

TU GRAZ *research*



Biomechanik: Die Vermessung des Menschen *Biomechanics: Measuring the Human Body*

Zu einer physikalischen Theorie der Plastizität ■ Protein- und Zell-Engineering für umweltfreundliche biokatalytische Prozesse ■ Probabilistische Methoden in Analysis und Zahlentheorie ■ Nachhaltiges Konzept zur dezentralen Wasserstoffproduktion ■ Ein Leben ohne CO₂-Emissionen: Was bedeutet das für den Bausektor?

Towards a Physical Theory of Plasticity ■ Protein and Cell Engineering for Eco-Friendly Biocatalytic Processes ■ Probabilistic Methods in Analysis and Number Theory ■ Sustainable Solution for Decentralised Hydrogen Production ■ A Life without CO₂ Emissions: What Does This Mean for Our Buildings?

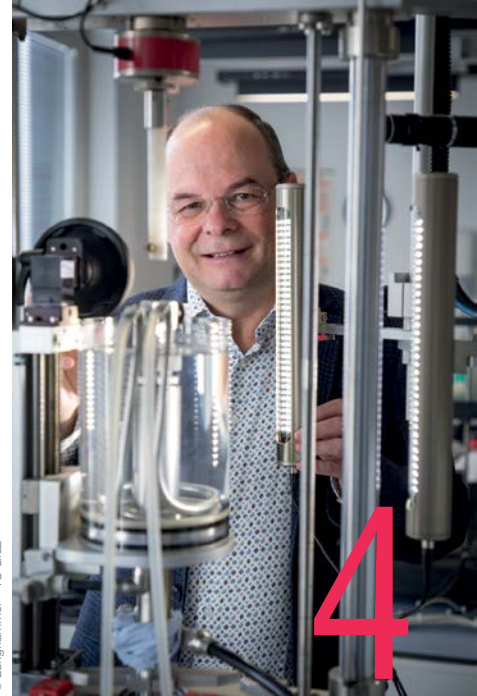
Inhalt / Contents

3 Vorwort / Preface

On the Top

4 Biomechanik: Die Vermessung des Menschen *Biomechanics: Measuring the Human Body*

© Linghammer – TU Graz



Fields of Expertise

WISSENSCHAFTERINNEN UND WISSENSCHAFTLER PRÄSENTIEREN AUSGEWÄHLTE PROJEKTE UND FORSCHUNGSBEREICHE IM RAHMEN DER FÜNF FIELDS OF EXPERTISE (FoE)

SCIENTISTS PRESENT SELECTED PROJECTS AND RESEARCH AREAS IN THE FRAMEWORK OF THE FIVE FIELDS OF EXPERTISE (FoE)

10 Advanced Materials Science Peter Hadley

11 Zu einer physikalischen Theorie der Plastizität *Towards a Physical Theory of Plasticity* Thomas Hochrainer

14 Human & Biotechnology Gernot Müller-Putz

15 Protein- und Zell-Engineering für umweltfreundliche biokatalytische Prozesse *Protein and Cell Engineering for Eco-Friendly Biocatalytic Processes* Robert Kourist

18 Information, Communication & Computing Kay Uwe Römer

19 Probabilistische Methoden in Analysis und Zahlentheorie *Probabilistic Methods in Analysis and Number Theory* Christoph Aistleitner

22 Mobility & Production Helmut Eichlseder

23 Nachhaltiges Konzept zur dezentralen Wasserstoffproduktion *Sustainable Solution for Decentralised Hydrogen Production* Viktor Hacker, Sebastian Bock, Robert Zacharias

26 Sustainable Systems Urs Leonhard Hirschberg

27 Ein Leben ohne CO₂-Emissionen: Was bedeutet das für den Bausektor? *A Life without CO₂ Emissions: What Does This Mean for Our Buildings?* Alexander Passer, Martin Röck

Life

FORSCHUNG UND TECHNIK IM ALLTÄGLICHEN – WIE FORSCHUNGSERGEBNISSE AUF UNSER LEBEN WIRKEN UND ES VERBESSERN KÖNNEN

RESEARCH AND TECHNOLOGY IN EVERYDAY LIFE: HOW RESULTS OF RESEARCH AFFECT OUR LIVES AND CAN IMPROVE THEM

30 Eine neue Thermohülle für alte Häuser *A New Thermal Shell for Old Houses*

Cooperations

GEMEINSAM FORSCHEN UND ENTWICKELN – WIE SPEZIALISIERTE INTERDISZIPLINÄRE ZUSAMMENARBEIT IN ERFOLG UND WEITERENTWICKLUNG RESULTIERT

CONDUCTING RESEARCH AND DEVELOPMENT TOGETHER: HOW INTERDISCIPLINARY COOPERATION BETWEEN EXPERTS LEADS TO SUCCESS AND FURTHER DEVELOPMENT

33 Überhaupt nicht diskret *Not At All Discrete*

Internationalisation

EXZELLENTRE FORSCHUNG STREBT NACH LEBENDIGEM AUSTAUSCH IN GLOBALEN NETZWERKEN – WIE DIE TU GRAZ DEN INTERNATIONALEN FORSCHUNGSDIALOG LEBT

EXCELLENT RESEARCH ASPIRES TO A LIVELY EXCHANGE IN THE GLOBAL NETWORK: GRAZ UNIVERSITY OF TECHNOLOGY AND INTERNATIONAL RESEARCH DIALOGUE

36 Mit Thinface zum internationalen Doktorat *An International PhD via Thinface*



Horst Bischof
Vizerektor für Forschung
Vice Rector for Research

**Liebe Kolleginnen und Kollegen, sehr geehrte Forschungspartnerinnen und -partner
und an unserer Forschung Interessierte!**

Dear colleagues, research partners and those interested in our research,

Nach zwei „Special Issues“ des TU Graz *research* geht es zurück zum gewohnten Format, in dem wir wieder die herausragende Forschung in unseren Fields of Expertise ins Zentrum rücken wollen.

Apropos Spitzenforschung: Mit einer hochkarätig besetzten, internationalen Jury aus Expertinnen und Experten konnten wir kürzlich den Auswahlprozess für die von der TU Graz finanzierten Leadprojekte abschließen. Da uns die vier hervorragenden Einreichungen die Auswahl nicht leicht gemacht haben, wurden diesmal zwei statt nur einer Förderung vergeben. Ein Projekt startet wie geplant im Jänner 2018 – eines dann im Sommer 2018. In Summe geben wir in den nächsten drei Jahren 3,5 Millionen Euro für diese beiden Projekte aus.

Das Leadprojekt „Mechanics, Modeling and Simulation of Aortic Dissection“ wird von einem fakultätsübergreifenden Konsortium von TU Graz-Forschenden unter der Leitung von Gerhard A. Holzapfel, Leiter des Instituts für Biomechanik, und Katrin Ellermann, Leiterin des Instituts für Mechanik, betrieben. Es widmet sich der Weiterentwicklung von rechnerischen Simulationsmethoden, um Aortendissektionen besser beschreiben und behandeln zu können. Gerhard A. Holzapfels Arbeit wird ab Seite 4 portraitiert. Im zweiten Leadprojekt „Porous Materials @ Work“ arbeitet ein multidisziplinäres Konsortium von 14 TU Graz-Forschenden an Grundlagenerkenntnissen und neuen Anwendungen poröser Materialien. Geleitet wird es von Paolo Falcaro, dem stellvertretenden Leiter des Instituts für Physikalische und Theoretische Chemie, gemeinsam mit Christian Slugovc, Institut für Chemische Technologie von Materialien, und Egbert Zojer, Institut für Festkörperphysik. Poröse Materialien zählen aufgrund ihrer Vielseitigkeit mit zu den zukunftsfähigsten Materialien und sind schon heute auf dem Gebiet der Sensorik, Mikroelektronik, Energiespeicherung, bei der Produktion von Pharmazeutika und in vielen weiteren Anwendungsgebieten nicht mehr wegzudenken.

