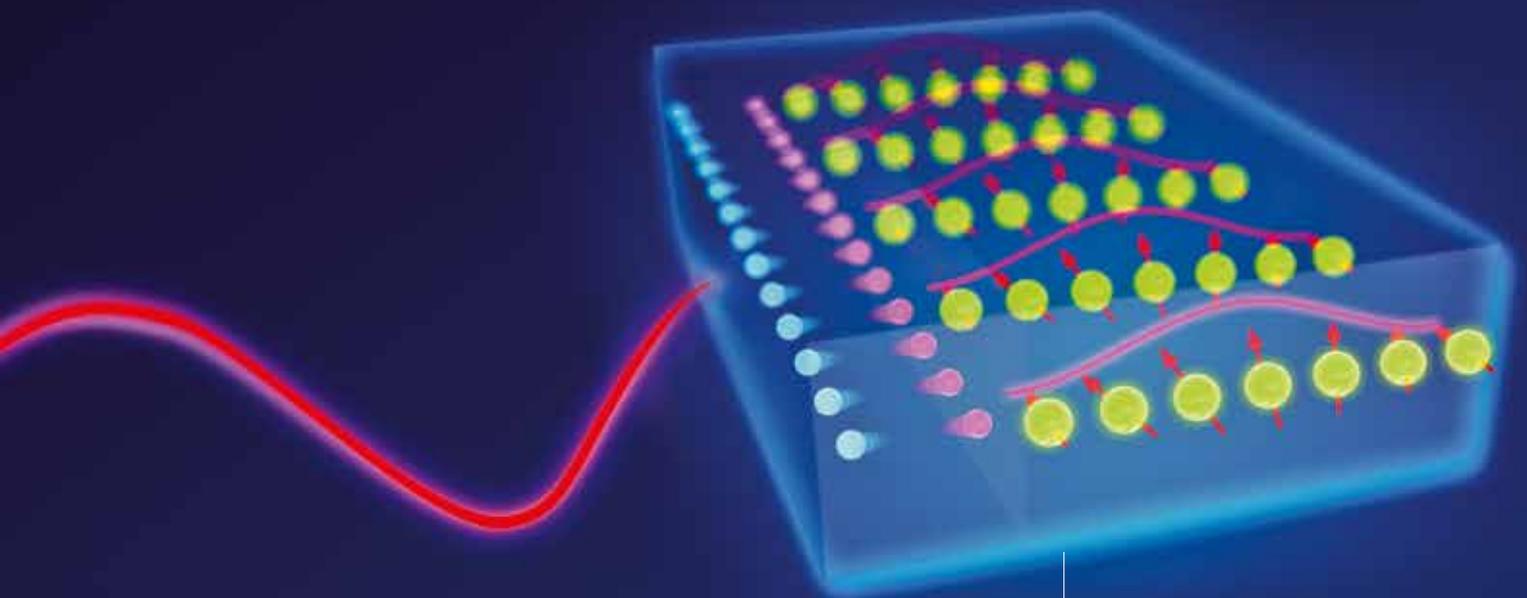
Hochzeit zwischen zwei Welten

Bislang galt eine Kopplung als unmöglich: Zu unterschiedlich schnell bewegen sich Spin- und Lichtwellen im Terahertz-Bereich. Diese für den Menschen unbedenkliche Strahlung wird heute an vielen Flughäfen für Körperscans eingesetzt. Die Terahertz-Technologie ist aber vor allem für eine neuartige und ultraschnelle Datenübertragung und -verarbeitung von Bedeutung. Auch Spin-Wellen lassen sich als Informationsträger nutzen. Ihr Vorteil: Da der Spin – also das magnetische Moment der Elektronen – im Material auf seinem Platz bleibt, gibt es, anders als in gängigen Computerchips, keine Wärmeverluste durch Ströme.

Mit einem Magnet-Sandwich gelang es einem internationalen Forschungsteam unter Leitung des HZDR, Signale aus der Welt des Lichts in die Welt der Spins zu „übersetzen“. In ihren Experimenten lenkten die Fachleute intensive Terahertz-Pulse auf eine Nickel-Eisen-Legierung, die sie zuvor in hauchdünne metallische Schichten aus Tantal und Platin eingepackt hatten. Bis sie jedoch die für Spin-Wellen charakteristischen Schwingungen messen und erklären konnten, waren langwierige Versuche mit unterschiedlichen Materialkomponenten und äußeren Magnetfeldern nötig.

Das stark vereinfachte Ergebnis: Terahertz-Licht beschleunigt freie Elektronen im Schwermetall. Durch Quanteneffekte entstehen Spin-Ströme, die wiederum Spin-Wellen an den Grenzflächen zwischen Schwermetall und Ferromagnet anstoßen. Das neue Probensystem dürfte sich prinzipiell recht einfach in Schaltkreise integrieren lassen.

Publikation: R. Salikhov et al., Nature Physics 2023 (DOI: 10.1038/s41567-022-01908-1)



Eine Terahertz-Lichtwelle (von links) wird in einem Magnet-Sandwich aus dünnen Metallschichten in eine Spin-Welle umgewandelt.

Schwerpunkt

Künstliche Intelligenz (KI): Schubkraft für die Forschung

Kunstwerk aus dem Exascale-Computer

Infografik: Visualisierung von Datenströmen

SEITE 02

KI für die Krebschirurgie

Hintergrund: KI-Assistenten weisen den

Weg zum Tumor

SEITE 09

Digitale Brücken vom Kleinsten zum Größten

Infografik: KI-Forschung zielt auf themen- und
skalenübergreifende Modelle und Lösungen

SEITE 14

Bessere Tumorthérapien dank lernfähiger Algorithmen

Projekte: Neue KI-Tools verknüpfen Daten
aus Kliniken und Praxen

SEITE 18

Mit KI-Brille in die Sonne blicken

Porträt: Über Zufallszahlen, KI und
Quantenphysik

SEITE 20

Wo die Jugend hackt

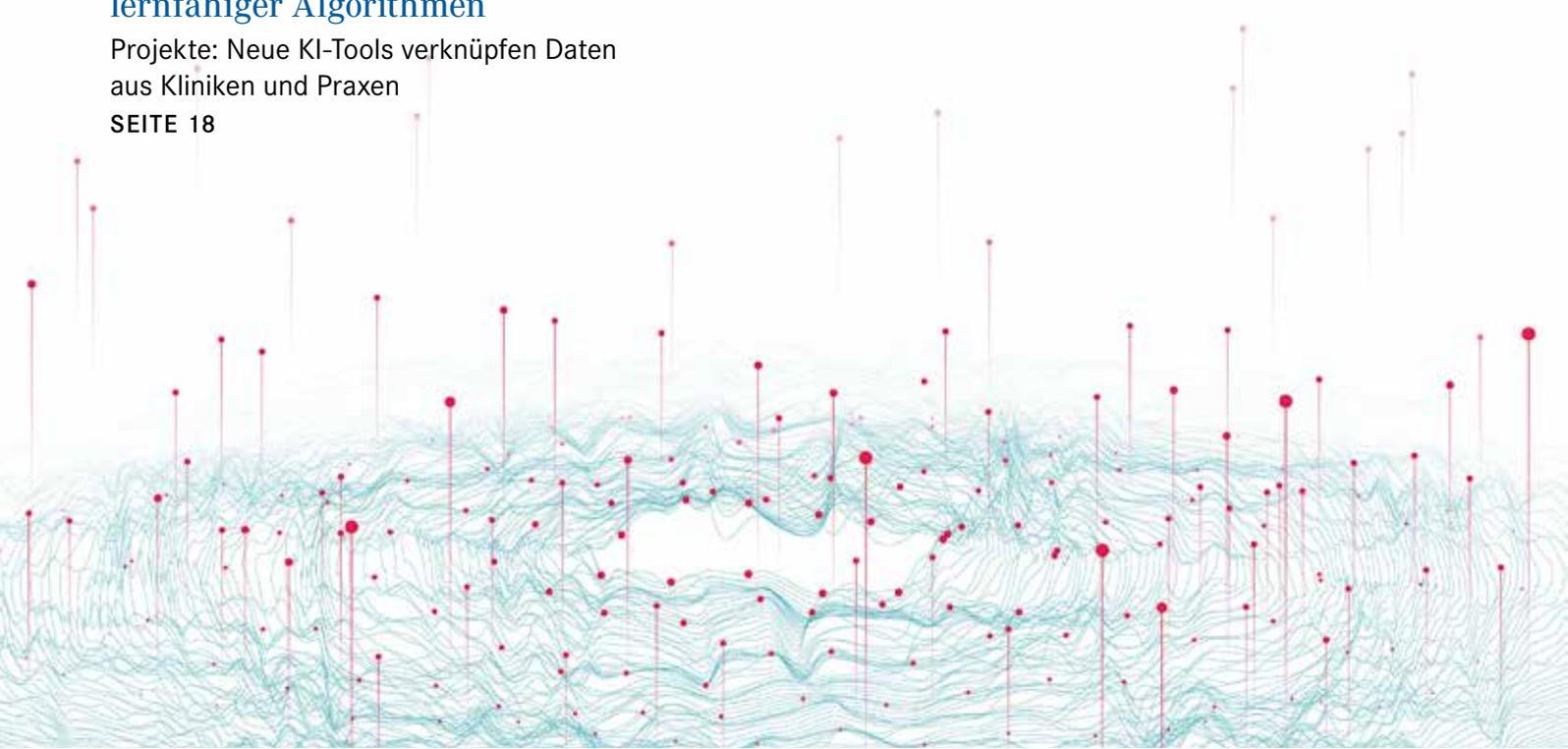
Transfer: Den Einsatz von KI erproben

SEITE 23

Teilchenbeschleuniger, Planeten und digitale Zwillinge

Im Gespräch: Was genau macht
ein Data Scientist?

SEITE 24





Damit das Zusammenspiel von Mensch und Maschine im OP reibungslos funktioniert, tauscht sich die Informatikerin Stefanie Speidel regelmäßig mit Experten wie Jürgen Weitz, Chirurg und Klinikdirektor am Universitätsklinikum Dresden, aus.

KI für die Krebschirurgie

Die Arbeit im OP-Saal ist fordernd und überaus komplex. Oft entscheiden wenige Millimeter darüber, ob ein Tumor komplett entfernt wird oder wichtige Nerven und Gefäße verletzt werden. Das Nationale Centrum für Tumorerkrankungen Dresden (NCT/UCC) arbeitet an intelligenten Assistenzsystemen, die die Chirurgen bei minimalinvasiven und robotergestützten Eingriffen unterstützen. Das Werkzeug: echtzeitfähige Algorithmen der Künstlichen Intelligenz (KI), basierend auf den Daten aus unzähligen Eingriffen.



Lernfähige KI-Algorithmen sollen künftig die roboterassistierte Führung der Operationskamera ermöglichen.

In ihrem Labor geht Stefanie Speidel auf einen Torso zu, der reglos auf einem Metalltisch liegt. Sie hebt den Plastikdeckel des Brustkorbs an und zeigt auf Magen, Milz und Leber. „Es ist ein Phantom, die Organe bestehen aus Silikon“, beschreibt die Dresdner Informatikprofessorin. „Dieser künstliche Torso dient dazu, neue KI-Algorithmen für intelligente Assistenzen in der Krebschirurgie zu testen.“

Dann deutet sie auf zwei Roboterarme direkt neben dem Phantom. „Die sind nicht für den OP-Saal bestimmt, eignen sich aber gut für unsere Tests.“ Die beiden Roboterarme können kamerabestückte Endoskope – schlauchartige, chirurgische Geräte – in den Plastiktorso einführen und sie dort, gesteuert von lernfähigen Algorithmen, zielsicher navigieren. Auf Knopfdruck kommt sogar Bewegung ins Spiel: „Wir haben hier eine Erweiterung installiert, die zum Beispiel die Atmung simulieren kann“, sagt Speidel. „Dadurch werden unsere Tests noch realistischer.“

Zielsichere Kamerafahrt durch den Körper

Mit dem Organ-Dummy erprobt Speidels Team KI-Programme, die bei minimalinvasiven Krebsoperationen automatisch die Kameraführung übernehmen sollen. Während dieser Eingriffe wird ein Endoskop durch einen Schnitt eingeführt, der nur wenig größer ist als ein Schlüsselloch. Damit sich die Ärztinnen orientieren können, steckt am Kopf des Schlauchs eine

Kamera, die in Echtzeit Videoaufnahmen aus dem Körperinneren liefert. Bislang werden Endoskop und Kamera von menschlichem Personal bedient.

Für jeden Eingriff müssen sich die Operateure, ausgehend von zuvor erstellten Bildaufnahmen, möglichst genau vorstellen, wo im Gewebe der Tumor liegt und an welchen Stellen sich empfindliche Gefäße befinden. Auch hierbei sollen künftig intelligente Systeme wichtige Hilfestellungen leisten. „Ähnlich wie bei einem Navigationssystem im Auto sollen KI-gestützte Assistenzsysteme den Arzt zielsicher und ohne Umwege zum Tumor leiten. Und das natürlich in Echtzeit“, berichtet Speidel. „Die Entscheidung trifft aber zu jedem Zeitpunkt der Mensch. Der Computer kann lediglich unterstützen und ein bestimmtes Vorgehen empfehlen.“

KI-Assistenten weisen den Weg zum Tumor

Ausgangspunkt sind CT- oder MRT-Scans, die vor dem Eingriff aufgenommen werden. Daraus wird eine Art 3D-Karte erstellt: Unter anderem zeigt sie dreidimensionale Darstellungen von Tumor und Gefäßsystem. Mithilfe dieser Karte und anhand der Livebilder soll die Software während des minimalinvasiven Eingriffs erkennen, in welcher Phase die OP gerade steckt – und automatisch die passenden Informationen einblenden: Wo genau liegt der Tumor, wo sollten die Schnitte angesetzt werden? Und welche Gefäße sollten auf keinen Fall verletzt werden?

Organe im Bauchraum bieten dabei eine besondere Schwierigkeit: Durch Atmung, Herzschlag und auch die Berührung mit dem Endoskop ändert zum Beispiel die Leber ständig ihre Lage und auch ihre Form – was die automatische Navigation erschwert. „Deshalb brauchen wir eine elastische Karte, die sich automatisch der Körperbewegung anpasst“, erläutert Speidel. Um das zu bewerkstelligen, erstellt sich die Software ein 3D-Modell aus dem Körperinneren.

Wie sich ein Gewebe durch Atmung und Herzschlag verformt, das sollen die KI-Algorithmen buchstäblich lernen – und diese erlernte Fähigkeit auf einen konkreten Eingriff übertragen. Damit das klappt, benötigt die Forschungsgruppe vor allem eines: möglichst viele und hochwertige Daten für das Training der Algorithmen. Dazu dienen Videomitschnitte von endoskopischen Eingriffen, die oft mehrere Stunden dauern. Diese Daten müssen Fachleute dann sichten und markieren. „Nur so lässt sich eine KI sinnvoll trainieren“, betont Speidel.