Neben den Leadprojekten möchte ich auch die „Gender & Diversity“-Stipendien erwähnen, die am Internationalen Frauentag ausgeschrieben und kürzlich überreicht wurden. Die je 1.000 Euro gingen an Stephan Bauer, Alina Kratzer, Marianne Kraut, Johanna Pirker und Matthias Wolf. Besonders beeindruckt hat mich die ungeheure Breite der diesbezüglichen Forschung. Sie ist ein eindrucksvolles Zeichen, wie sehr „Gender & Diversity“-Aspekte die Forschung befruchten können.

Hoffentlich bleibt Ihnen während der Feiertage auch etwas Zeit, in diesem Magazin zu schmökern. Ich wünsche bei der Lektüre viel Freude, frohe Weihnachten und einen guten Rutsch.

After two “special issues” of TU Graz research, we’re now back to our tried and trusted format again, and once more focusing on the outstanding research in our Fields of Expertise.

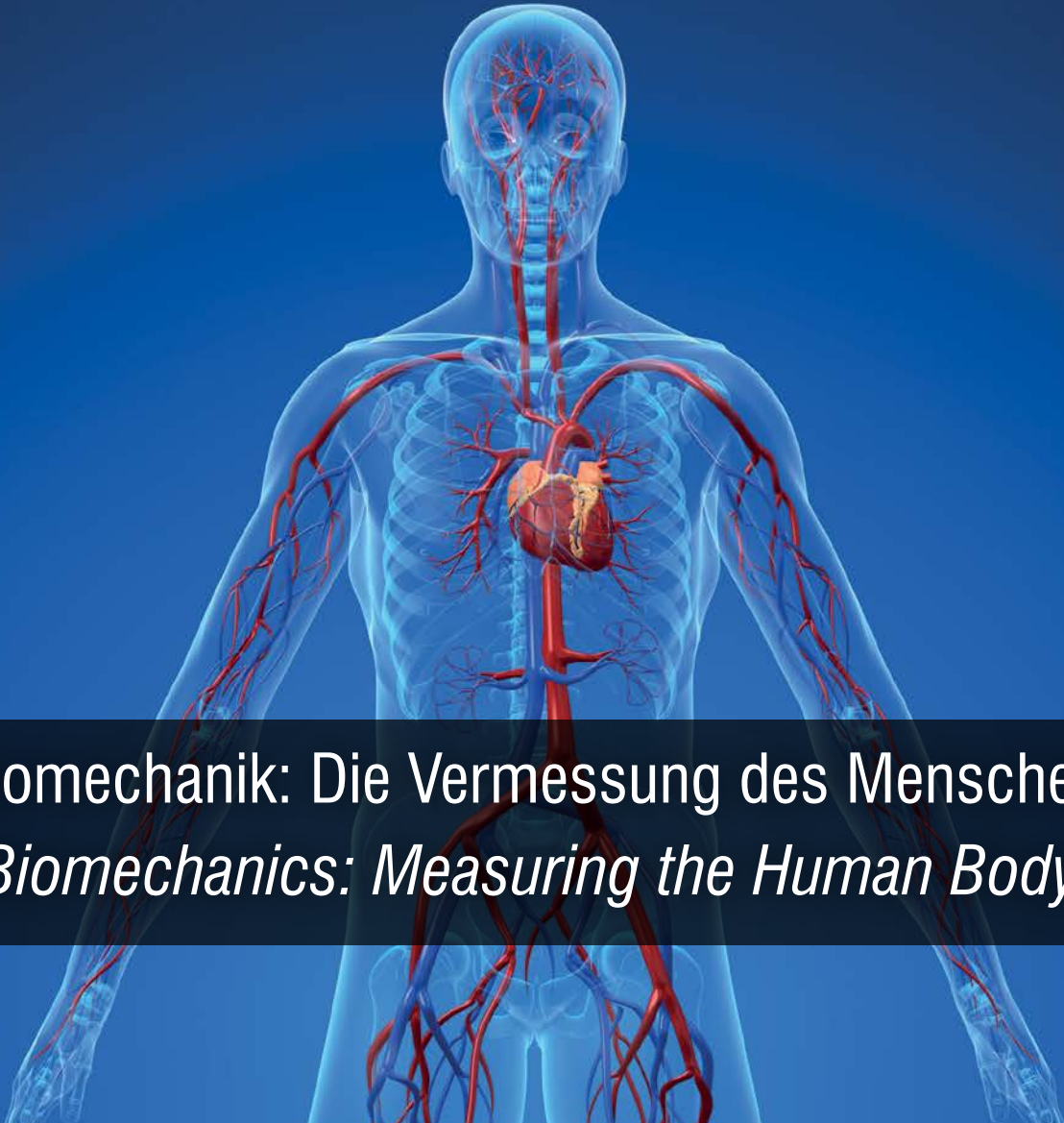
Apropos top research: with an international jury of top-class experts, we have recently been able to complete the selection procedure for the lead projects to be funded by TU Graz. Since the four submitted projects – all outstanding – did not make it easy for us, this time two grants have been awarded instead of only one. One project will commence as planned in January 2018, and one in summer 2018. Altogether we will be funding these two projects to the tune of 3.5 million euros over the next three years.

The lead project “Mechanics, Modeling and Simulation of Aortic Dissection” will be run by a cross-faculty consortium of researchers from TU Graz led by Gerhard A. Holzapfel, head of the Institute of Biomechanics, and Katrin Ellermann, head of the Institute of Mechanics. It is dedicated to further developing computer simulation methods in order to be able better to describe and treat aortic dissections. Gerhard A. Holzapfels work is portrayed at page 4. In the second lead project “Porous Materials @ Work”, a multidisciplinary consortium consisting of 14 TU Graz researchers will be working on the basic research findings and new applications of porous materials. This will be led by Paolo Falcaro, deputy head of the Institute of Physical and Theoretical Chemistry, together with Christian Slugovc, of the Institute for Chemistry and Technology of Materials, and Egbert Zojer, of the Institute of Solid State Physics. Due to their versatility, porous materials count among the most future-oriented materials and even today are indispensable in sensor technology, microelectronics, energy storage and the production of pharmaceuticals as well as in many other areas of application.

In addition to the lead projects, I would like to mention the Gender and Diversity Awards: these were advertised on International Women’s Day and recently handed over to the beneficiaries. A lump sum of 1,000 euros per person were awarded to Stephan Bauer, Alina Kratzer, Marianne Kraut, Johanna Pirker and Matthias Wolf. I was particularly struck by the tremendous breadth of this research. It is an impressive testament as to how aspects of gender and diversity can stimulate research.

Hopefully you’ll find some time on your hands to browse through our magazine during the holidays. I trust you’ll enjoy reading this new issue, and I wish you a merry Christmas and a good start to the new year.

Horst Bischof



Biomechanik: Die Vermessung des Menschen

Biomechanics: Measuring the Human Body

Herz-Kreislauf-Erkrankungen wie Herzinfarkt und Schlaganfall sind die häufigsten Todesursachen in Europa. Die Grundlagenforschung am Institut für Biomechanik der TU Graz liefert mit ingenieurwissenschaftlichen Methoden die Basis dafür, diese Erkrankungen in Zukunft gezielter zu therapieren und postoperative Komplikationen zu verringern.

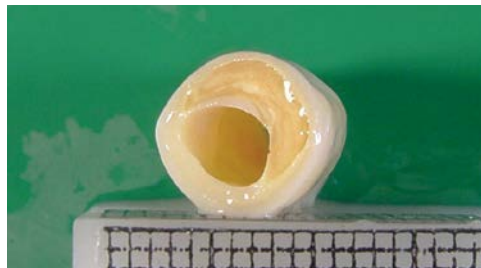
Alles fließt: Unsere Gefäße sind nichts anderes als dünne elastische Rohre, durch die sich Blut ständig seinen Weg bahnt, um Organe und Gewebe mit Sauerstoff zu versorgen. Und genauso wie Rohre verstopfen können und Reibungen sowie Spannungen ausgesetzt sind, verändern sich unsere Blutgefäße im Laufe des Lebens: Die Elastizität nimmt ab, Kalk und Fett lagern sich an den Wänden der „Biorohre“ ab. Dadurch verengen sie sich, was man als Atherosklerose bezeichnet. Über kurz oder lang kann so nicht mehr genügend sauerstoffreiches Blut zu den Geweben fließen. Auch der Herzmuskel – eine elektromechanische Pumpe – büßt nach und nach seine Pumpleistung ein. Die Folgen können Herz-Kreislauf-Erkrankungen wie Herzinfarkt und Schlaganfall sein – die häufigsten Todesursachen in Europa.

Cardiovascular diseases like heart attack and strokes are the most common cause of death in Europe. The basic research at TU Graz's Institute of Biomechanics will provide a basis – using engineering methods – to treat these illnesses in a more targeted way in the future and to reduce postoperative complications.

Everything flows. Our vessels are nothing but thin elastic pipes through which blood constantly circulates to supply organs and tissues with oxygen. And just as pipes can get clogged and exposed to friction and stresses, so do blood vessels change in the course of our lives. Elasticity is diminished, and calcium and fat are deposited on the walls of these “biological pipes”, making them gradually narrower – what is known as atherosclerosis. Sooner or later not enough oxygen-rich blood can flow to the tissues. Also, the pumping efficiency of the heart muscle, which is nothing but an electromechanical pump, slowly decreases. The consequences can be cardiovascular diseases, such as heart attacks and strokes – the most common causes of death in Europe.

Mit Herz und Mathematik

Wie sich kardiovaskuläre Gewebe wie Blutgefäße oder der Herzmuskel im Laufe des Lebens, bei einer Erkrankung und nach einer Operation genau verändern, ist von Mensch zu Mensch verschieden. Vieles liegt noch im Dunkeln. Die relativ junge Wissenschaft der Biomechanik schließt hier als Schnittstelle zwischen Medizin und Technik erfolgreich an: Die Forschenden am Institut für Biomechanik der TU Graz nutzen ingenieurwissenschaftliche Berechnungsmethoden, um menschliche „Rohre“ und „Pumpen“ genau zu beschreiben. „Zunächst untersuchen und charakterisieren wir die Materialeigenschaften weicher biologischer Gewebe wie beispielsweise Blutgefäße und Herzgewebe bei Belastung. Dazu vermessen wir in eigens entwickelten Versuchsapparaturen Proben von gesunden und kranken Geweben“, erklärt Gerhard A. Holzapfel, der das Institut für Biomechanik leitet. Das Institut verfügt unter anderem über Appara-



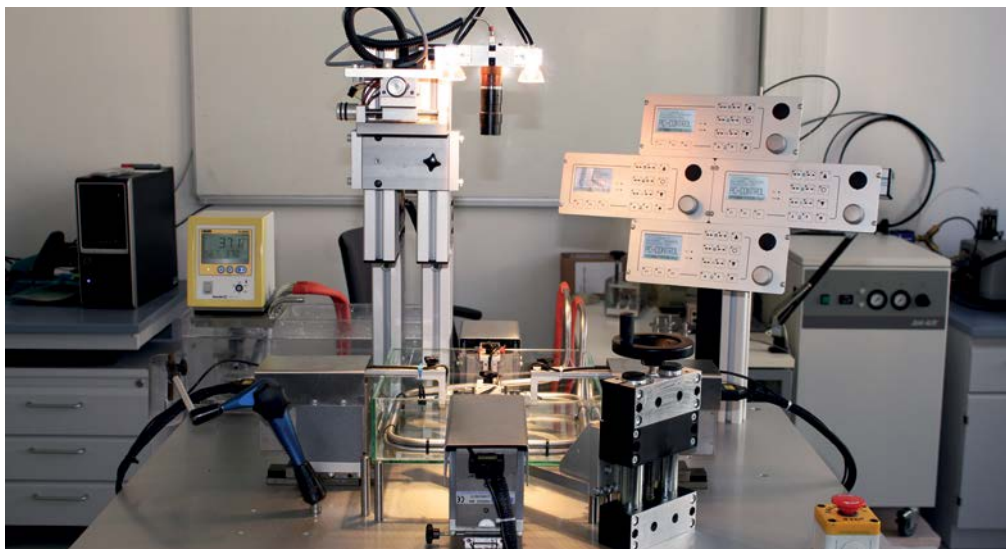
© Institut für Biomechanik

With heart – and mathematics

How exactly cardiovascular tissues such as blood vessels or the heart muscle change in the course of a lifetime, during disease and after an operation, differs from person to person. Much is still unknown. And this is where the relatively recent science of biomechanics comes in – as an interface between medicine and technology. Researchers at TU Graz’s Institute of Biomechanics are using engineering methods of calculation to describe human “pipes” and “pumps”. “At first we examine and characterise the material properties of soft biological tissue like

Abbildung 1:
 An den Wänden der Blutgefäße können sich Kalk und Fett ablagern, wie hier an einer menschlichen Beckenarterie. Die dadurch entstehenden Verengungen werden als Atherosklerose bezeichnet, die in Folge zu schwerwiegenden Herz-Kreislauf-Erkrankungen führen kann.

Figure 1:
Calcium and fat are deposited on the walls of the blood vessels, as can be seen here on a human iliac artery. The narrowing caused by this is called atherosclerosis, and can lead to serious cardiovascular diseases.



© Institut für Biomechanik

Abbildung 2:
 Vom Institut für Biomechanik entwickelte Versuchsapparatur der TU Graz, mit der das mechanische Verhalten von Gewebe bei Belastung untersucht wird.

Figure 2:
Test apparatus developed by the Institute of Biomechanics of TU Graz by which the mechanical behaviour of tissue under stress can be examined.

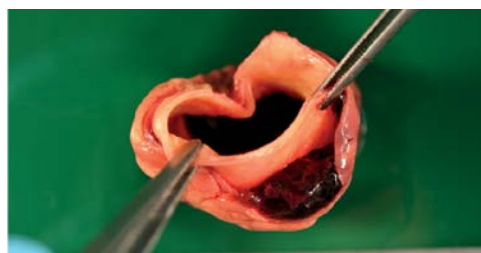
turen für bi- und triaxiale Zug- und Scherversuche, mit denen Gewebe in zwei und drei verschiedene Richtungen belastet wird. Die Ergebnisse dienen als Grundlage für geeignete Materialparameter und für computerunterstützte Modellierungen, mit denen sich Gewebeveränderungen grafisch darstellen lassen.