Die Datenmengen, die dabei zusammenkommen, sind erheblich: Ein Datensatz besteht zumeist aus 20 bis 100 Videos, von denen manche ein paar Gigabyte, andere bis zu 50 Gigabyte umfassen. Gespeichert werden die Daten im Netzwerk des NCT/UCC und im Rechnercluster der Arbeitsgruppe verarbeitet. Dieser umfasst 16 Hochleistungsprozessoren und wird derzeit um 30 Prozessoren erweitert.

Medizinroboter in echter OP-Umgebung

Getestet werden die KI-Assistenten unter anderem im Experimental-OP-Saal. „Um realistische Tests machen zu können, entspricht er einem richtigen Operationssaal“, erläutert die Wissenschaftlerin. Sie zeigt auf eine Patientenliege mitsamt OP-Lampe und Rollwagen fürs Chirurgie-Besteck. Daneben steht ein Medizinroboter der neuesten Generation – ein weißer, mannshoher Apparat, bestückt mit vier mechanischen Armen. Er wird von wichtigen Konsolen bedient, an denen Operateure hochkonzentriert in Okulare blicken, um die Maschine anhand der Livebilder des Endoskops präzise zu steuern.

Die Ausbildung angehender Chirurginnen könnte ein weiteres Einsatzfeld sein. Die nämlich trainieren die Endoskop-Eingriffe an einem Phantom ähnlich wie in Speidels Labor. Die Idee:

Würde man den Dummy mit einem sensor- und KI-gestützten Trainingssystem bestücken, soll dieses die Aktionen der Übenden in Echtzeit analysieren und auch bewerten. Dadurch soll dem medizinischen Nachwuchs eine rasche und genaue Rückmeldung zuteil werden – die KI als Sparringspartner.

Um herauszufinden, wie sich das Ergebnis einer KI so darstellen lässt, dass es für das medizinische Personal intuitiv verständlich und zugleich hinreichend genau ist, hat sich die Informatikerin mit Fachleuten für technisches Design im Exzellenzcluster CeTI, dem „Zentrum für taktiles Internet mit Mensch-Maschine-Interaktion“ der TU Dresden, zusammengetan. „Der Standort Dresden ist optimal für solche Projekte und für unsere Forschung“, schwärmt Stefanie Speidel. „Es gibt eine exzellente TU, ein hervorragendes Uniklinikum – und das leistungsstarke HZDR, mit dem wir zum Beispiel beim Thema Bildgebung kooperieren.“

Einer der Träger des NCT/UCC ist – neben der Dresdner Hochschulmedizin und dem Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf – das Deutsche Krebsforschungszentrum in Heidelberg. Diese umfassende Infrastruktur ist auch für ein Projekt hilfreich, das bei der Planung eines Eingriffs ansetzt: Speidels Arbeitsgruppe entwickelt eine KI-App für eine Komplikationsvorhersage bei minimalinvasiven OPs.

Algorithmus errechnet Wahrscheinlichkeit für Komplikationen

„Ob ein Patient ein erhöhtes Risiko für eine Komplikation hat, soll unser System anhand von Bilddaten, Laborwerten und Informationen über Vorerkrankungen vorhersagen,“ erläutert die Forscherin. „Das kann zum Beispiel eine Fistel an der Bauchspeicheldrüse sein, die sich als Folge des Eingriffs bildet.“ Andere unerwünschte Nachwirkungen sind Blutungen sowie Nähte an Speiseröhre oder Darm, die nach der OP wieder aufgehen.

Manche Menschen zeigen ein besonders hohes Risiko für derartige Komplikationen. Bei ihnen muss die Operationsstrategie angepasst werden, außerdem sollten sie nach dem Eingriff auf der Intensivstation auf besondere Weise überwacht werden. Bislang beruht die Einschätzung, wie hoch eine Komplikations-



„Ähnlich wie bei einem Navigationssystem im Auto sollen KI-gestützte Assistenzsysteme die Ärztin oder den Arzt zielsicher und ohne Umwege zum Tumor leiten.“

wahrscheinlichkeit ist, auf der Expertise des Arztes. „Wir versuchen, diese Erfahrungen zu quantifizieren und auf eine Software zu übertragen“, erklärt Speidel. „Als Ergebnis soll unsere App zuverlässig melden können, wenn ein erhöhtes Risiko besteht.“

Daten aus vielen Kliniken

Die wesentliche Herausforderung für das Dresdner Forschungsteam liegt darin, viele verlässliche Daten für das KI-Training zu beschaffen – und zwar aus mehreren Kliniken, um eine gewisse Varianz abbilden zu können. Basis sind die Videos von Endoskop-Eingriffen. Diese müssen erfahrene Chirurgen sichten, klassifizieren und „beschriften“: Welche Naht beispielsweise ist während des mehrstündigen Eingriffs nicht ganz optimal geraten? Außerdem müssen sie erkennen, welche Merkmale und Auffälligkeiten einen Zusammenhang mit späteren Komplikationen zeigen.

Ein Problem: „Ärzte haben im klinischen Alltag oft nur wenig Zeit, solche Daten zu kennzeichnen“, schildert Stefanie Speidel. „Deshalb versuchen wir, mit wenigen hundert Einzelbildern pro Klasse auszukommen und arbeiten an Strategien, um zusätzlich synthetische Trainingsdaten zu erzeugen, die wie

echte Daten aussehen.“ Damit das klappt, leitet ihr Team die simulierten Datensätze aus echten Bildaufnahmen ab. Auch seltene Komplikationen, für die schlicht keine richtigen Bilder vorliegen, lassen sich nun durchspielen.

Und stößt die Informatikerin auf Vorbehalte gegenüber der Künstlichen Intelligenz oder aber auf übertriebene Erwartungen? „Zum Teil schon“, antwortet Stefanie Speidel. „Dann weise ich darauf hin, dass man eine KI ja nicht mit der menschlichen Intelligenz vergleichen kann.“ Stattdessen bringt ihr Team den lernfähigen Algorithmen ganz spezifische, eng umrissene Aufgaben bei. „Uns geht es eigentlich immer darum, die Fachleute bei der Arbeit zu unterstützen und damit zu entlasten“, betont Speidel. „Und davon werden am Ende auch die Patientinnen profitieren, weil das medizinische Personal einfach mehr Zeit für sie hat.“



Intelligente Hilfe für den Chirurgen:
Ein Assistenzsystem blendet die optimale Schnittlinie sowie Ziel- und Risikostrukturen ein.



Über eine Datenbrille erhält die Chirurgin zum richtigen Zeitpunkt während der OP wichtige Hilfestellungen.

Publikationen:

M. Carstens et al.: The Dresden surgical anatomy dataset for abdominal organ segmentation in surgical data science. *Scientific Data*, 2023 (DOI: 10.1038/s41597-022-01719-2)

L. Maier-Hein et al.: Surgical data science – from concepts toward clinical translation. *Medical Image Analysis*, 2022 (DOI: 10.1016/j.media.2021.102306)

M. Pfeiffer et al.: Learning soft tissue behavior of organs for surgical navigation with convolutional neural networks. *International Journal of Computer Assisted Radiology and Surgery*, 2019 (DOI: 10.1007/s11548-019-01965-7) ┘

Kontakt

_Nationales Centrum für Tumorerkrankungen Dresden (NCT/UCC), gemeinsam getragen durch das Deutsche Krebsforschungszentrum, das Universitätsklinikum Carl Gustav Carus Dresden, die Medizinische Fakultät der TU Dresden und das HZDR

Stefanie Speidel

Professorin für Translationale Chirurgische Onkologie
stefanie.speidel@nct-dresden.de

Digitale Brücken vom Kleinsten zum Größten

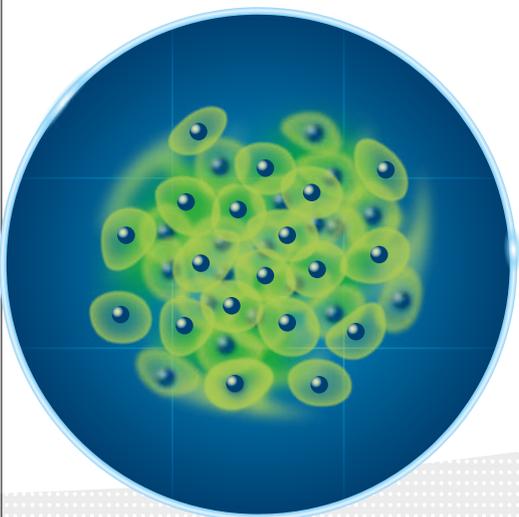
Welche Bedingungen herrschen im Inneren von Planeten? Wie kann man Protonen kontrolliert beschleunigen? Und wie lenkt man die geladenen Teilchen gezielt in den Tumor? Datenwissenschaftler und Forscherinnen unterschiedlicher Fachgebiete entwerfen am HZDR Modelle der Künstlichen Intelligenz und trainieren diese auf der Basis themenübergreifender und immer größerer Datensätze. So gelangen sie zu umfassenden Lösungsansätzen und damit zu neuen Erkenntnissen und Anwendungen.

Text . Christine Zimmermann

Grafik . Blaurock Markenkommunikation GmbH

Zukunftsmaterialien dank beschleunigter Simulationen

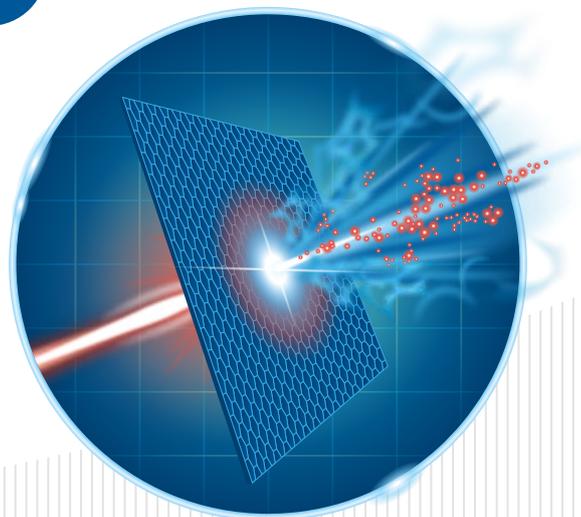
Für jede nur denkbare Materialkombination die Eigenschaften am Computer zu berechnen statt zeitraubende Experimente im Labor durchzuführen – davon dürften neue Informations- und Kommunikationstechnologien ebenso profitieren wie die Energiewende oder die Arzneimittelentwicklung. Möglich wird dies durch das Software-Paket MALA (Materials Learning Algorithms), das Methoden des Deep Learning mit physikalischen Ansätzen kombiniert. Ausgangspunkt für das maschinelle Lernmodell: die im Raum angeordneten Atome mit ihren jeweiligen Nachbarn. Entsprechend trainiert, kann MALA die elektronische Struktur eines Materials vorhersagen – und das für mehr als hunderttausend Atome und in beispielloser Geschwindigkeit.



Teilchen per Licht beschleunigen

Die Technologie steckt noch in der Entwicklung. Trifft der Lichtblitz eines Hochleistungslasers auf Materie, kommt es zu einer Explosion. Weil dabei eine Unmenge an Prozessen auf unterschiedlichen Größenskalen quasi gleichzeitig abläuft, können Forscher diese weder im Experiment direkt messen noch in der Theorie umfassend beschreiben. Deshalb entwickeln sie äußerst leistungsfähige Computersimulationen und digitale Zwillinge der Experimente, mit denen sich etwa die Bahn der Teilchen rekonstruieren lässt. So wollen sie Lasersysteme wie DRACO am HZDR zu immer höheren Intensitäten treiben und gleichzeitig die Qualität der erzeugten Protonenpulse perfekt kontrollieren.

µm





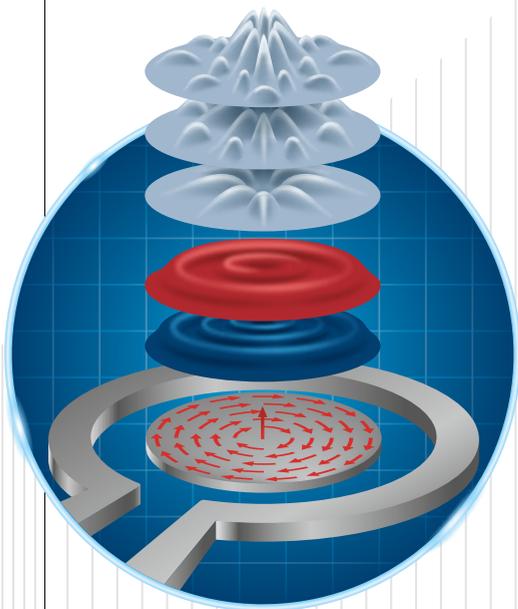
Extreme Zustände vorhersagen

Tausende Exoplaneten hat das Kepler-Weltraumteleskop der NASA in weit entfernten Galaxien aufgespürt. Wie groß ein solcher Planet ist, ob die Temperatur auf seiner Oberfläche Leben zulässt und aus welchen chemischen Elementen er besteht, können Fachleute durch Beobachtung feststellen. Viele Fragen – zum Beispiel zur inneren Struktur oder zur Existenz eines Magnetfelds – bleiben offen. Data Scientists in Görlitz entwickeln derzeit einen digitalen Zwilling, der auf Basis der verfügbaren Daten sowie unterschiedlicher Wahrscheinlichkeitsannahmen zum besseren Verständnis von Exoplaneten beitragen soll. So wollen sie wichtige Wissenslücken über fremde Planetensysteme schließen.

Gehirninspiriertes Computing

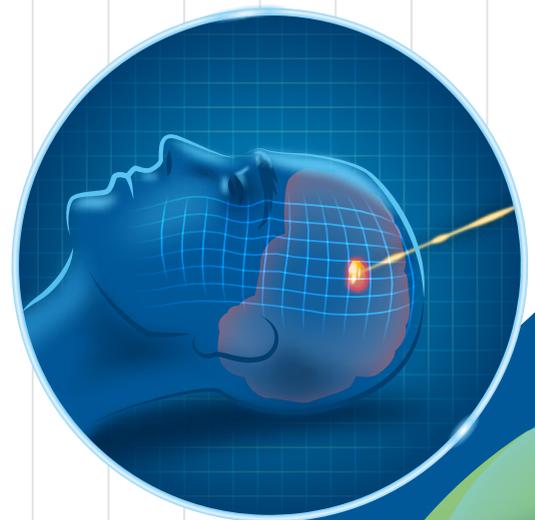
Daten von Abstands-, Bewegungs- oder Geschwindigkeits-Sensoren blitzschnell erfassen und in exakter zeitlicher Reihenfolge auswerten, das müssen autonome Fahrsysteme zukünftig leisten. Forscherinnen arbeiten gemeinsam mit Industriepartnern an einer Hardware, die in der Lage sein soll, analog empfangene Signale direkt in Echtzeit zu verarbeiten und Muster zu erkennen. Dafür entwickeln sie mikrometerkleine, magnetische Scheiben. Regt man diese mit elektrischen Pulsen im Mikrowellenbereich an, entstehen Wellen im Magneten. Die Quantenteilchen dieser Wellen, die Magnonen, können in viele weitere Magnonen zerfallen. Ähnlich wie Neuronen im Gehirn müssen die Teilchen dabei eine Aktivierungsschwelle überwinden.

μm



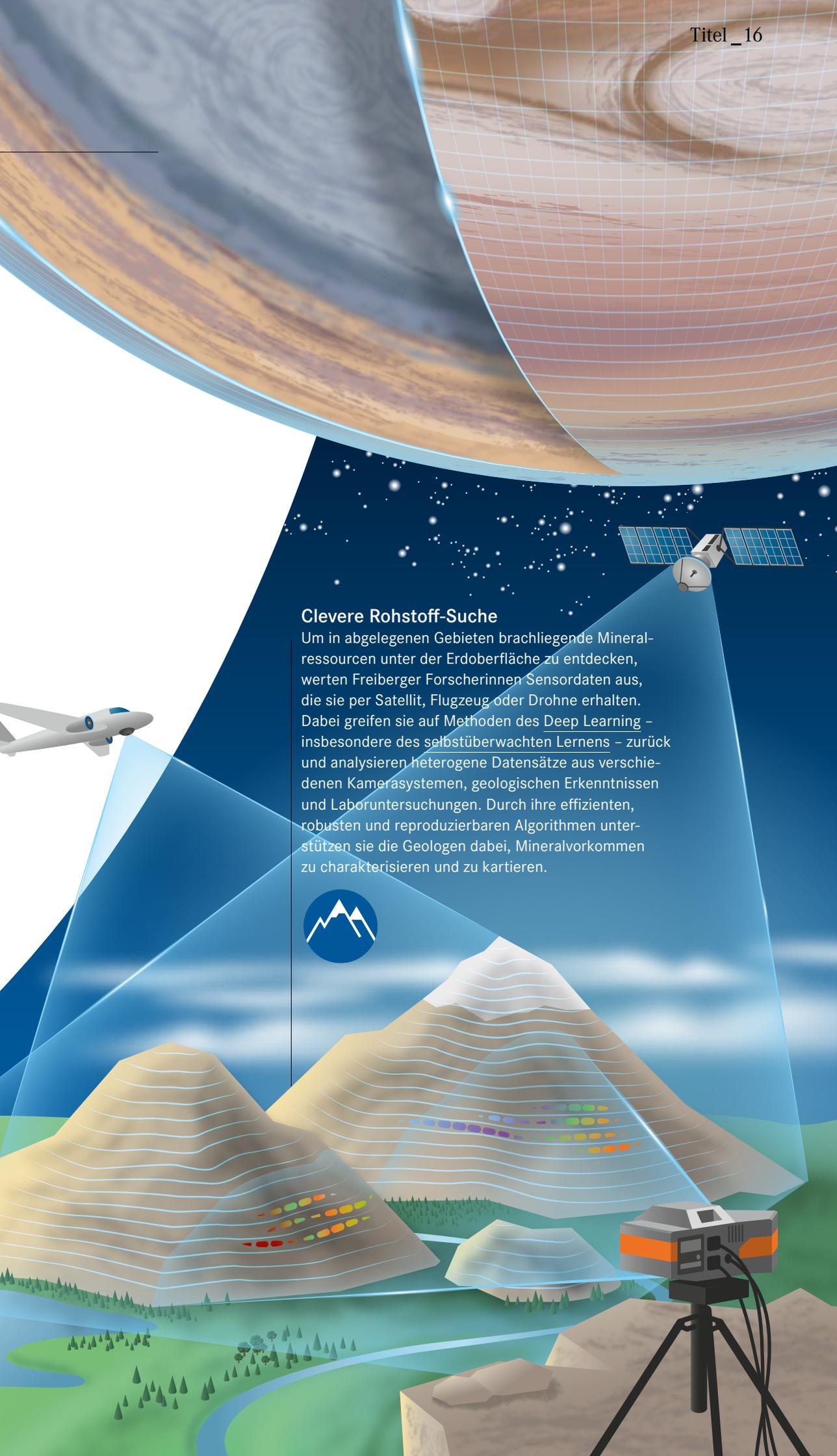
Krebsbestrahlung mit höchster Präzision

Protonenstrahlen zerstören Tumore sehr wirksam und schonen gleichzeitig gesundes Gewebe. Die noch recht junge Therapieform kann jedoch nicht genau genug auf Bewegungen während der Behandlung oder anatomische Veränderungen im Verlauf der meist mehrwöchigen Therapie reagieren. Deshalb entwickeln Dresdner Wissenschaftler einen vollautomatischen und von KI-Algorithmen unterstützten Rückkopplungskreis für die kontinuierliche Überwachung der Bestrahlung. Damit der Protonenstrahl sofort auf sich ändernde Bedingungen angepasst werden kann.



Clevere Rohstoff-Suche

Um in abgelegenen Gebieten brachliegende Mineralressourcen unter der Erdoberfläche zu entdecken, werten Freiburger Forscherinnen Sensordaten aus, die sie per Satellit, Flugzeug oder Drohne erhalten. Dabei greifen sie auf Methoden des Deep Learning – insbesondere des selbstüberwachten Lernens – zurück und analysieren heterogene Datensätze aus verschiedenen Kamerasystemen, geologischen Erkenntnissen und Laboruntersuchungen. Durch ihre effizienten, robusten und reproduzierbaren Algorithmen unterstützen sie die Geologen dabei, Mineralvorkommen zu charakterisieren und zu kartieren.



Ein **digitaler Zwilling** ist ein möglichst umfassendes digitales Abbild eines komplexen Systems aus der realen Welt. Er kann alle physikalischen Prozesse innerhalb des Systems überwachen, diagnostizieren oder vorhersagen. Dazu werden in einem digitalen Zwilling folgende Elemente verknüpft:

- Datenströme aus unterschiedlichsten Messungen und Simulationen
- Hochleistungsrechnen (High-Performance Computing, HPC) zur Erzeugung von akkuraten Simulationsdaten
- Mathematische und numerische Modelle von Subsystemen über Zeit- und Längenskalen hinweg
- Datengestützte Ersatzmodelle (Surrogat-Modelle) und maschinelle Lernmethoden für die Echtzeit-Analyse und -Vorhersage
- Interaktive und intelligente Visualisierungsmethoden

Maschinelles Lernen (ML) ist ein Teilgebiet der Künstlichen Intelligenz, das sich mit der Entwicklung von Algorithmen und statistischen Modellen befasst. Damit können Computer aus Daten lernen, ohne dass sie explizit dafür programmiert werden. ML konzentriert sich darauf, Muster und Beziehungen in den Daten zu identifizieren. So können Maschinen Vorhersagen machen, Entscheidungen treffen und Erkenntnisse gewinnen.

Ein Untergebiet des Maschinellen Lernens ist das **Deep Learning**, das künstliche neuronale Netze einsetzt, um komplexe Probleme zu lösen. Diese Netzwerke werden trainiert, um hierarchische Repräsentationen von Daten automatisch zu erlernen und dadurch komplexe Muster und Merkmale aus den Eingabedaten zu extrahieren. Der Unterschied zwischen Maschinellern Lernen und Deep Learning: Während Ersteres eine breitere Palette von Techniken umfasst – einschließlich Entscheidungsbäumen, Support Vector Machines und Clustering-Algorithmen –, bezieht sich Deep Learning speziell auf den Einsatz tiefer neuronaler Netzwerke mit mehreren Schichten. So lassen sich komplexe, unstrukturierte und große Datenmengen zum Beispiel für die Text- und Bilderkennung erschließen.

Auch das **selbstüberwachte Lernen** ist ein Teilaspekt des Maschinellen Lernens. Diese quasi autonome Lernform nutzt neuronale Netze, die mit einer einfachen Voraufgabe trainiert wurden. Anschließend ist das Lernmodul imstande, ähnlich gelagerte, aber weitaus komplexere Fragestellungen zu klassifizieren und zu lösen. Selbstüberwachtes Lernen zeichnet sich dadurch aus, dass es unabhängig von zuvor notierten Daten agieren kann. Es findet bereits breite Anwendung in der Bild-, Video- und Audioverarbeitung. ┘

Bessere Tumorthérapien dank lernfähiger Algorithmen

Röntgenaufnahmen, Blutproben, DNA-Tests – tagtäglich erheben Kliniken und Praxen enorme Mengen an Daten. Darin steckt ein verborgener Schatz: wertvolle Informationen. Künstliche Intelligenz (KI) kann diese Daten miteinander verknüpfen und versteckte Muster aufspüren. Das HZDR-Institut CASUS für datenintensive Systemforschung schafft wichtige Grundlagen für KI-Algorithmen, die die Diagnose und Behandlung von Tumoren merklich verbessern sollen.

__Text . Frank Grotelüschen

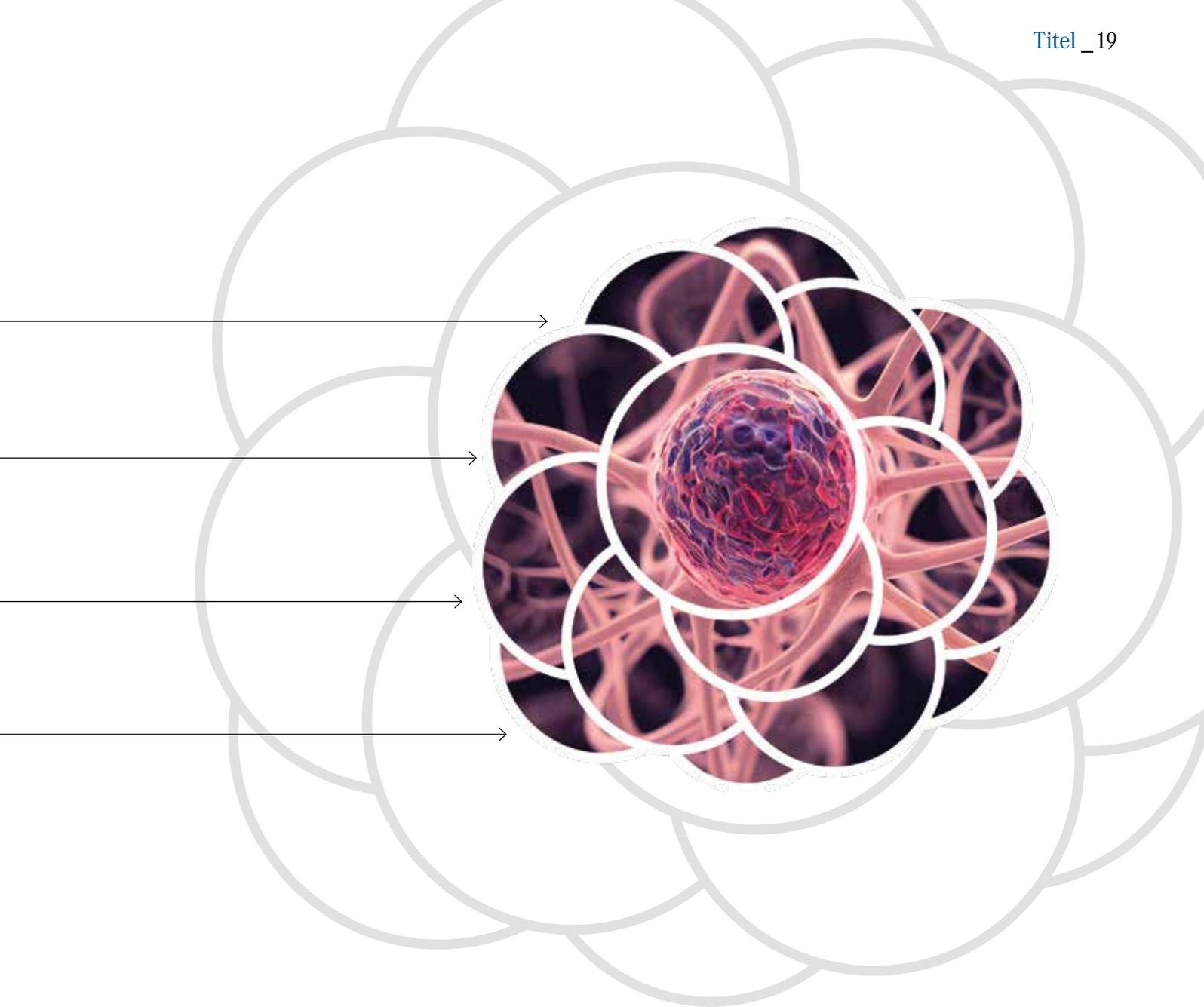
Zwar wird die Krebsmedizin immer effektiver, sie kann heute mehr Tumore erfolgreich behandeln als früher. Dennoch gibt es Raum für Verbesserungen, etwa bei der Entscheidung, ob ein Geschwür operiert werden soll oder nicht. „Bei schweren Fällen ist das oft eine Abwägung zwischen Überlebenswahrscheinlichkeit und Lebensqualität“, erläutert Michael Bussmann, der als Gründungsbeauftragter am erfolgreichen Aufbau des CASUS-Instituts mitgewirkt hat. „Hier könnten KI-Programme zum Beispiel Hinweise geben, zu welcher Gruppe ein Prostatakrebs-Patient gehört und ob es womöglich für diese Gruppe günstiger ist, mit dem Eingriff noch zu warten.“ Auch die Tumor-Früherkennung dürfte profitieren, etwa indem lernfähige Algorithmen in einem CT-Scan verdächtige Muster erkennen, die dem menschlichen Auge verborgen bleiben.

Das Potenzial ist enorm. Deshalb widmen sich mehrere Initiativen der Entwicklung von verlässlichen KI-Systemen. An zwei großen europäischen Projekten ist das CASUS maßgeblich beteiligt: Das Forschungskonsortium PIONEER führt 100 Millionen Datensätze zur Prostatakrebs-Forschung zusammen und schafft dadurch eine wesentliche Voraussetzung für die Entwicklung neuer Algorithmen. Darauf aufbauend soll das Projekt OPTIMA KI-Systeme konzipieren, die die Diagnose und Behandlung von Prostata-, Brust- und Lungenkrebs verbessern.

Hürden auf dem Weg zu KI-Tools

„Bereits beim Sammeln der Daten stoßen wir immer wieder an Grenzen“, sagt Bussmann. „Oft liegen Daten in unterschiedlichen Formaten vor oder sind lückenhaft.“ Immerhin existiert bereits ein europaweiter Datenstandard namens OMOP (Observational Medical Outcomes Partnership). Durch ihn lassen sich Patientendaten in einheitlicher Form erfassen und speichern. Nichtsdestotrotz bedeutet es einigen Aufwand, die teils noch handschriftlich vorliegenden Informationen in das neue Format zu übertragen.