Von der Theorie zur Praxis

Wie können die am Institut für Biomechanik gewonnenen Erkenntnisse nun in der Praxis genau helfen? Ein Beispiel ist eine effektivere und individuellere Therapie der Aortendissektion, als es bisher der Fall ist. Bei dieser Erkrankung kommt es zum Einriss der inneren Gefäßwand, Blut gelangt in die nächste Aortenschicht und es bildet sich eine Ausstülpung, die den Blutfluss in der Aorta ändert. Betroffene Gebiete werden nicht mehr ausreichend mit Sauerstoff versorgt, und es kann unter anderem zu einem Schlaganfall oder akutem Nierenversagen kommen. >

blood vessels and heart tissues under stress. In order to do that, samples of healthy and diseased tissues are measured in test devices which have been developed at the Institute” Gerhard A. Holzapfel, head of the Institute of Biomechanics, explains.

The Institute of Biomechanics has available, among other things, apparatus for bi- and tri-axial extension and shear tests, with which tissues can be exposed to stresses in three different directions. The results serve as a basis for computer-aided modelling by which tissue changes can be graphically represented. >



© Institut für Biomechanik

Abbildung 3:
 Bei der Aortendissektion kommt es zu einem Einriss der inneren Gefäßwand und Blutkörperchen gelangen in die nächste Schicht, wo sie eine Ausstülpung (falsches Lumen) bilden, oftmals mit einem eingelagerten Thrombus, wie hier in dem Bild.

Figure 3:
Aortic dissection is characterised by a tear in the inner wall of the vessel creating an eversion (false lumen), often with a thrombus, as can be seen in the picture.

Abbildung 4:
Ein Stent ist ein Drahtgeflecht, das in verengte oder dissektierte Arterien eingeführt wird.

Figure 4:
A stent is a wire mesh which is introduced into narrowed or dissected arteries.



Bei der chirurgischen Behandlung der Aortendissektion wird entweder ein Teil der Aorta ersetzt oder ein Stent implantiert, eine kleine gitterförmige Gefäßstütze, die das Gefäß offen hält. „Beide Ansätze bergen erhebliche Risiken und die Wahl der optimalen Methode beziehungsweise des besten Zeitpunktes für einen Eingriff stellt eine Herausforderung dar“, so Gerhard A. Holzapfel.

Grazer Know-how ist international gefragt

Die am Institut für Biomechanik entwickelten computerunterstützten Modellierungen im Rahmen des von den National Institutes of Health (NIH) finanzierten Grundlagenprojekts „AorDiss“ könnten zukünftig helfen, die bestmögliche Behandlungsmethode für den individuellen Fall zu finden.

Bereits existierende Computermodelle verwenden konventionelle Ansätze aus der numerischen Strömungsmechanik (CFD), bei denen Gefäßwand und Lappen als starr angenommen werden; die Interaktionen zwischen Blut und Gefäßgewebe oder die Effekte solcher Interaktionen auf die Dynamik einer eingerissenen Aorta können damit jedoch nicht erklärt werden.

From theory to practice

How exactly can the findings obtained at the Institute of Biomechanics help in practice? One example is the more effective and individual treatment for aortic dissection than was previously the case. This disease is characterised by a tear in the inner wall of the vessel. Blood flows into the next layer of the aorta and forms a bulge which changes the blood flow in the aorta. Various areas are no longer sufficiently supplied with oxygen, thus possibly leading to a stroke or acute kidney failure, among other things.

In the surgical treatment of an aortic dissection, either a part of the aorta is replaced or a stent implanted – a small, supportive mesh-like tube which keeps the vessel open. Both approaches bear considerable risks, and determining the optimum method or the best time for a surgical intervention always represents a challenge.

International demand

The computer-aided modelling which is being developed at the Institute of Biomechanics in the AorDiss project will help to find the best possible treatment method for individual cases in the future. The modelling is based on experimental tests comprising tissue samples from both healthy and diseased aortas. The data obtained will be used to run patient-specific simulations which should ultimately support clinical decision making.

In the framework of the NIH project in cooperation with the School of Medicine at New York University, USA, fluid-structure interaction models of both already

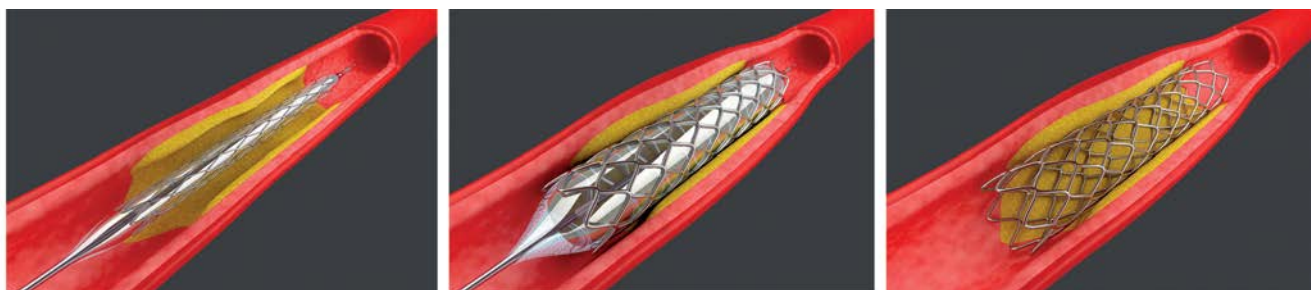


Abbildung 5:
Ein Ballonkatheter wird in das geschädigte Blutgefäß eingeführt und ein Stent (Drahtgeflecht) implantiert. Dadurch wird der Blutstrom zu Muskeln, zum Herzen und zu anderen Organen erhöht.

Figure 5:
A balloon catheter is introduced into the damaged blood vessel and a stent (wire mesh) implanted. This results in increased blood flow to the muscles, heart and other organs.

Im Rahmen des NIH-Projekts in Kooperation mit der School of Medicine an der New York University in den USA werden an der TU Graz Fluid-Struktur-Wechselwirkungsmodelle von sowohl bereits dissektierten Aorten als auch dissektierenden Aorten entwickelt, die die Probleme und Einschränkungen der CFD-Modelle umgehen. Realistische anatomische Geometrien der Patientinnen und Patienten werden aus Computertomographie- oder Magnetresonanztomographiestudien abgeleitet. Um das mechanische Verhalten und die Brucheigenschaften des menschlichen Aortengewebes zu bestimmen, führen die Forschenden experimentelle Versuche durch, die sowohl Gewebeproben von ge-

dissected aortas and aortas that are in the process of dissecting are being developed at TU Graz. These avoid the problems and limitations of CFD models. Realistic anatomical geometries of patients are being derived from computer tomography and MRI studies. To determine the mechanical behaviour and fracture properties of human aortic tissue, researchers are carrying out experiments which include tissue samples from both healthy and diseased human aortas.

Treatment is becoming more individual

“The experimental data will then be used to develop health and disease-specific models which

sunden als auch von kranken menschlichen Aorten umfassen.

Therapien werden individueller

„Die experimentellen Daten werden dann verwendet, um gesundheits- und krankheitsspezifische Modelle zu entwickeln, die innovative Modelle der Gewebszerstörung und des Gewebeversagens beinhalten. So können patient/innenspezifische Simulationen durchgeführt werden, die letztlich die klinische Entscheidungsfindung unterstützen sollen“, erklärt Gerhard A. Holzapfel. Des Weiteren dienen diese Modelle dazu, das chirurgische und medizinische Management von Patientinnen und Patienten zu studieren, die von einer Aortendissektion oder anderen arteriellen Krankheiten wie der Aneurysmaruptur betroffen sind.

Leadprojekt der TU Graz

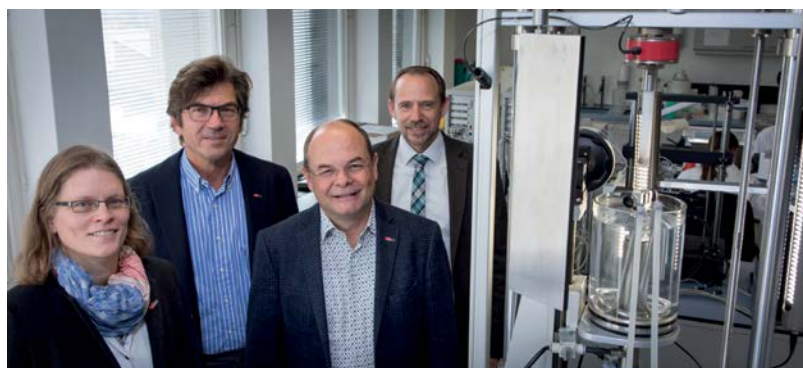
Der Weiterentwicklung der Computersimulation von Aortendissektionen wird sich Gerhard A. Holzapfel gemeinsam mit Katrin Ellermann, Leiterin des Instituts für Mechanik, und einem fakultätsübergreifenden Konsortium an Forschenden der TU Graz auch in einem von zwei gerade genehmigten und von der TU Graz finanzierten Leadprojekten widmen. Starten wird das Projekt „Mechanics, Modeling and Simulation of Aortic Dissection“ im Jänner 2018. Ziel ist es, umfassende Simulationsmodelle und Algorithmen zu entwickeln, die in der Diagnose und Behandlung richtungsweisend unterstützen können. „Mit der Integration von TU Graz-Forschenden aus den verschiedensten Fachrichtungen – von der Strömungsmechanik über die Festigkeitslehre bis hin zur Statistik – beschreiten wir einen völlig neuen Weg in der umfassenden Betrachtung dieses klinischen Phänomens und erwarten uns daher auch neue Erkenntnisse zu dessen Diagnose und Behandlung“, erklärt Holzapfel.

Auf Basis von nichtinvasiven medizinischen Bildgebungsverfahren will man ein mehrstufiges Simulationsmodell entwickeln, das die Struktur und den Aufbau der geschädigten Aortenwand ebenso berücksichtigt wie das Strömungsverhalten des Blutes sowie individuelle Parameter der Patientin oder des Patienten. „Wir haben hier ein klinisches Phänomen, das uns technisch vor große ingenieurwissenschaftliche Herausforderungen stellt, denn die Modelle und Algorithmen, die wir zur Simulation benötigen, müssen großteils erst von uns entwickelt werden“, erklärt Holzapfel. Die Simulationsmodelle sollen in weiterer Folge mittels Virtual-Reality-Technologie visualisiert werden. Das Konsortium kooperiert mit namhaften nationalen und internationalen Partnern, darunter dem Graz Center of Computational Engineering (GCCE) an der TU Graz, das Grundlagenforschung auf dem Gebiet der computergestützten Simulation betreibt. >

include innovative models of tissue destruction and tissue failure. In this way patient-specific simulations can be carried out which should ultimately support clinical decision making,” explains Gerhard A. Holzapfel. Furthermore, these models will serve to study the surgical and medical management of patients affected by aortic dissection and other arterial diseases, such as ruptured aneurysms.

TU Graz lead project

Gerhard A. Holzapfel together with Katrin Ellermann, head of the Institute of Mechanics, and a cross-faculty consortium of TU Graz researchers will dedicate themselves to further developing the computer simulation of aortic dissections in one of two lead projects which have just been approved and funded by TU Graz. The project “Mechanics, Modeling and Simulation of Aortic Dissection” will start in January 2018. The aim of this lead project is to develop comprehensive simulation models and algorithms to support diagnosis and treatment in a pioneering way. “By integrating TU Graz researchers



© Lunghammer – TU Graz

from different specialisations – from fluid mechanics and mechanics of materials to statistics – we’re treading a completely new path in a comprehensive examination of this clinical phenomenon, and as a result we expect to obtain new findings on diagnosis and treatment,” explains Holzapfel.

On the basis of non-invasive medical imaging techniques, researchers will develop a multi-stage simulation model which will take into account both the structure and composition of the damaged aorta wall as well as the flow behaviour of the blood and individual patient parameters. “What we have here is a clinical phenomenon which presents us with great engineering challenges, since most of the models and algorithms which we need for the simulation we will first have to develop,” explains Holzapfel. The simulation models will subsequently have to be visualised using virtual-reality technology. The consortium works together with well-known national and international partners, among which is the Graz Center of Computational Engineering (GCCE) at TU Graz, which carries out basic research in the area of computer-aided simulation. >

Abbildung 6:
Der inter-fakultären Forschenden-
gruppe des Leadprojekts
„Mechanics, Modeling and
Simulation of Aortic Dissection“
gehören Forschende aus fünf
Fakultäten und zehn Instituten
der TU Graz an, darunter Katrin
Ellermann, Wolfgang von der
Linden, Thomas Hochrainer und
Gerhard A. Holzapfel.

Figure 6:
The cross-faculty research group
of the lead project “Mechanics,
Modeling and Simulation of Aortic
Dissection” includes researchers
from five faculties and ten
institutes of TU Graz, including
Katrin Ellermann, Wolfgang von
der Linden, Thomas Hochrainer
und Gerhard A. Holzapfel.



Pionier der Biomechanik

Gerhard A. Holzapfel wurde 1961 in Frohnleiten, Steiermark, geboren. Er studierte Bauingenieurwesen an der TU Graz und promovierte im Bereich Maschinenbau, bevor er sich 1996 an der TU Wien im Fachbereich „Allgemeine Mechanik“ habilitierte. Ab 1998 leitete er die Arbeitsgruppe „Computational Biomechanics“ an der TU Graz, bis er 2004 den Ruf an das renommierte schwedische „Royal Institute of Technology“ in Stockholm annahm.

2007 kehrte der Steirer an die TU Graz zurück, wo er heute das Institut für Biomechanik leitet. Zudem ist er Adjunct Professor an der „Norwegian University of Science and Technology“ in Trondheim, Norwegen, und Gastprofessor an der University of Glasgow, Schottland.

Gerhard A. Holzapfel wurde mit zahlreichen nationalen und internationalen Ehrungen ausgezeichnet, unter anderem mit dem Erwin-Schrödinger-Preis der Österreichischen Akademie der Wissenschaften und mit der Aufnahme in die Academia Europaea. Er ist einer der meistzitierten Forschenden seiner Fachdisziplin.

Text: Ulrike Keller ■

Pioneer of biomechanics

Gerhard A. Holzapfel was born in Frohnleiten, Styria, in 1961. He studied civil engineering at TU Graz and obtained his doctorate in the field of mechanical engineering before qualifying as a professor at TU Wien in the field of “general mechanics” in 1996. From 1998 he led the Computational Biomechanics Working Group at TU Graz until taking up an appointment at the well known Royal Institute of Technology in Stockholm in 2004.

He returned to TU Graz in 2007 where he now heads the Institute of Biomechanics. He is also adjunct professor at the Norwegian University of Science and Technology at Trondheim, Norway, and visiting professor at the University of Glasgow, Scotland.

Gerhard A. Holzapfel has been awarded numerous national and international honours, among others the Erwin Schrödinger Prize of the Austrian Academy of Sciences and membership of the Academia Europaea. He is one of the most cited researchers in his subject area.

Text: Ulrike Keller ■

Abbildung 7:
Gerhard A. Holzapfel leitet das Institut für Biomechanik der TU Graz und ist einer der meistzitierten Forschenden seines Fachgebiets.