Ebenso wichtig ist der Datenschutz: CT-Scans und Blutwerte sind persönliche Informationen, für Übermittlung und Verarbeitung der Daten müssen hohe Sicherheitsstandards gelten. Um die zu gewährleisten, arbeiten die Forscherinnen mit Patientenorganisationen und Ethik-Kommissionen zusammen. Eines der Konzepte: Soll ein neuer Algorithmus mit MRT-Bildern trainiert werden, schickt die Klinik die Aufnahmen nicht zum Forschungszentrum, sondern der Algorithmus kommt in die Klinik, wo er getestet und optimiert wird. Dadurch verbleiben die Daten sicher auf dem Krankenhaus-Server. Zudem sollen sie intelligent anonymisiert werden, sodass möglichst viele für die Forschung relevanten Informationen erhalten bleiben.



Die Algorithmen, die das OPTIMA-Team entwickeln will, sollen später das behandelnde Personal in den Krankenhäusern unterstützen. So sind Programme in der Erprobung, die auf der Basis von Biopsiedaten analysieren können, wie stark ein Prostata-Tumor fortgeschritten ist. Ein weiteres Ziel: KI-Assistenten, die bei der Suche nach der besten Behandlung helfen und Hinweise geben, welche Therapiemethoden in ähnlich gelagerten Fällen an anderen Kliniken gute Erfolge gebracht haben.

„Solche KI-Tools sollen den Ärzten keinesfalls die Entscheidung abnehmen, sondern ihnen wertvolle Hilfestellungen und zusätzliche Informationen bieten“, betont Michael Bussmann. „In welchen Fällen kann es zum Beispiel sinnvoll sein, von einem gewohnten Behandlungsschema abzuweichen?“ Für das Personal, aber auch für die Patientinnen sollen Ergebnisse des KI-Systems gut nachvollziehbar sein. Die Software soll Informationen über die benutzten Daten anzeigen oder ähnlich gelagerte Krankheitsfälle darstellen. „Nur wenn wir die Entscheidungen einer KI einfach und gut erklären können, werden wir die Akzeptanz für dieses wertvolle Werkzeug schaffen“, meint Bussmann. „Das ist eine Herausforderung, die wir mit geeigneten Schnittstellen und Schulungen meistern wollen.“

Derzeit sind die Fachleute dabei, die bereits für Prostata-Tumore existierende Datenbank zu erweitern und um Daten über Brust- und Lungenkrebs zu ergänzen. OPTIMA soll bis 2026 laufen. Zum Projektende, so die Hoffnung, sollen die ersten praxisreifen KI-Algorithmen fertig sein. Und mit SOLACE – auf Deutsch: Trost – startete im April 2023 ein weiteres EU-Projekt mit HZDR-Beteiligung. Es hat sich die Sammlung und Auswertung von Medizindaten zum Lungenkrebs-Screening auf die Fahnen geschrieben. ┘

➤ <https://prostate-pioneer.eu>

➤ <https://www.imi.europa.eu>

Kontakt

_CASUS - Center for Advanced Systems Understanding am HZDR, gemeinsam gegründet von HZDR, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung, Max-Planck-Institut für molekulare Zellbiologie und Genetik, TU Dresden, Universität Wrocław

Dr. Michael Bussmann
m.bussmann@hzdr.de

Mit KI-Brille in die Sonne blicken

Tobias Dornheim setzt auf Zufallszahlen. Und auf Künstliche Intelligenz. Damit will er der Forschung Werkzeuge liefern, um dem Sonnenfeuer oder der ultrakalten Materie ihre Geheimnisse zu entlocken.

— Text . Kai Dürfeld

Wie genau sieht es denn eigentlich im Inneren unserer Sonne aus? Welche Temperaturen herrschen dort? Und welcher Druck? An Großforschungsanlagen versuchen Teams auf der ganzen Welt, das Universum ein wenig besser zu verstehen und dabei auch die Rätsel um die Kernfusion zu lösen. Um uns vielleicht eine saubere und unerschöpfliche Energiequelle auf die Erde zu holen. Das Zünden eines solchen Sonnenfeuers gelingt bereits – wenn auch nur für winzige Augenblicke. „Warme dichte Materie“ lautet der Fachbegriff für diesen Zustand. Doch woher weiß man, welche Bedingungen im Zentrum eines solchen Experiments genau herrschen? „Ein Thermometer kann ich da jedenfalls nicht einfach reinstecken“, sagt Tobias Dornheim und lächelt verschmitzt.

Seit 2019 arbeitet der junge Quantenphysiker am CASUS, das Institut für digitale, interdisziplinäre Systemforschung des HZDR in Görlitz. Unter der Hand wird er schon als Shootingstar gehandelt. Denn gerade einmal 32 Jahre alt, hat er bereits eines der begehrten Stipendien des Europäischen Forschungsrats erhalten. „Die rund 1,5 Millionen Euro will ich in den kommenden fünf Jahren investieren, um die Pfadintegral-Monte-Carlo-Methode deutlich effizienter zu machen“, erklärt Dornheim. Er sagt das so, als sei es das Normalste auf der Welt. Und fügt hinzu: „Monte-Carlo heißt einfach nur, dass man irgendwas mit Zufallszahlen macht. Ganz konkret beschäftigen wir uns mit Markow-Ketten-Monte-Carlo.“ In seinen Computermodellen dreht sich alles

um Schätzwerte und Fehlerbereiche. Vereinfacht ausgedrückt lassen er und sein Team in ihren Simulationen den Computer sehr viele Werte schätzen, um sich dann statistisch dem eigentlichen Wert zu nähern.

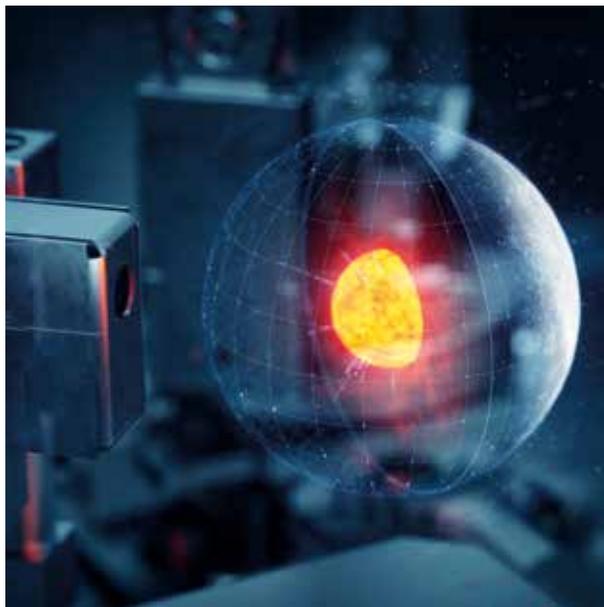
„Quantenmechanik finde ich cool“

Die Mathematik, die Tobias Dornheim täglich betreibt, findet er ganz in Ordnung. Doch so richtig schlägt sein Herz für die theoretische Physik. Quantenphysik, um genau zu sein. Die Liebe zu ihr begann schon in der Schule. „Damals auf dem

Gymnasium in Schleswig-Holstein hatte ich Physik als Leistungskurs. Und was mich da wirklich interessierte, was mich quasi angefixt hat, war Quantenmechanik“, sagt er mit einem Funkeln in den Augen. „Das Konzept von Wahrscheinlichkeitswellen finde ich faszinierend. Und bei der Quantenmechanik bin ich bis heute geblieben.“

Nach Studium und Promotion zog es ihn von der Küste direkt in die Lausitz. „Ich habe mich initiativ beworben, weil ich wusste: Hier gibt es viele Leute, die sich mit warmer dichter Materie beschäftigen“, erinnert er sich. „Daran habe ich schon während meiner Dissertation geforscht.“ Seine

Initiative war ein Glücksfall, wie sich bald herausstellen sollte. Denn er sprach mit Michael Bussmann, der gerade dabei war, das CASUS aufzubauen. Im neuen Zentrum sollte es eine Gruppe geben, die sich mit Materie unter extremen Bedingungen beschäftigt. „Für diese wollte er mich gewinnen.“ Die





■ Warme dichte Materie

Weder Festkörper noch Flüssigkeit noch Plasma: Die warme dichte Materie hat Eigenschaften aller drei Aggregatzustände. Das Attribut „warm“ bezeichnet Temperaturen zwischen 5.000 und 100 Millionen Grad Celsius. Auch der Druck ist gigantisch. Er kann gut eine Million Mal so groß sein wie der Luftdruck an der Erdoberfläche. Zu finden ist die warme dichte Materie im Inneren der großen Gasplaneten Jupiter oder Saturn, in Sternen und nun auch in Forschungslaboren. Denn sie lässt sich – zumindest für einen winzigen Augenblick – erzeugen, wenn man kurze Laserpulse mit sehr hoher Energie auf ein Metallstück feuert. Ihre Geheimnisse zu entschlüsseln, so die Hoffnung, würde unser Verständnis vom Universum erweitern und uns einen Schritt näher an die Kernfusion heranbringen.

Der Physiker Tobias Dornheim ist fasziniert von den Eigenschaften warmer dichter Materie, die im Inneren von Planeten ebenso vorkommt wie für kurze Augenblicke in den Laboren des internationalen Forschungszentrums European XFEL.

„Wir würden unsere Verfahren auch gern auf ultrakalte Atome anwenden. Die haben extrem viel spannende Physik zu bieten.“

— Tobias Dornheim, HZDR



Entscheidung fiel Tobias Dornheim nicht schwer und kurze Zeit später war er der erste wissenschaftliche Mitarbeiter am CASUS-Institut.

Zu seinen theoretischen Modellen und Simulationen sind mittlerweile auch ganz konkrete Anwendungen gekommen. Denn seine Gruppe arbeitet mit Forscherinnen der National Ignition Facility (NIF) im kalifornischen Livermore zusammen, die kürzlich wieder ein Sonnenfeuer im Labor gezündet haben. Darauf angesprochen, ist Tobias Dornheim voll in seinem Element. Er erklärt: „Um bei den Experimenten die Temperaturen in der Probe zu ermitteln, schießt man mit einem Röntgen-Laserstrahl darauf. Der dringt in die Probe ein und wird gestreut. Diese gestreute Intensität des Lasers wird dann gemessen und wir können mit unseren Berechnungen Rückschlüsse darauf ziehen, welche Bedingungen in der Probe wirklich geherrscht haben.“

Spannende Physik am absoluten Nullpunkt

Mit seinen Modellen, Formeln und Algorithmen kann Dornheim signifikante Messwerte von zufälligem Rauschen unterscheiden. Doch das kostet Rechenpower. Und die steigt exponentiell, wenn die zu messenden Temperaturen aufgrund der Quantenstatistik kleiner werden. „Das ist eines unserer größten Probleme“, sagt er. „Das Phänomen des metallischen Wasserstoffs können

wir so kaum untersuchen. Und selbst manche Regionen im Inneren von Planeten sind sehr problematisch, da die Temperaturen dort so niedrig sind, dass die Berechnung mit Pfadintegral-Monte-Carlo ewig dauern würde.“

Seine Idee war deshalb, diese Methode mit Maschinellem Lernen zu verbinden. Damit, so ist er sicher, lässt sich der Flaschenhals überwinden. Dann wäre der Weg frei, nicht nur warme dichte Materie zu berechnen und zu simulieren. „Wir würden unsere Verfahren auch gern auf ultrakalte Atome anwenden“, sagt er. „Die haben extrem viel spannende Physik zu bieten und sind ebenfalls sehr wichtig, um unsere Welt besser zu verstehen.“ ┘

Publikationen:

T. Dornheim et al.: Electronic density response of warm dense matter. *Physics of Plasmas*, 2023 (DOI: 10.1063/5.0138955)

T. Dornheim et al.: Accurate temperature diagnostics for matter under extreme conditions. *Nature Communications*, 2022 (DOI: 10.1038/s41467-022-35578-7)

M. Böhme et al.: Static electronic density response of warm dense hydrogen: ab initio path integral Monte Carlo simulations. *Physical Review Letters*, 2022 (DOI: 10.1103/PhysRevLett.129.066402)

■ Ultrakalte Atome

Man kann die Temperatur nicht unbegrenzt absenken. Am absoluten Nullpunkt, bei -273,15 Grad Celsius, ist Schluss. Kurz darüber treten Phänomene auf, die unsere Erfahrungen von Materie auf den Kopf zu stellen scheinen. Dann durchfließt elektrischer Strom einen Leiter ganz ohne den sonst allgegenwärtigen elektrischen Widerstand und das Edelgas Helium kriecht reibungsfrei über den Rand eines Becherglases. Die Teilchen können in der Welt der Quantenmechanik aber auch ihre Individualität verlieren und sich in eine einzige Materiewelle, Bose-Einstein-Kondensate genannt, verwandeln.

Kontakt

_CASUS – Center for Advanced Systems Understanding am HZDR, gemeinsam gegründet von HZDR, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung, Max-Planck-Institut für molekulare Zellbiologie und Genetik, TU Dresden, Universität Wrocław

Dr. Tobias Dornheim
t.dornheim@hzdr.de



Wo die Jugend hackt

An drei Hackerspaces in Dresden, Freiberg und Görlitz können Jugendliche seit Mitte 2021 spielerisch in Datenwelten eintauchen und kreativ den Einsatz von Künstlicher Intelligenz (KI) erproben. Das kostenlose Angebot richtet sich an alle 12- bis 18-Jährigen.

Am KI-Lab Dresden im MACHwerk der Technischen Sammlungen Dresden dreht sich alles um KI, Machine Learning und Nachhaltigkeit. Zu wöchentlichen Open-Lab-Terminen kommen Workshops in den Schulferien. Regelmäßig mit vor Ort ist Helene Hoffmann vom KI-Support-Team des HZDR, um die Jugendlichen bei der Code-Erstellung, der Programmierung von Spielen oder der Umsetzung eigener Projektideen zu unterstützen.

In Görlitz kann der Anfänger ebenso wie die Profihackerin auf Datenreise gehen, um entweder die eigene Region oder

aber ferne Welten zu erkunden. Bei der Reiseplanung erfahren alle tatkräftige Unterstützung durch Datenprofis vom HZDR und vom HZDR-Institut CASUS - Center for Advanced Systems Understanding, das in Görlitz beheimatet ist.

Das Freiburger KI-Lab bietet Jugendlichen die Möglichkeit, die Welt durch die Datenbrille besser zu verstehen und Antworten auf wichtige Fragen der Naturwissenschaften zu finden. Egal, ob dabei Hardware gebastelt, in 3D modelliert oder in Python programmiert wird, die Wissenschaftler vom Helmholtz-Institut Freiberg für Ressourcentechnologie des HZDR freuen sich über alle jungen Hackerinnen und ihre Themen.