Figure 7:
Gerhard A. Holzapfel heads TU Graz's Institute of Biomechanics and is one of the most cited researchers in his field.

Advanced Materials Science



Peter Hadley, Leitungsteam FoE
„Advanced Materials Science“
Peter Hadley, executive team FoE
Advanced Materials Science

Poröse Materialien haben eine Vielzahl interessanter und nützlicher Eigenschaften. Ihre offene Struktur bedingt im Vergleich zum Gewicht hervorragende mechanische Eigenschaften und außerdem niedrige thermische Leitfähigkeiten. Über den Grad ihrer Porosität lassen sich Eigenschaften wie Brechungsindices oder Wärmeleitkoeffizienten gezielt einstellen.

Poröse Materialien lassen sich einsetzen, um Flüssigkeiten zu pumpen, zu filtern und zu trennen. Das sie auszeichnende große Verhältnis zwischen Oberfläche und Volumen erlaubt ihren Einsatz in der Katalyse oder als Elektroden in Batterien. Die Forschungsaktivitäten zu porösen Materialien innerhalb des FoE haben in letzter Zeit signifikant zugenommen. Dafür ist insbesondere die Berufung von Paolo Falcaro ans Institut für Physikalische und Theoretische Chemie verantwortlich. Dort beschäftigt er sich seit 2016 mit metallorganischen Gerüstmaterialien (metal-organic frameworks), mit mesopörischen Materialien und mit funktionellen Nanopartikeln. Aus der Diskussion, wie die von Paolo Falcaro bearbeiteten Fragestellungen in die Grazer Forschungslandschaft passen könnten, hat sich herauskristallisiert, dass eigentlich schon viele Aktivitäten zu verschiedensten Arten von porösen Materialien verfolgt werden und dass sie massiv gestärkt werden könnten, wenn es gelänge, die involvierten Gruppen zu bündeln. Deshalb wurde im Rahmen der Leadprojekt-Initiative der TU Graz ein Projekt zu porösen Materialien beantragt. Dessen Ziele sind das Design neuartiger poröser Materialien, die Untersuchung der für ihr Wachstum relevanten Selbstassemblierungsprozesse und die Analyse ihrer Anwendungsmöglichkeiten im Bereich der Biochemie und der Sensorik. Dieser Antrag war erfolgreich und die durch das Projekt finanzierten Forschungsarbeiten werden Mitte 2018 starten.

Zusätzlich wurde Raffaele Riccò die Marie-Sklodowska-Curie-Fellowship zur Studie der Einbettung von Biomakromolekülen in ultraporöse metallorganische Gerüstmaterialien zuerkannt. Die Vorbereitung des Projektantrags wurde durch Anschubfinanzierungen aus dem FoE unterstützt.

Porous materials have a number of interesting and useful properties. Their open structure gives them a high strength-to-weight ratio and a low thermal conductivity. Changing the porosity of a material makes it possible to tune properties like the index of refraction and the thermal expansion coefficient.

Porous materials can be used to pump, filter, and separate liquids. Their large surface-to-volume ratios make them useful in catalysis applications and for electrodes in batteries. There has recently been an expansion of the porous materials activities within the FoE. Interest in this field was sparked by the arrival in 2016 of Paolo Falcaro who joined the Institute of Physical and Theoretical Chemistry as a full professor to work on metal organic frameworks (MOFs), meso-porous materials and functional nanoparticles. In the ensuing discussions on how Falcaro would fit in to the research community at the TU Graz, there was a realization that there were already many ongoing investigations into porous materials and that these could be strengthened by bringing the various groups working on porous materials together. Therefore, a lead project on porous materials was proposed to design novel materials, to study growth and self-assembly in porous systems, and to explore possible applications in sensing and biochemistry. This proposal was successful and the team is preparing to get started.

In addition, Raffaele Riccò was recently awarded a Marie Skłodowska Curie fellowship to investigate the embedding of biomacromolecules into ultra-porous Metal Organic Frameworks. The FoE provided Riccò with Initial Funding Grants to prepare his proposal.

Zu einer physikalischen Theorie der Plastizität

Towards a Physical Theory of Plasticity

Thomas Hochrainer

Die plastische Verformbarkeit von Metallen ist eine Voraussetzung für den vielfältigen Einsatz von Metallen im Maschinen- und Fahrzeugbau. Umso erstaunlicher erscheint es, dass die Plastizität von Metallen bis heute ein nur unzureichend verstandenes Phänomen ist. Während elastische Materialeigenschaften von nicht zu komplexen Metalllegierungen heute mithilfe von quantenmechanischen Simulationen vorhergesagt werden können, gibt es noch keinen Weg, das plastische Verhalten aus grundlegenden Materialeigenschaften auf Kristallebene vorherzusagen.

Bleibende und damit plastische Verformungen von Kristallen entstehen durch die Bewegung linienhafter Defekte in der Kristallstruktur, die Versetzungen. Die Bewegung einzelner Versetzungen infolge von Spannungen im Material ist zumindest hinsichtlich einige Kristallklassen bereits gut verstanden. Allerdings enthalten die meisten Metalle sehr viele Versetzungen. In einem Kubikmillimeter Metall finden sich zwischen 1 und 10.000 km (!) Linienlänge von Versetzungen. Insbesondere in Metallen mit kubisch-flächenzentrierter Kristallstruktur (zum Beispiel austenitische Stähle und Aluminiumlegierungen) sind daher weniger die Eigenschaften der einzelnen Versetzung als vielmehr das kollektive Verhalten einer großen Zahl von Versetzungen bestimmend für die plastischen Eigenschaften. Aus kollektiven Effekten resultiert dabei sowohl das Verfestigungsverhalten von Metallen bei plastischer Verformung als auch die Ausbildung charakteristischer Versetzungsstrukturen, die insbesondere bei dauerhafter Wechselbelastung zur sogenannten Materialermüdung und damit zum Versagen von Bauteilen führen können.

Kontinuumstheorie

In vielen physikalischen Zusammenhängen (Diffusion, Fluidmechanik, Plasmaphysik etc.) können Kontinuumstheorien mithilfe der statistischen Mechanik und Thermodynamik mit dem >

The relative ease of plastically deforming metallic materials is a prerequisite for their widespread application in mechanical engineering. So it is surprising that the plastic deformation of metals has not been completely understood by now. While elastic characteristics of new alloys may nowadays be predicted from quantum mechanical simulations, there is still no way to predict the plastic behavior of metals from basic properties of the crystal structure.

The plastic properties of metals are controlled by the presence and characteristics of line-like crystal defects, so-called dislocations. The motion of dislocations in response to stresses in the material are for several classes of crystal structures well understood. But metals typically contain a very large amount of dislocations. A cubic millimeter of a metal contains between 1 and 10,000 km (!) line-length of dislocations. Especially for metals with face-centered cubic crystal structure (e.g. austenitic steels and aluminum alloys) it is therefore the collective behavior of many dislocations rather than the characteristics of single dislocations which control the plastic characteristics. The hardening behavior during plastic deformation as well as the emergence of characteristic dislocation structures are both due to collective effects on the dislocation level. To understand the emergence of dislocation structures is of enormous economic importance because dislocation structures may initiate material failure when subject to alternating loads.

Continuum theories

In many areas of physics (diffusion, fluid mechanics, plasma physics) the continuum theories of engineering sciences may be derived from the behavior of many single objects using methods from statistical mechanics and thermodynamics. Such a derivation of a continuum plasticity theory from dislocation theory has long been viewed as a hopeless endeavor in materials science. One important reason for this is the fact that dislocations are >



Thomas Hochrainer ist Leiter und Professor am Institut für Festigkeitslehre der TU Graz.

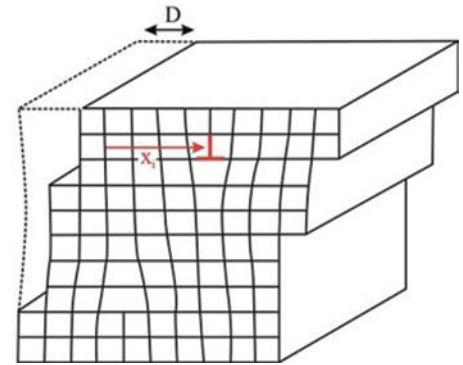
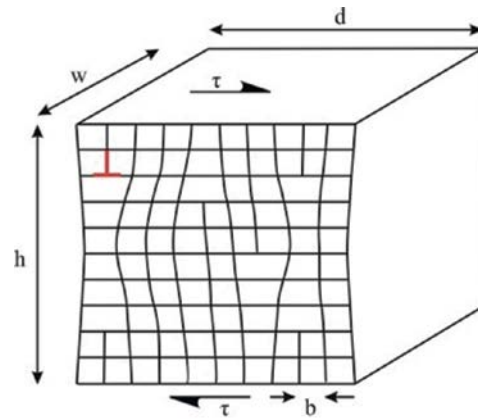
Thomas Hochrainer is head of and professor at the Institute of Strength of Materials of TU Graz.

Verhalten einer Großzahl von Einzelobjekten und ihrer Wechselwirkungen verknüpft werden. Eine solche Verknüpfung galt in der Plastizitätstheorie noch bis vor Kurzem als aussichtslos. Als eine wesentliche Hürde auf dem Weg zu einer Kontinuumstheorie der Versetzungen wurde schon vor Jahrzehnten die Tatsache identifiziert, dass Versetzungen bewegliche und flexible Kurven sind. Daher können die Methoden der Teilchenphysik nicht ohne Weiteres angewandt werden.

moving flexible lines, which obstructs the application of methods from particle physics. Only recently, Thomas Hochrainer, Institute of Strength of Materials at TU Graz, laid the foundations for the transfer of the methods from particle physics. He adopted the concept of alignment tensors from other continuum theories of extended objects to the dislocation case and derived evolution equations for the tensorial dislocation density variables which account for the kinematics of moving flexible lines.

Abbildung 1:
Schematische Darstellung der permanenten Scherung eines Kristalls, hervorgerufen durch die Bewegung sogenannter Stufenversetzungen.

Figure 1:
Schematic picture of the permanent shearing of a crystal produced by moving dislocations.



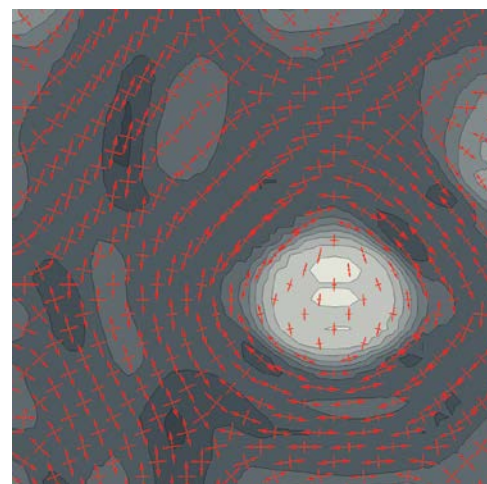
© Thomas Hochrainer

Durch die Übertragung des Konzepts der Ausrichtungstensoren auf Verteilungen von Versetzungen und der Ableitung von Erhaltungsgleichungen für diese Tensoren hat Thomas Hochrainer, Institut für Festigkeitslehre der TU Graz, kürzlich die Grundlage geschaffen, um die Kinematik der Versetzungsbewegung in einer versetzungs-basierten Kristallplastizitätstheorie zu erfassen. Im Rahmen der von der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderten Forschergruppe „Dislocation based plasticity“ mit interdisziplinären Partnerinnen und Partnern am Karlsruher Institut für Technologie (KIT), der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg und der Technischen Universität Bergakademie Freiberg arbeiten wir nun daran, in der Dichtetheorie kollektive Effekte durch Wechselwirkungen von Versetzungen zu berücksichtigen. Dazu werden Methoden der statistischen Mechanik und Thermodynamik von Vielteilchensystemen auf Versetzungssysteme übertragen.

Within the Research Unit “Dislocation based plasticity” funded by the German Science foundation (DFG), with interdisciplinary partners at Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg and Technische Universität Bergakademie Freiberg, we are currently working on including collective effects due to dislocation interactions in the continuum dislocation dynamics framework. This requires transferring statistical mechanics and thermodynamics methods from many particle systems to the dislocation case.

Abbildung 2:
Dichtediagramm der Versetzungsdichte zu Beginn der Strukturbildung. Hellgrau bedeutet niedrige und Dunkelgrau hohe Dichte. Die Paare orthogonaler roter Doppelpfeile zeigen die lokale Ausrichtung der Versetzungen an.

Figure 2:
Density plot of the total dislocation density in an early stage of dislocation pattern formation. Light grey means low density and dark grey high density. The orthogonal pairs of double-headed arrows indicate the local alignment of dislocations.



© Thomas Hochrainer

A surprising result from the continuum dislocation dynamics is the fact that the consideration of dislocation interactions naturally leads to the emergence of dislocation structures. The reason is that existing inhomogeneities get enhanced by a process similar to the emergence of traffic jams: where there is already a high dislocation density, dislocation becomes slowed down and contributes to a further accumulation of dislocations. Elastic interactions restrict the accumulation and determine the characteristic size of the emerging dislocation structures. The size of the structures was shown to scale as expected from experiments, that is, the size is proportional to the average dislocation spacing and inversely proportional to the applied stress.

Due to the consideration of dislocation interactions, the continuum dislocation dynamics theory becomes moreover size-dependent. This means that for specimens with dimensions on the order of the average dislocation spacing, the plastic characteristics turn out to be dependent on the absolute size. Note that classical continuum plasticity is size-scale

$$\partial_t \rho^{ij} = \left[-\varepsilon^{ik} \partial_k (v \kappa^j) + v Q^{ij} - \varepsilon^j_k \rho^{ikm} \partial_m v \right]_{\text{sym}}$$

© Thomas Hochrainer

Abbildung 3:
Entwicklungsgleichung des
Versetzungsausrichtungstensors
zweiter Stufe.

Figure 3:
*Evolution equation of the
dislocation alignment tensor of
second order.*

Zu unserer Überraschung führt die Berücksichtigung von Wechselwirkung automatisch zu einer Tendenz zur Ausbildung von Versetzungsstrukturen. Der Grund ist, dass bestehende Inhomogenitäten durch eine Art Verkehrsstaueffekt verstärkt werden: Da, wo der Versetzungsfluss bereits durch eine hohe Dichte von Versetzungen behindert ist, werden ankommende Versetzungen gebremst und tragen zur weiteren Akkumulation und damit zur Verstärkung der Bremswirkung bei.