Sächsischer Digitalpreis 2022

Das HZDR und die Technischen Sammlungen Dresden haben mit ihren Hackerspaces den 2. Platz in der Kategorie Gesellschaft gewonnen. Mit

dem Sächsischen Digitalpreis macht das Sächsische Staatsministerium für Wirtschaft, Arbeit und Verkehr auf die vielen Innovationen und Lösungsansätze im Zuge der Digitalisierung aufmerksam und ehrt herausragende Beiträge. Insgesamt waren rund 100 Bewerbungen eingegangen. Der erste Preis ging an das New Work Design Lab der Fachhochschule Dresden und der dritte an die Forschungsgruppe Wissensarchitektur der Fakultät Architektur der TU Dresden. Mit dem Preisgeld für den 2. Platz in Höhe von 15.000 Euro wollen die HZDR-Teams die technische Ausstattung der KI-Labs verbessern und den Austausch der Jugendlichen über die drei Standorte hinweg fördern. (CZ) ↵

➤ <https://jugendhackt.org/lab/>

Teilchenbeschleuniger, Planeten und digitale Zwillinge

_ Im Gespräch . Attila Cangi und Anna Willmann

_ Fragen . Gabriele Schönherr

Was haben Planeten mit Teilchenbeschleunigern zu tun? Warum muss ein Data Scientist gut kommunizieren können? Und wohin entwickeln sich die Datenwissenschaften? Zwei Data Scientists am HZDR berichten, wie Künstliche Intelligenz (KI) und Maschinelles Lernen (ML) den Forschungsalltag verändern.

Steckbrief Anna Willmann

- Doktorandin am Institut für Strahlenphysik und Helmholtz AI Local Unit, Gruppe: "Artificial Intelligence for Future Photon Sciences"
- Alter: 27 Jahre
- Hintergrund: Bachelor in angewandter Mathematik, Master in Informatik
- Data Scientist, weil sie seit ersten Arbeiten zu Simulationen in der Strömungsdynamik von der Arbeit mit (physikalischen) Daten fasziniert ist und dabei gleichzeitig an neuen KI-Methoden forschen kann
- Aktuelles Forschungsprojekt: Entwicklung eines digitalen Zwillings für Freie-Elektronen-Laser (siehe Grafik auf Seite 41)





Steckbrief Attila Cangli

- CASUS-Gruppenleiter (komm.) „Materie unter extremen Bedingungen“
- Alter: 40 Jahre
- Hintergrund: Theoretischer Physiker/Chemiker; zuletzt Staff Scientist an den Sandia National Labs, USA
- Data Scientist, weil er seit einem interdisziplinären KI-Workshop 2011 vom Potenzial der KI absolut überzeugt ist; für die Mitwirkung am CASUS aus den USA zurückgekehrt
- Aktuelle Forschungsprojekte: neues KI-Modell der elektronischen Struktur von Materie; digitaler Zwilling für das Innere eines Planeten

Was genau macht ein Data Scientist?

Cangli: Zunächst nichts anderes als viele andere Wissenschaftler. Wir forschen an offenen Fragen und nutzen dafür Daten als Werkzeug. Die Besonderheit: Wir arbeiten mit gewaltigen und oft unstrukturierten Datenmengen. Die Herausforderung ist, diese Daten mit digitalen Methoden zu strukturieren und Informationen herauszuziehen.

Willmann: Ich würde noch hinzufügen, dass es eine sehr kommunikative und interdisziplinäre Arbeit ist. Man tauscht sich viel zu den Daten aus. Es ist quasi das Gegenteil von der Vorstellung, dass man als Informatikerin immer nur in einem dunklen Zimmer allein am Computer sitzt. Man muss die unterschiedlichen Welten verstehen.

Um welche Methoden geht es? Und was bedeuten diese für Forschung und Alltagswelt?

Cangli: Wir entwickeln digitale Lösungen für komplexe Systeme: durch mathematische Modelle, auf Hochleistungsrechnern und vor allem mithilfe von Methoden wie Künstlicher Intelligenz und Maschinellem Lernen. Am CASUS, dem Center for Advanced Systems Understanding am HZDR, arbeiten wir extrem interdisziplinär, mit sehr geringen Schwellen zwischen den unterschiedlichen Gruppen, obwohl wir zu ganz unterschiedlichen Forschungsbereichen gehören: von der Materie unter extremen Bedingungen über die Systembiologie und Erdwissenschaften bis zur digitalen Gesundheit und zu autonomen Systemen.



„Das ist gerade das Schöne daran: Wir können die Methoden von einem Problem auf das andere übertragen.“

— Attila Cangi, HZDR

Willmann: Ob in der Medizin, Physik oder in Industrie und Handel: Überall sammeln wir unglaublich viele Daten. Wir Menschen können diesen multidimensionalen Datenraum gar nicht mehr erfassen. Künstliche Intelligenz aber schon. Das bedeutet, wir können mit KI aus den sehr großen Datenbanken Trends herauslesen, die ansonsten für uns unsichtbar bleiben würden; zum Beispiel könnten Ärzte aus medizinischen Daten rechtzeitig erfahren, ob Patienten zu einer Risikogruppe gehören oder nicht.

Was fasziniert Sie persönlich am meisten an der Data Science?

Willmann: Wir als Entwickler können mithilfe der KI faszinierende Einsichten gewinnen: Beispielsweise sammeln die Physiker an unserem Institut an Teilchenbeschleunigern sehr viele Daten von Vorgängen, die sich unmöglich direkt beobachten lassen. Durch unsere Arbeit können wir im Nachgang dennoch im Detail nachvollziehen, was genau mit den Teilchen im Beschleuniger passiert ist.

Cangi: Mich fasziniert noch ein weiterer Aspekt: das Automatisieren und Beschleunigen. Mit KI können wir Simulationsmethoden um ein Vielfaches schneller machen. In meinem Fall geht es um die elektronische Struktur von Materie. Mit gewöhnlichen Methoden sind dazu auf Großrechnern Simulationen mit höchstens ein paar tausend Atomen möglich. Mit der KI-Methode, die wir entwickeln, funktioniert es mit hunderttausend bis Millionen von Atomen. Das macht einen riesigen Unterschied,

weil wir plötzlich zu Längen- und Zeitskalen vordringen, die man im Labor beobachten kann.

Wofür setzen Sie Künstliche Intelligenz in Ihrer aktuellen Forschung ein?

Cangi: Wir nutzen KI, um herauszufinden, wie sich Materie unter extremen Bedingungen verhält. Solche Bedingungen kommen in Planeten und Neutronensternen vor, sind aber auch für neue Methoden der Energiegewinnung durch Kernfusion und für die Entwicklung innovativer Materialien relevant. Dank KI können wir jetzt die komplette elektronische Struktur von Materie unter diesen extremen Bedingungen beschreiben – eine Art komplexe Wahrscheinlichkeitswolke der Elektronen.

Das Faszinierende ist: Sobald wir die elektronische Struktur beschreiben können, kennen wir alle Materialeigenschaften. Wir wissen: Ist ein Material elektrisch leitfähig oder ist es ein Isolator, ist es besonders fest und widerstandsfähig wie Diamant oder eignet es sich gut für einen technologischen Einsatz wie die Photovoltaik? Wir können also auch die Entwicklung neuer Materialien beschleunigen, indem wir sehr viele Kombinationen von Materialien digital durchspielen. Im Labor müsste man dann nur noch die aussichtsreichsten Kandidaten herstellen.

Willmann: An unserem Institut entwickeln Physiker gerade einen kompakten Freie-Elektronen-Laser, der so leistungsfähig ist, dass er jedes einzelne Atom einer Proteinstruktur abbilden könnte. Für

die Medizin ist das ein enorm wichtiges Thema. Für solche Experimente muss man die Anlage aber sehr gut kontrollieren und steuern können. Gewöhnlich vollzieht man den Weg der beschleunigten Elektronen nach, indem man sie beispielsweise durch Folien hindurchfliegen lässt, wo sie eine Spur hinterlassen. Dabei werden die Teilchen allerdings zerstört und das Experiment bricht ab. Daher entwickeln wir einen digitalen Zwilling für eine indirekte Diagnostik. Das ist ein virtuelles Experiment, mit dem wir die Bahn der Teilchen über das gesamte Experiment hinweg rekonstruieren können.

Was leistet so ein digitaler Zwilling?

Willmann: Im Experiment gibt es viele Details, die man nicht voraussehen und nicht mit Gleichungen erklären kann. Bei identischem Input führt das zu unterschiedlichem Output. Gewöhnliche Simulationen kommen daher oft zu anderen Ergebnissen als die Experimente. Hier kommt die KI ins Spiel: Durch eine Art Blackbox-Verfahren kann sie auch die erwartete Variation des Outputs liefern. Daraus lernen wir dann, wie stabil ein Experiment ist und ob wir es verbessern sollten.

Cangi: Allgemein gesprochen, ist ein digitaler Zwilling ein möglichst umfassendes digitales Abbild eines realen Vorgangs: Das kann ein Experiment, ein Prozess oder auch eine ganz andere Fragestellung sein. Durch den Einsatz von KI fügen wir völlig verschiedene Simulationen in ein gemeinsames digitales Setting zusammen. Damit kann der di-

gitale Zwilling auf den Nutzer reagieren. Er kann mir sofort eine Antwort auf die Frage geben, was passiert, wenn ich gewisse Parameter verändere. In meiner Abteilung arbeiten wir gerade darauf hin, einen digitalen Zwilling für das Innere eines Planeten zu entwickeln.

Wie unterscheiden sich Ihre Ansätze?

Cangi: Eigentlich nur im Forschungsziel. Das ist gerade das Schöne daran: Wir können die Methoden von einem Problem auf das andere übertragen. Genau das macht Machine Learning und Data Science aus. Obwohl es einmal um einen Planeten und einmal um einen Laser geht, können Anna und ich uns über unsere digitalen Zwillinge austauschen und voneinander lernen.

Willmann: Genau dafür wurden ja auch die „Helmholtz AI Local Units“ eingerichtet: Wir unterstützen dabei, Maschinelles Lernen in der Forschung einzusetzen und für unterschiedliche Fragestellungen zu adaptieren. Maschinelles Lernen ist ein Forschungsgebiet, das sich unglaublich schnell entwickelt. Ständig entsteht Neues. Deswegen gibt es die Forschungsgruppen in den „Local Units“: Wir nutzen nicht nur Methoden, wir forschen auch an neuen Methoden.

Was sind die aktuellen Trends? Was bringt die Zukunft?

Willmann: Ein Trend ist „Streaming Learning“. Das traditionelle Maschinelle Lernen benötigt viel Speicherplatz für Dateien, mit denen das System anfangs trainiert. Es wäre viel effizienter, ein Modell zu haben, das per Streaming und ständig neu dazu lernt. Aber es gibt noch viele Probleme, wie das sogenannte „Catastrophic Forgetting“. Hier vergisst das Modell, was es zu einem länger zurückliegenden Zeitpunkt gelernt hat – ähnlich wie ein Mensch. Wir arbeiten an Methoden, wie wir solche Modelle resistent gegen das Vergessen machen können, ohne enormen Zwischenspeicherplatz zu benötigen.

Cangi: Künstliche Intelligenz wird verlässlicher und selbstständiger. Das ist auch bereits in der Öffentlichkeit sichtbar, Stichwort ChatGPT und andere Sprachmodelle. Wer ChatGPT ausprobiert hat, ist meist fasziniert und erstaunt, wie selbstständig KI agieren kann. In der Forschung rücken Experimente und Simulationen viel näher zusammen. Die Frage ist: Kommt eine allgemeine KI, die noch mehr Fähigkeiten hat und kreativer sein könnte? Wie weit das geht, wird die Zukunft zeigen.

Gewisse Schritte kann man sehr gut automatisieren. Als Forscher muss ich aber auch weiterhin ein Konzept haben und eine gewisse Auswahl an Daten und Methoden treffen, um die Ergebnisse wissenschaftlich zu durchdringen und KI verantwortungsvoll einzusetzen. In Deutschland treibt die akademische Welt, wo man vorsichtiger mit den Daten und Methoden umgeht als bei profitorientierten Unternehmen, den Fortschritt an. Hier sehe ich gute Chancen, Regeln zum Umgang mit großen Datenmengen und KI zu entwickeln und damit KI gesellschaftsverträglich umzusetzen.

Publikation:

L. Fiedler et al.: Predicting electronic structures at any length scale with machine learning. *npj Computational Materials*, 2023 (DOI: 10.1038/s41524-023-01070-z) ↴

Kontakt

_CASUS - Center for Advanced Systems Understanding am HZDR, gemeinsam gegründet von HZDR, Helmholtz-Zentrum für Umweltforschung, Max-Planck-Institut für molekulare Zellbiologie und Genetik, TU Dresden, Universität Wrocław

Dr. Attila Cangi
a.cangi@hzdr.de

_Institut für Strahlenphysik am HZDR und Helmholtz AI Local Unit
Anna Willmann
a.willmann@hzdr.de

Unverzichtbar für die Technologien von heute und morgen

Europium steckt in Leuchtmitteln, in fälschungssicheren Banknoten oder in Sensoren. Es zählt zu den am besten erforschten Selten-Erd-Elementen. Dennoch deckt eine große Metastudie aus dem HZDR erhebliche Wissenslücken auf. Mit gesicherten Daten könnte Europium künftig umweltschonender und mit höherer Effizienz abgebaut und recycelt werden.

__Text . Antonia Rötger

Manche Literaturangaben zu Europium waren so widersprüchlich, dass der Chemiker Norbert Jordan sie per Experiment im eigenen Labor überprüfen wollte - mit teils verblüffendem Ergebnis.





Selten-Erd-Elemente wie Lanthan, Praseodym oder Europium finden sich in jedem Handy. Oft nur in winzigen Mengen, aber eben in Milliarden Geräten. Auch Windturbinen, Batterien, Katalysatoren und viele andere High-Tech-Geräte benötigen oft mehrere unterschiedliche Elemente aus der Gruppe der Seltenen Erden. Sie gelten wegen ihrer besonders aufwendigen Gewinnung als kritische Rohstoffe. In der Natur kommen sie nicht in elementarer Form vor, sondern fest in Mineralen wie beispielsweise Monazit oder Bastnäsit gebunden – und das in niedrigsten Konzentrationen. Um die einzel-



nen Seltenen Erden aus dem abgebauten Erz herauszulösen und voneinander zu trennen, werden gewaltige Mengen an Gestein bewegt, gemahlen und mit giftigen Chemikalien und hochkonzentrierten Säuren behandelt, was die Abbaugebiete dauerhaft belastet.

Enorme Verluste vom Bergbau bis zur Produktion

Das begehrte Europium stammt – wie alle Elemente der Seltenen Erden – vor allem aus China und Brasilien, obwohl es auch in den USA, in Australien und einigen europäischen Ländern Vorkommen gibt. „Auf jeder Stufe, vom Bergbau über die Verarbeitung, die Produktion von Bauteilen bis zum Recycling der Seltenen Erden haben wir enorme Verluste, die wir uns eigentlich nicht mehr erlauben dürfen. Gerade der Bergbau zerstört oft großflächig Landschaften und Umwelt“, weiß Vinzenz Brendler, Abteilungsleiter im HZDR-Institut für Ressourcenökologie.

Nur auf der Grundlage von fundierten und belastbaren Daten zum chemischen Verhalten dieser Elemente lassen sich die Prozesse bei Erzaufbereitung, Weiterverarbeitung und Wiederaufbereitung effizienter und verträglicher gestalten. Deshalb hat der Datenexperte Brendler zusammen mit seinem Kollegen Norbert Jordan eine große Studie zu Europium konzipiert und Partner mit ins Boot geholt: Fachleute aus dem Paul-Scherrer-Institut in der Schweiz und aus der Endlager-sicherheitsforschung in Schweden. Die Ergebnisse liegen nun in einer strukturierten Datenbank vor und sind für jedermann zugänglich.

Europium: Bekannt für sein Leuchten

Im Jahr 1901 entdeckt, ist Europium mit Americium das einzige Element, das nach einem Kontinent benannt ist. Mit einer Dichte von 5,24 Gramm pro Kubikzentimeter zählt es zu den Leichtgewichten unter den Schwermetallen. Es glänzt silbrig, läuft aber im Kontakt mit Luft sofort an und ist ausgesprochen reaktionsfreudig. In wässrigen Lösungen oder mit Säuren kann es zu Komplexverbindungen reagieren. Und ab 150 Grad Celsius entzündet es sich spontan. Die physikalischen Eigenschaften machen Europium für einige Anwendungen besonders wertvoll, ja unverzichtbar: Es leuchtet intensiv rot, wenn Licht bestimmter Wellenlänge auf das Material trifft.

Früher wurde Europium in den roten Pixeln von Kathodenbildschirmen für Farbfernseher eingesetzt, heute bringt es Leuchtdioden zum Strahlen, wird für bildgebende Verfahren in der Medizin benötigt und macht durch seine Fluoreszenz Banknoten fälschungssicher. Dafür wird es in Wirtsgitter aus metallischen oder halbleitenden Elementen eingebaut und kann je nach Umgebung auch in anderen Farben als rot leuchten. Europium kommt außerdem als Zusatz in Katalysatoren, Magneten, Legierungen und Gläsern zum Einsatz – oder als guter Neutronen-Absorber in den Steuerstäben für Kernreaktoren. Die weltweite Fördermenge pro Jahr liegt bei rund 400 Tonnen Europium-Oxid. Das erscheint im Vergleich zu Fördermengen anderer Rohstoffe gering, doch da das Element in Bastnäsit nur in Konzentrationen von 0,1 Prozent vorliegt, entstehen große Mengen Abraum mit umweltschädlichen Bestandteilen.

Publikationen aus 120 Jahren ausgewertet

„Viele glauben, dass die chemischen und thermodynamischen Eigenschaften von Europium sehr gut bekannt sind, aber das stimmt so nicht, auch wenn es für Europium im Vergleich zu anderen Selten-Erd-Elementen bisher die meisten Publikationen gibt“, erläutert Norbert Jordan. Zum Verhalten von Europium in wässriger Lösung mit Sulfat beispielsweise existieren über 50 Publikationen. Nach gründlicher Überprüfung erwiesen sich jedoch nur die Daten aus acht dieser Beiträge als verlässlich.

Bereits vor mehr als zehn Jahren hatte Jordan damit begonnen, Ergebnisse aus älteren Publikationen zu Europium kritisch zu hinterfragen. In einem kleinen Team hat er seither quasi nebenbei an diesem Thema weitergearbeitet. Erst als es ihm gelang, Fördermittel einzuwerben, nahm das Europium-Projekt an Fahrt auf. Nun haben Jordan und Brendler zusammen mit den Kooperationspartnern alle wesentlichen Publikationen – sage und schreibe 350 Referenzen mit 1.430 Werten – aus wissenschaftlich anerkannten Fachjournalen überprüft, die zwischen 1901 und 2021 erschienen sind.

„In dieser großen Zeitspanne haben sich die Publikationskulturen stark verändert, zudem haben wir auch Publikationen in russischer und chinesischer Sprache einbezogen und mit Hilfe von muttersprachlichen Kollegen ausgewertet“, erklärt Jordan. Etwa die Hälfte aller Daten stammt aus den Jahren 1960 bis 1980. „Bei den neueren Publikationen nahmen wir oft auch Kontakt zu den Forschungsgruppen auf, wenn uns etwas unklar war“, fährt der Chemiker fort. Gleichzeitig betont er die Qualität einiger Publikationen, die detailreich und wissenschaftlich fundiert aufzeigen, wie genau die Ergebnisse zustande kamen.

Doch das war nicht immer der Fall: „Manchmal brauchten wir Tage, um einen Beitrag zu verstehen, weil wichtige Angaben fehlten. Und manchmal waren die vorgestellten Ergebnisse auch unwahrscheinlich oder widersprüchlich.“ In einigen Fällen hat Jordan die Experimente im eigenen Labor wiederholt. „Die Ergebnisse zu Europium-Phosphat, die wir in der Literatur gefunden haben, waren zum Beispiel falsch. Wir haben daher genaue Daten im Labor ermittelt, die nun in die Verbesserung von Verfahren einfließen können“, berichtet Jordan. In Verbindung mit Chlorid in wässrigen Lösungen verhält sich Europium ebenfalls anders – es reagiert nicht so stark, wie behauptet, sondern im Gegenteil nur schwach.

Computersimulation statt Versuch und Irrtum

Die neuen Erkenntnisse zum chemischen und physikalischen Verhalten von Europium in unterschiedlichen Umgebungen werden gebraucht. Denn bisher bauen viele technologische Verfahren für die Gewinnung und Verarbeitung von Europium auf Schätzwerte und Erfahrung. Mit soliden Daten könnten sich chemische Reaktionen im Vorfeld am Computer simulieren lassen. Das würde dabei helfen, umweltfreundlichere Methoden zu entwickeln oder Recyclingverfahren aus Elektroschrott zu verbessern – für weniger Bergbau und eine funktionierende Kreislaufwirtschaft.



Immerhin 350 Publikationen zu Europium standen auf dem Prüfstand, bevor Norbert Jordan die verifizierten Ergebnisse zusammen mit dem Datenexperten Vinzenz Brendler (li.) in eine für jedermann zugängliche Datenbank überführen konnte.

„Auf jeder Stufe, vom Bergbau über die Verarbeitung, die Produktion von Bauteilen bis zum Recycling der Seltenen Erden haben wir enorme Verluste, die wir uns eigentlich nicht mehr erlauben dürfen.“

— Vinzenz Brendler, HZDR

„Wir hatten mit Europium angefangen, da dafür umfangreiche Forschungsdaten vorlagen. Aber auch für die anderen Elemente aus der Gruppe der Seltenen Erden wäre so eine Datenbank notwendig“, betont Brendler. Sein Kollege Jordan wünscht sich, dass die neuen Erkenntnisse auch andere Forschungsgruppen motivieren, belastbare thermodynamische Daten zu Selten-Erd-Elementen zu generieren. „Wir wissen nun, wie man so eine Datenbank aufbauen kann. Dabei geholfen hat die Abteilung Computational Science am HZDR“, blickt Jordan zurück.

Insgesamt gibt es 17 Selten-Erd-Elemente – eine Menge Arbeit für die Experten aus Dresden. Hilfreich dürfte sein, dass sich ein tieferes Verständnis der Chemie von Europium zu einem großen Teil auf andere Elemente der Seltenen Erden übertragen lässt, aber auch auf die Chemie der dreiwertigen, radioaktiven Aktiniden in abgebrannten Brennstäben von Kernkraftwerken.

Publikation:

N. Jordan et al.: A critical review of the solution chemistry, solubility, and thermodynamics of europium: Recent advances on the Eu^{3+} aqua ion and the Eu(III) aqueous complexes and solid phases with the sulphate, chloride, and phosphate inorganic ligands. *Coordination Chemistry Reviews*, 2022 (DOI: 10.1016/j.ccr.2022.214608) ↴

Kontakt

— Institut für Ressourcenökologie am HZDR
Dr. Norbert Jordan | Prof. Vinzenz Brendler
n.jordan@hzdr.de | v.brendler@hzdr.de

Nobelpreisträgerin Donna Strickland zu Besuch

Hochleistungs-Laser verdanken ihre Existenz der bahnbrechenden Forschung von Donna Strickland. Sie erhielt den Nobelpreis 2018 gemeinsam mit Gérard Mourou „für ihre Methode zur Erzeugung hochintensiver, ultrakurzer optischer Pulse“. Das Prinzip nennt sich gechirpte Pulsverstärkung (CPA, Chirped Pulse Amplification) und beruht darauf, Laserpulse vor ihrer Verstärkung zeitlich zu strecken, um sie anschließend wieder zu komprimieren.

„Die CPA-Technik hat eine Revolution auf dem Gebiet der Laseroptik in Gang gesetzt“, weiß der Physiker Toma Toncian. Sein Arbeitsplatz liegt in Schenefeld in der Metropolregion Hamburg, genauer: am European XFEL, dem weltstärksten Röntgenlaser. Dort betreibt das HZDR auch zwei Hochleistungs-Laser über das Nutzerkonsortium Helmholtz International Beamline for Extreme Fields (HIBEF). Als Abteilungsleiter verantwortet Toncian für das HZDR den Betrieb und die Wartung der HIBEF-Anlagen. So durfte er beim Besuch der Nobelpreisträgerin am 10. Februar 2023 natürlich nicht fehlen.

„Seine“ Laser an der Experimentierstation HED (High Energy Density) des European XFEL versprechen Einblicke in die Struktur von Materialien und in extrem schnelle Prozesse. Damit können Forscherinnen und Forscher aus aller Welt neue Erkenntnisse über Sterne, Planeten, Plasmawolken, Quantensysteme und vielseitige Materialien gewinnen. (CZ)

Kontakt

_Institut für Strahlenphysik am HZDR
PD Dr. **Toma Toncian**
t.toncian@hzdr.de



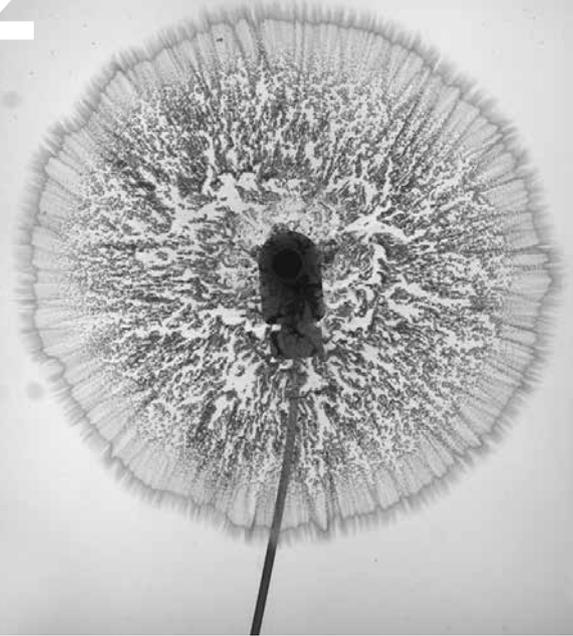
Helmholtz International Beamline for Extreme Fields (HIBEF) am European XFEL in **Schenefeld**

Die Nobelpreisträgerin umringt von Physikern des HZDR sowie der englischen Partneinrichtungen im internationalen HIBEF-Nutzerkonsortium (v.l.: Thomas Cowan, Thomas Butcher vom Science and Technology Facilities Council (STFC), Donna Strickland, Toma Toncian, Ulrich Schramm, Justin Wark von der Universität Oxford) ┘

1



2



Schwerelos strömend – Datenschätze aus dem All

Auf der Erde ist sie allgegenwärtig: Die Schwerkraft prägt unsere Umwelt und deren Physik, Chemie und Biologie. Karin Schwarzenberger und ihr Team wollen herausfinden, welche Rolle die Schwerkraft spielt, wenn zwei dynamisch strömende Flüssigkeiten aufeinandertreffen. Für den Vergleich zur Schwerelosigkeit schossen sie zuletzt sogar ein Experiment an Bord einer Rakete ins All. Die Erkenntnisse sollen dabei helfen, Umwelttechnologien zu verbessern.

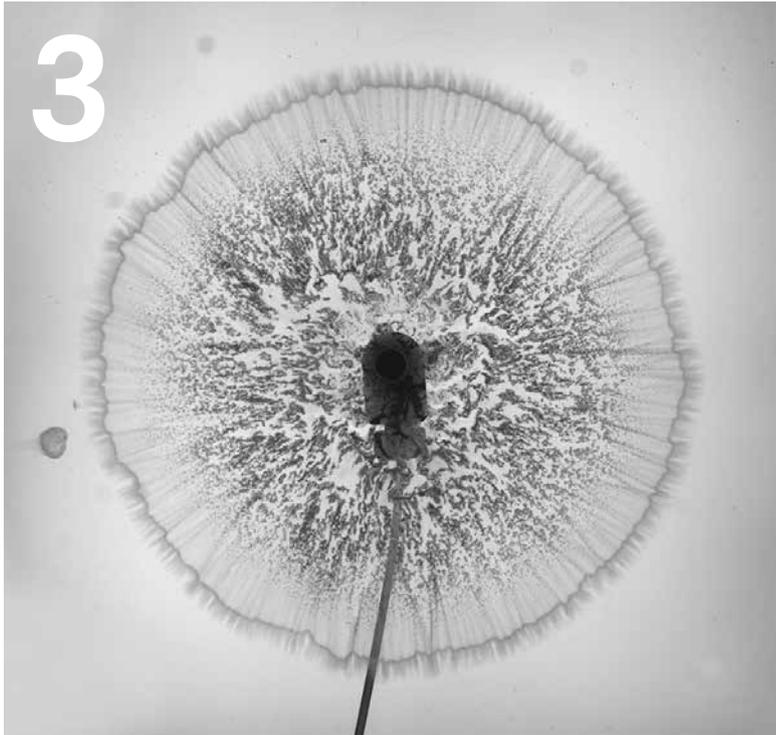
Text: Gabriele Schönherr

Sieben Jahre haben die Ingenieure und Forscherinnen auf diesen Moment gewartet: Es ist der 1. Oktober 2022, 07:26 Uhr Ortszeit, als die Höhenforschungsrakete TEXUS-57 – ein Kooperationsprojekt von Airbus, der Europäischen Raumfahrtagentur ESA und dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt – von der Startrampe im Esrange Space Center in Schweden mit vier Experimentiermodulen an Bord endlich abhebt. Ein Moment des Aufatmens im gesamten Team. Zumindest für kurze Zeit. Denn ob das Experiment im Weltraum glückt, erfährt man erst Wochen später, nach der Datenauswertung. Vieles kann schiefgehen, weiß Karin Schwarzenberger: „Das Experiment kann beim Start beschädigt werden. Die Rakete kann eine harte Landung haben oder sie kann in einen See stürzen – in Nordschweden sind zwanzig

Prozent der Fläche mit Wasser oder Mooren bedeckt. Wenn man Pech hat, sind alle Daten weg.“ Die Risiken und Hürden der Weltraumforschung kennt sie gut. Sie weiß aber auch um den großen Wert für die Forschung.

Wissen für unsere Erde

Am HZDR und der TU Dresden forscht die Ingenieurin zu Transportprozessen an Grenzflächen, etwa zwischen zwei Flüssigkeiten. Neue Erkenntnisse in diesem Bereich könnten helfen, umweltrelevante Technologien zu verbessern. Beispielsweise zur Einlagerung von CO₂ oder zur Bodensanierung. „Bei der Bodensanierung arbeitet man oft mit Wirkstofflösungen, die unter Druck in Böden eingebracht werden, um Schadstoffe zu binden oder den Boden zu verfestigen. Im Fall



Die Reaktionsfront zwischen zwei Flüssigkeiten bildet mit der Zeit blumenförmige Strömungsmuster.



Start der Höhenforschungsrakete TEXUS-57 am 1. Oktober 2022 mit dem Dresdner Experimentiermodul an Bord.



der CO₂-Speicherung handelt es sich um eine karbonatreiche Lösung, die in einen basischen Boden injiziert wird, wo sie auf eine Lösung von basischen Ionen trifft, die das CO₂ mineralisieren“, erklärt Schwarzenberger. Zentral für beide Methoden ist die Reaktion zweier Flüssigkeiten, während eine in die andere einströmt. Dabei bilden sich dynamische Reaktionsfronten mit komplexen Strömungsmustern.

Solche Reaktionsfronten in wissenschaftlichen Modellen inklusive der kompletten Strömungsdynamik zu berechnen, ist allerdings momentan noch sehr komplex und aufwendig. Schwarzenberger und ihr Team prüfen daher, ob bestimmte Szenarien mit einfacheren Modellen auskommen. Lassen sich Einflussfaktoren ausklammern, reduziert das den Rechenaufwand enorm. Ein solcher Faktor ist der Auftrieb in Flüssigkeiten, da er gerade in porösen Medien wie in Bodenmaterialien kaum Einfluss hat. „Vereinfacht gesagt liegt das daran, dass die einzelnen Poren im Material so klein sind, dass Oberflächeneffekte an den Wänden und der Fließdruck das Geschehen dominieren“, sagt Schwarzenberger.

Die Schwerkraft ausschalten

Hier kommt die Schwerkraft ins Spiel, denn sie ist die physikalische Ursache des Auftriebs. Kooperationspartner des HZDR-Teams an der Université Libre de Bruxelles haben bereits entsprechend vereinfachte theoretische Modelle entwickelt. Diese beschreiben die Injektionsströmung, die chemische Reaktion zweier Flüssigkeiten sowie deren Diffusion, also die zufällige Eigenbewegung der Moleküle. Sie berücksichtigen jedoch nicht die Schwerkraft.



„Wir wollen herausfinden, wann simplere Modelle ausreichen.“

— Karin Schwarzenberger, HZDR und TU Dresden

„Wenn wir diese Modelle der Brüsseler Kollegen nutzen können, lässt sich die Reaktionsfront an einem normalen PC berechnen. Mit den Effekten der Schwerkraft sind dagegen Hochleistungsrechner nötig, um die kompletten Strömungsgleichungen in direkten numerischen Simulationen zu lösen“, stellt Schwarzenberger fest. Die Crux: Auch die einfacheren Modelle ohne Auftrieb müssen erst validiert werden. „Experimentell geht das in Schwerelosigkeit deutlich einfacher als in porösen Medien. Die Mikrogravitation schaltet die Auftriebskraft quasi aus und wir können Effekte beobachten, die auf der Erde durch die Schwerkraft überlagert werden“, erklärt die Wissenschaftlerin.

Im ersten Schritt gelang dies durch eine Parabelflugkampagne. Im freien Fall eines Flugzeugs wird dabei der Zustand der Schwerelosigkeit mehrfach zumindest kurz erreicht: 22 Sekunden Zeit hatte die Forschungsgruppe pro Parabel. „Wir haben die Strömungen durch einen vereinfachten Aufbau, sogenannte Hele-Shaw-Zellen, simuliert, in die nacheinander zwei unterschiedliche Flüssigkeiten eingespritzt wurden. Jede dieser Zellen besteht aus zwei in sehr geringem Abstand übereinanderliegenden, ebenen Plexiglasscheiben. Die Strömungsmuster entwickeln sich daher quasi in 2D“, beschreibt Schwarzenberger die Experimente.

Durch den Vergleich der in Schwerelosigkeit gewonnenen experimentellen Daten mit den vereinfachten Modellen konnten die Forscherinnen einige der theoretischen Vorhersagen validieren. Aber nicht alle, denn für den Diffusionsprozess reichten die je 22 Sekunden in Schwerelosigkeit nicht aus. In der Mikrogravitations-Umgebung verändern sich auch die Zeitskalen. Wenn der Auftrieb fehlt, kann der gleiche Prozess plötzlich länger dauern als auf der Erde. „Die Parabelflüge waren daher nur ein erster Schritt und die Raketenflüge eine Riesen-Chance“, betont die Ingenieurin. 2016 präsentierte die Gruppe den ersten technischen Entwurf eines Experimentiermoduls für das europäische Höhenforschungsraketenprogramm. Drei Jahre später kam die Zusage für den Flug.

Sechs Jahre Vorbereitung für sechs Minuten Experiment

Die Weltraumsituation stellte nochmals neue Anforderungen an die Hardware. Bei Start und Landung der Rakete wirken enorme Kräfte auf das Experiment und der Platz ist äußerst knapp. Einmal gestartet, kann kein Experimentator mehr eingreifen. Jeder Zentimeter und jede Sekunde mussten akribisch geplant sein. An Bord der Rakete zeichneten dann drei Kameras die Reaktionsfronten live auf. Beruhigend immerhin: Die Mission hatte zum ersten Mal einen „digital downlink“. Wäre bei der Landung etwas schiefgegangen, hätte das Team wenigstens einige Bilder retten können.

Seit Anfang 2020 trafen sich die Forscher und Ingenieurinnen regelmäßig beim Entwicklungspartner Airbus in Bremen für Testreihen. Dann geschah Unvorhergesehenes: die Coronapandemie, ein Großfeuer an der Startrampe und schließlich wurde im Februar 2022 ein Tag nach dem ersten Test-Countdown der Start aufgrund des Ukraine-Kriegs abgesagt. Im Oktober 2022 endlich der verspätete Start. Die Bilanz: Sechs Jahre Vorlauf für dreizehn Minuten Flug und sechs Minuten Schwerelosigkeit. Lohnt sich das? „Sechs Minuten, das ist richtig lang. Hier sind Raketenexperimente Parabelflügen weit überlegen“, bejaht Schwarzenberger.

Daten-Auswertung mit Twist – und Happy End

Mit den neuen Daten aus dem Raketenexperiment konnte die Forschungsgruppe nun auch den Einfluss der Diffusion auf die Reaktionsfronten mit den Vorhersagen der Modelle vergleichen – allerdings erst nach monatelanger Auswertung: „In den experimentellen Daten haben wir immer Störeffekte, wie etwa kleine Blasen in der Strömung, besonders unter den extremen Bedingungen auf Parabelflügen und in der Rakete. Einen Teil der Daten müssen wir dann aus der Auswertung he-



“Experimente in der Mikrogravitation sind immer sehr kontraintuitiv.“

— Yorgos Stergiou, HZDR

Die technische Umsetzung des Experimentiermoduls lag bei Airbus. In die einzelnen Zellen aus eng übereinanderliegenden Plexiglasscheiben werden nacheinander zwei unterschiedliche Flüssigkeiten eingespritzt. Drei Kameras filmen die entstehenden Reaktionsfronten.



rausnehmen“, erläutert Yorgos Stergiou. Der Chemie-Ingenieur stieg für seine Doktorarbeit in das Projekt ein und war auch schon bei den Parabelflügen mit an Bord. „Das ist so eindrucksvoll; danach dauert es dann doch eine Weile, bis man mental wieder bei den Daten ist“, erinnert er sich.

Die Daten aus dem Raketenexperiment hielten noch eine besondere Herausforderung bereit. Unbemerkt war im Experiment ein falsches Bauteil eingebaut worden und einige Daten schienen dadurch unbrauchbar zu sein. Erst nach viel Recherche konnte das Team aufatmen: Die experimentellen Ergebnisse waren verlässlich und passten zu den theoretischen Modellen.

■ Raketen-Experimente

Die Planung und Realisierung der Experimente fand im Rahmen des von der Europäischen Raumfahrtagentur ausgewählten „ESA topical team CHYPI-FLOWER“ statt; CHYPI steht für „Chemo-HYdrodynamic Patterns and Instabilities“. Mehrere internationale Forschungsteams führen in diesem Verbund Experimente, Daten und theoretische Modelle zur Chemie und Physik hydrodynamischer Muster und Instabilitäten zusammen. Dabei haben sie Anwendungen im Weltraum und auf der Erde im Blick.

Die Experimente bestätigten: Die Diffusion wird immer wichtiger, je weiter die Reaktionsfront zwischen den beiden Flüssigkeiten sich vom Einspritzpunkt in die Zellen entfernt. Nahe dem Einspritzpunkt ist die Strömung sehr schnell und die Reaktionsfront wird vor allem durch die Wandreibung beeinflusst und quasi ausgedehnt. Nach außen hin nimmt die Strömungsgeschwindigkeit rasch ab. Dadurch gewinnt die Diffusionsbewegung der Moleküle an Einfluss und mischt nun die Flüssigkeiten an der Reaktionsfront stärker durch.

Seitdem befasst sich das Team in Brüssel intensiv mit den Daten. „Die Arbeiten sind sehr vielversprechend. Wir konnten bereits zeigen, dass das Modell, das die Wandreibung über einen einfachen parabelförmigen Geschwindigkeitsverlauf berücksichtigt, gut mit unserem Raketenexperiment übereinstimmt. Dieses Modell sollte deshalb auch für Reaktionsfronten in kleinen Poren anwendbar sein“, fasst Schwarzenberger die bisherigen Ergebnisse zusammen. „Ohne die Bedingungen der Schwerelosigkeit hätten wir dies nicht experimentell über unsere Hele-Shaw-Zellen herausfinden können, weil Messungen in realen porösen Medien extrem schwierig sind.“ ┘

Kontakt

— Technische Universität Dresden und Institut für Fluidodynamik am HZDR
Dr. Karin Schwarzenberger
k.schwarzenberger@hzdr.de



Ready to go: Nach sechs Jahren Vorlauf freut sich die Dresdner Gruppe mit ihren Partnern auf den Start. Ihr Modul: das Dritte von unten.

GEWONNEN

Begehrte ERC Grants

Einen Consolidator Grant des Europäischen Forschungsrats (ERC) und somit knapp zwei Millionen Euro erhält die Physikerin **Larysa Baraban**, um gemeinsam mit ihrem Team Tumoreigenschaften zu digitalisieren. Ihre „ImmunoChip“-Plattform soll ermitteln, ob und wie ein Patient auf eine Immuntherapie anspricht. Dazu entwickelt Baraban Bio-Nano-Sensoren, mit deren Daten sich die Krebsimmunität bestimmen und die Behandlung strategisch planen und verfolgen lässt.

Mit Methoden des Maschinellen Lernens will **Tobias Dornheim** grundlegende Fragen über Wasserstoff und schwerere Elemente beantworten und so Beiträge zur Materialforschung, zu astrophysikalischen Modellen und zur Kernfusion leisten (siehe Artikel auf Seiten 20 - 22). Mit einem Starting Grant des ERC stehen ihm dafür rund eineinhalb Millionen Euro für den Zeitraum von fünf Jahren zur Verfügung.

➔ <https://erc.europa.eu/funding>



Larysa Baraban optimiert Immuntherapien gegen Krebs

Tobias Dornheim berechnet Quantenzustände



Preisgekrönte Batterieforschung

Für ihre innovative Methode zum Recycling von Graphit erhält **Anna Vanderbruggen** den CHANGE Award des Europäischen Innovations- und Technologieinstituts (EIT). In ihrer Doktorarbeit gelang es ihr, das feine Pulver aus zerkleinerten Lithium-Ionen-Batterien in zwei wertvolle Produkte zu trennen, wodurch ein effizientes und hochselektives Recycling sowohl von Graphit als auch von Metallen möglich wird. Vanderbruggen ist Absolventin des EIT-Masterstudiengangs Emerald und wurde von EIT RawMaterials, dem größten europäischen Rohstoffnetzwerk, für den Preis nominiert.

➔ <https://eit.europa.eu/>

Anna Vanderbruggen und Bernd Schäfer (CEO und Managing Director EIT RawMaterials)





GETAGT

Vernetzt im Dreiländereck

„Building Bridges for the Next Generations“ – so lautete der Titel der trinationalen Wissenschaftskonferenz, die am 16. und 17. Mai im Internationalen Congress Center Dresden stattfand. Sie bot Nachwuchsforscherinnen vor allem aus Sachsen, Polen und Tschechien ein Podium, um mit Stakeholdern aus Politik, Wirtschaft und Gesellschaft ins Gespräch zu kommen. Die rund 300 Teilnehmer tauschten sich zu den Themenbereichen Gesundheit, Informationstechnologie sowie Energie und Klima aus. Organisiert wurde die Konferenz vom HZDR im Auftrag des Freistaats Sachsen.

➤ <https://building-bridges-conference.eu/>

GEPLANT

Neue NCT-Standorte

Diagnostik und Therapie, Forschung und Patientenversorgung unter einem Dach: So lautet das Erfolgsrezept des Nationalen Centrums für Tumorerkrankungen (NCT), das auf langfristig angelegten Kooperationen zwischen dem Deutschen Krebsforschungszentrum und ausgewählten onkologischen Zentren an Hochschulen und Forschungseinrichtungen beruht.

Bereits im Jahr 2015 fiel der Startschuss für den ersten Partnerstandort des Heidelberger NCT: das NCT/UCC Dresden mit den Partnern Universitätsklinikum Carl Gustav Carus und Medizinische Fakultät der TU Dresden sowie HZDR. Im Februar dieses Jahres hat das Bundesministerium für Bildung und Forschung nun vier neue Standorte bestätigt:

- NCT Berlin
- NCT Köln/Essen
- NCT Südwest: Tübingen/Stuttgart-Ulm
- NCT Wera: Würzburg mit den Partnern Erlangen, Regensburg und Augsburg

➤ www.dkfz.de

➤ www.nct-dresden.de



Das NCT-Gebäude auf dem Gelände des Dresdner Uniklinikums wurde 2020 eröffnet.

HERAUSGEBER

Prof. Dr. Sebastian M. Schmidt und Dr. Diana Stiller,
Vorstand des Helmholtz-Zentrums Dresden-Rossendorf (HZDR)

ERSCHEINUNGSDATUM

August 2023 // Redaktionsschluss: 31. Mai 2023
ISSN: 2194-5705 // Ausgabe 01/2023

REDAKTION

Dr. Christine Zimmermann (Redaktionsleitung),
Simon Schmitt (V.i.S.d.P.), Kommunikation und Medien am HZDR

Wissenschaftlicher Redaktionsbeirat (nach Forschungsbereichen):

Energie – Dr. Harald Foerstendorf, Dr. Frank Stefani

Gesundheit – Dr. Fabian Lohaus, Dr. Kristof Zarschler

Materie – Dr. Gregor Hlawacek, Dr. Andreas Wagner

AUTORINNEN DIESER AUSGABE

Kai Dürfeld, Dr. Frank Grotelüsch, Dr. Antonia Rötger,
Dr. Gabriele Schönherr

Aus Gründen der besseren Lesbarkeit wechseln wir zwischen der männlichen und der weiblichen Form der Personenbezeichnung ab.

BILDNACHWEIS

Mitarbeiter des HZDR, soweit nicht anders angegeben

Titelbild: blaurock markenkommunikation – Innenteil: shutterstock.com/
ganjalex (S. 6), Juniks (S. 7), Shutterstock.com/INGARA (S. 8), NCT/UCC/
André Wirsig (S. 9-10, 13, 29-31, 38 oben), Uniklinikum Dresden/Marc Eisele
(S. 12), blaurock markenkommunikation (S. 14-17, 41), stock.adobe.com/
Helmut (S. 19), Science Communication Lab (S. 20), European XFEL/
Heiner Müller-Elsner (S. 21), Antje Krämer (S. 21, 24-25), shutterstock.com/
Tero Vesalainen (S. 23), Sylvio Dittrich (S. 24, re.), European XFEL/
Axel Heimken (S. 33), Airbus (S. 35 unten, S. 37), EIT Raw Materials
(S. 38 unten), Robert Lohse (S. 39 oben), NCT/UCC/Frank Blümler
(S. 39 unten), blaurock markenkommunikation (S. 40-41) – Rückseite:
Sächsisches Staatsministerium für Wissenschaft, Kultur und Tourismus

GESTALTUNG

WERKSTATT X . Michael Voigt | www.werkstatt-x.de

DRUCK

Druckerei Mißbach | www.missbach.de

AUFLAGE

3.500 // Gedruckt auf Circleoffset,
FSC zertifiziert und mit dem Blauen Engel ausgezeichnet

KONTAKT // BESTELLUNG (kostenfrei)

Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf

Leitung Kommunikation und Medien

Simon Schmitt

Bautzner Landstraße 400, 01328 Dresden

Telefon: 0351.2603400 | presse@hzdr.de

„entdeckt“ erscheint ein- bis zweimal jährlich. Alle Print-Ausgaben
finden Sie als E-Paper auf den Internetseiten des HZDR.

➤ www.hzdr.de

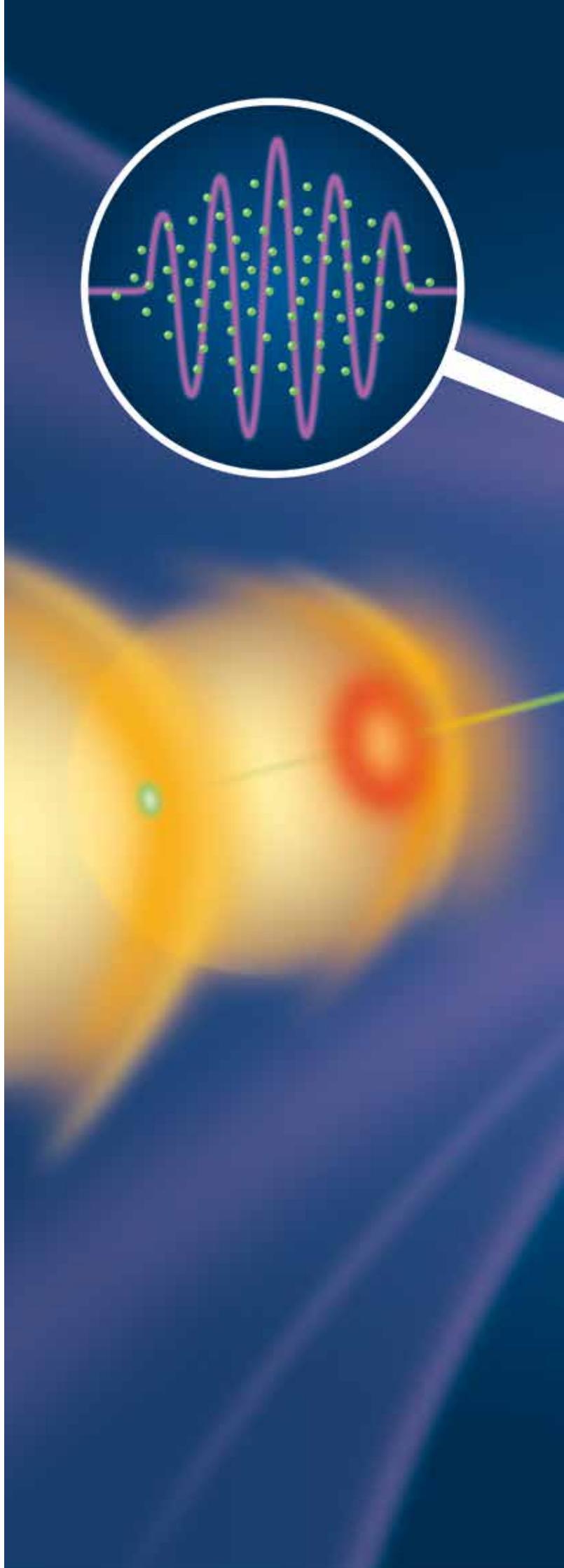
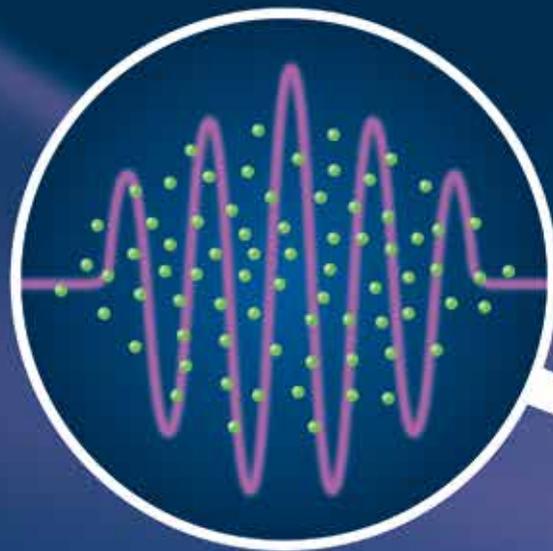
Das HZDR auf YouTube, Twitter und Mastodon:

➤ www.youtube.com/user/FZDresden

➤ www.twitter.com/hzdr_dresden

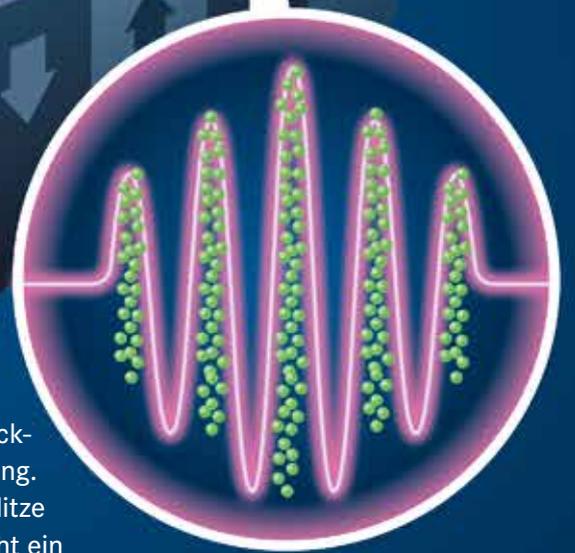
➤ <https://helmholtz.social/@hzdr>

Das HZDR verschickt das Forschungsmagazin „entdeckt“ als
Serviceangebot. Falls Sie es nicht mehr erhalten möchten, senden
Sie uns bitte eine E-Mail mit dem Betreff „Abbestellen“ an presse@hzdr.de
oder schreiben uns eine kurze Mitteilung an die oben angegebene
Adresse. Wenn Sie auch weiterhin die „entdeckt“ beziehen möchten,
müssen Sie nichts unternehmen.



Teilchen auf Slalomkurs

Eine chemische Reaktion filmen oder unbekannte Eigenschaften eines Materials aufspüren, das können ultrakurze Lichtpulse im Röntgenbereich. An riesigen Anlagen erzeugen spezielle Laser – Freie-Elektronen-Laser (FEL) – solche Pulse. Deshalb arbeitet ein HZDR-Team an einem kleineren und kostengünstigeren FEL auf Basis einer noch in der Entwicklung steckenden Technologie: der Laserplasma-Beschleunigung. Zunächst feuert ein Hochleistungslaser extrem starke Lichtblitze in ein ionisiertes Gas, also in ein Plasma (gelb-rot). Es entsteht ein elektrisches Wechselfeld, ähnlich der Kielwelle eines Schiffs. Diese Welle beschleunigt die Elektronen aus dem Plasma. Die zu Paketen gebündelten Teilchen (grün) fliegen weiter in den sogenannten Undulator, wo sie durch die abwechselnd angeordneten Magnete auf einen Slalomkurs gezwungen werden. Dabei senden die Teilchen in jeder Kurve Licht aus. Nur wenn die Elektronen mit dem Licht in perfekter Weise wechselwirken, entstehen die gewünschten Laserpulse. Den Fachleuten des HZDR ist es in Kooperation mit dem französischen Synchrotron SOLEIL erstmals gelungen, ein gut kontrollierbares Laserlicht im ultravioletten Bereich per Plasmabeschleunigung zu erzeugen. Ihr nächstes Ziel: Die Elektronen deutlich stärker zu beschleunigen, um hochintensive Röntgenblitze, wie sie in der Forschung gefragt sind, zu produzieren.





„SPIN2030 – das sind unsere Hochschulen und Forschungseinrichtungen mit klugen Köpfen, die mit Dynamik und Kreativität unterwegs sind: zu neuen wissenschaftlichen Durchbrüchen, die unsere Welt verändern werden. Bis zum Jahr 2030 werden mindestens 17 Milliarden Euro in unsere Wissenschaftslandschaft investiert. So kann Sachsens Spitzenposition in der Forschung langfristig gesichert und ausgebaut werden. Wir setzen Schwerpunkte unter anderem in den Feldern:

- Robotik und Mensch-Maschine-Interaktion
- Biotechnologie und Genetik
- Pharmazie und Krebsforschung
- Energie und Wasserstoff
- Künstliche Intelligenz und Quantencomputing
- Mikroelektronik und Halbleitertechnologien
- Materialforschung und Leichtbau

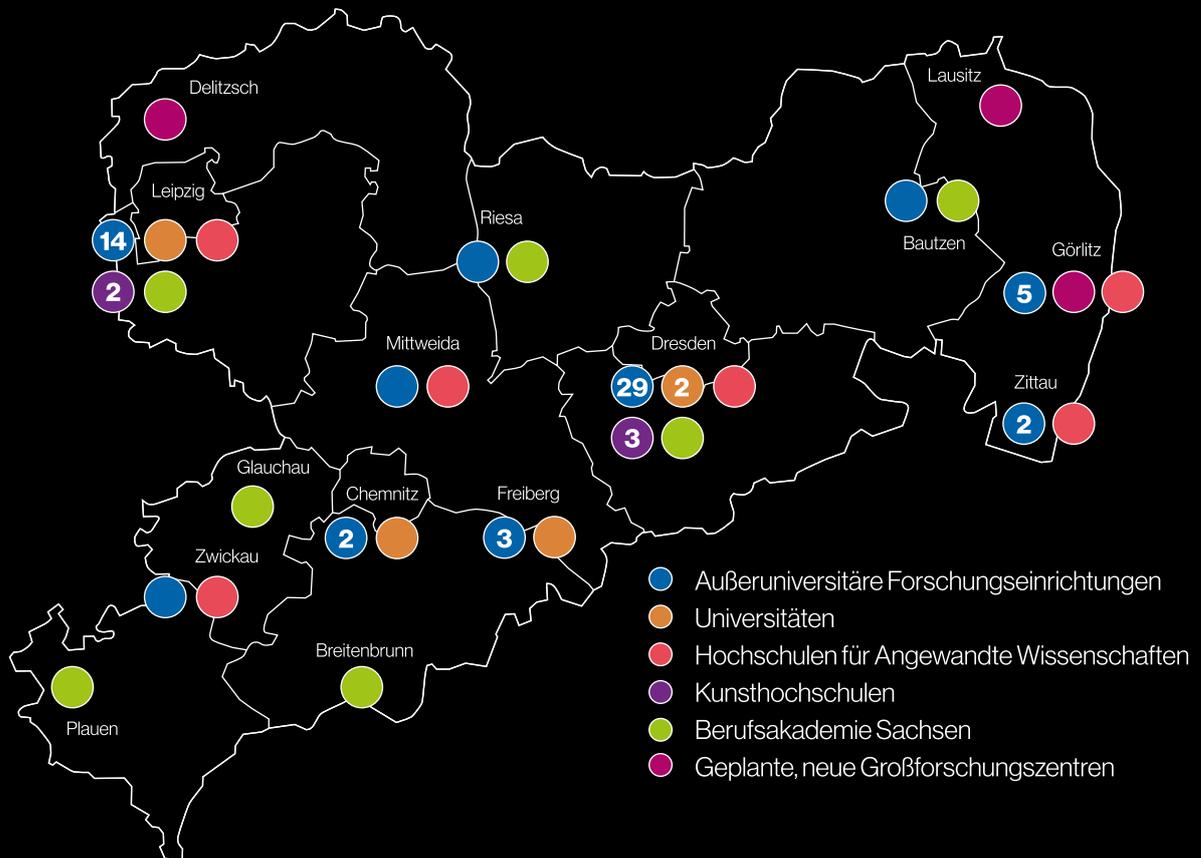
Dabei sind uns auch der Ausbau strategischer Kooperationen und der Transfer in Wirtschaft und Gesellschaft ein großes Anliegen.“

Sebastian Gemkow
Sächsischer Wissenschaftsminister

Freistaat Sachsen

Hochschul- und Forschungsstandorte

Über **SPIN2030** wird das Wissenschaftsland sichtbar – mit einer interaktiven Karte, Kampagnen, Veranstaltungen und vielem mehr.



Nichts mehr verpassen im Wissenschaftsland!