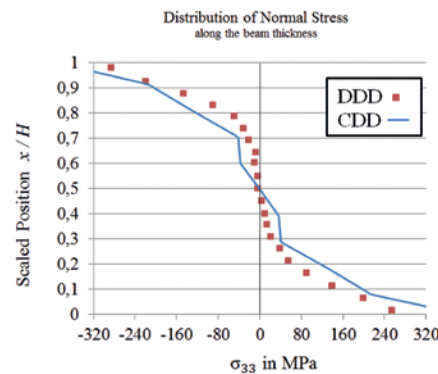
Elastische Wechselwirkungen begrenzen die Akkumulation und führen zu typischen Abmessungen der Strukturen. Die Abmessungen der aus der Kontinuumsversetzungsdynamik vorhergesagten Strukturen skalieren dabei wie experimentell erwartet mit dem mittleren Versetzungsabstand und invers zur anliegenden Spannung.

Durch die Berücksichtigung von Wechselwirkungen wird die resultierende Kontinuumsversetzungstheorie außerdem größenabhängig. Das bedeutet, dass für Probengrößen oder Bauteile, deren äußere Dimensionen in der Größenordnung des mittleren Versetzungsabstands sind, die plastischen Eigenschaften von der Größe des Objekts abhängen. Während die klassische Plastizitätstheorie keine Größeneffekte kennt, wurden Größeneffekte für die Plastizität auf kleinen Skalen vielfach experimentell nachgewiesen. Wir sind derzeit dabei, die Kontinuumsversetzungstheorie durch Vergleich mit Mikrotorsionsversuchen am KIT zu validieren.

Zukünftige Herausforderung

Als nächste große Herausforderung für die Kontinuumsversetzungsdynamik bleibt die Vorhersage der Verfestigung. Hier entstehen neue theoretische Herausforderungen, da sich durch sogenannte Versetzungsreaktionen die Topologie der Versetzungsnetzwerke laufend verändert, was in den bestehenden Entwicklungsgleichungen noch nicht berücksichtigt wird. ■

independent, but numerous size-effects have been observed in small-scale plasticity. We are currently in the course of validating the continuum dislocation theory by comparing it to micro-torsion experiments at KIT.



© Thomas Hochrainer

Abbildung 4:
Längsnormalspannung in einem
Mikrobalken unter Biegung.
Durchgehende Linie: berechnet
mit Kontinuumsversetzungs-
dynamik. Rote Symbole:
Ergebnis einer diskreten
Versetzungsdynamiksimulation
am KIT.

Figure 4:
*Longitudinal normal stress in a
micro beam during bending.
Solid line: results from
continuum dislocation dynamics
simulation. Red symbols:
results from discrete dislocation
dynamics simulations at KIT.*

Future challenges

The next big challenge in continuum dislocation theory is predicting work hardening. This introduces new theoretical challenges because the dislocation reactions involved in strain hardening lead to dynamic changes of the topology of the dislocation network, which are not yet reflected in the current evolution equations. ■

Human & Biotechnology



Gernot Müller-Putz, Leitungsteam FoE
„Human & Biotechnology“
Gernot Müller-Putz, executive team
FoE Human & Biotechnology

In der aktuellen Ausgabe des TU Graz *research* stellen wir zwei Forscherpersönlichkeiten der TU Graz in den Vordergrund: Gerhard A. Holzapfel, Institut für Biomechanik, und Robert Kourist, Institut für Molekulare Biotechnologie. Über den Sommer wurden die Einreichungen der TU Graz-internen

Leadprojekte evaluiert und kurz vor dem Semesterbeginn wurde das Hearing abgehalten. Für unser FoE war das eine erfolgreiche Sache: Das Leadprojekt „Mechanics, Modeling and Simulation of Aortic Dissection“

unter der Leitung von Gerhard A. Holzapfel wird mit zwei Millionen Euro gefördert und startet am 1. Jänner 2018. Nicht umsonst ist die Titelgeschichte dem Forscher Holzapfel gewidmet. Erfreulicherweise wurde aufgrund der sehr guten Projektanträge auch ein zweites Leadprojekt, nämlich „Porous Materials @ Work“ mit starker Beteiligung aus dem FoE „Human & Biotechnology“ genehmigt. Das Projekt unter der Leitung von Paolo Falcaro startet am 1. Juli 2018 und ist mit 1,5 Millionen Euro gefördert. Falcaro wurde kürzlich mit einer Professur aus dem FoE an die TU Graz geholt.

Auch im kleinen Rahmen gibt es immer wieder die Förderung von vor allem noch am Beginn ihrer Karriere stehenden Forscherinnen und Forschern an der TU Graz – die Anschubfinanzierung. Eine Übersicht über die bisherigen Runden hat gezeigt, dass diese Förderung nachhaltig zu Projekteinwerbungen führt. Daher rufen auch wir wieder dazu auf, dieses Instrument in Anspruch zu nehmen und Anträge bei der nächsten Förderrunde einzubringen.

Am 18. Oktober konnten wir den zweiten „FoE Day Human & Biotechnology“ abhalten. Auch dieses Mal war es uns ein Anliegen, jungen Forscherinnen und Forschern eine Bühne zu bieten, um die Arbeit ihrer Arbeitsgruppe zu zeigen. Einerseits erfolgte dies durch sechs Vorträge, andererseits durch Posterbeiträge. Höhepunkt waren heuer sicher wieder die zwei Hauptredner Sven Pranke, ETH Zürich, und Rüdiger Rupp, Universitätsklinikum Heidelberg.

Auch in Sachen wissenschaftlicher Diskurs hat sich einiges getan. Im September wurde die siebente „Graz Brain-Computer Interface Conference“ vom Institut für Neurotechnologie organisiert. Das ist die weltweit zweitgrößte Konferenz zum Thema und fixer Bestandteil des Konferenzreigens der internationalen BCI-Society. Fünf Keynote Speaker, etwa 220 Forschende und eine Industrie-Ausstellung bildeten das Kernprogramm. Erstmals wurde auch ein BCI Science Slam veranstaltet.

In this edition of TU Graz research, we put emphasis on, and portray, two leading TU Graz researchers from the FoE Human & Biotechnology: Gerhard A. Holzapfel from the Institute of Biomechanics and Robert Kourist from the Institute of Molecular Biotechnology. Applications for the TU Graz internal lead projects were evaluated over the summer and hearings were held before the semester start. Our FoE was notably successful in this round of applications. The lead project (Mechanics, Modeling and Simulation of Aortic Dissection) directed by Gerhard A. Holzapfel receives a funding of two million euros and will start on 1st January 2018. The title story of this issue TU Graz research is about Holzapfel and his research. Fortunately, another lead project application involving strong participation from the FoE Human & Biotechnology was rated highly and was therefore accepted for funding with a support of 1.5 million euros. The project Porous Materials @ Work directed by Paolo Falcaro is scheduled to start on 1st July 2018. Falcaro was recently awarded a professorship at TU Graz supported by the FoE.

Funding at a smaller scale is available at TU Graz through the Initial Funding Programme. Particularly TU Graz researchers at early stages in their careers are encouraged to consider the Programme and submit applications in the forthcoming call. A survey of the previous calls shows that the Initial Funding Programme has stimulated the submission of project applications for third-party funding substantially.

The second FoE Day Human & Biotechnology was held on 18th October. Giving young researchers the possibility to present their group's research was an important concern of the programme overall. This was achieved through six talks about different research topics from the FoE but also through poster presentations. Lively discussion at the posters took place during coffee breaks. Highlights were the presentations from two keynote speakers, Sven Panke from ETH Zurich and Rüdiger Rupp from Medical University Heidelberg.

There were also activities regarding scientific dissemination and discourse. In September the Institute of Neural Engineering organized the 7th Graz Brain-Computer Interface Conference. This conference is second largest in the BCI field worldwide and represents a fixed point in the conference calendar of the international BCI society. Five keynote speakers, about 220 researchers and an industrial exposition comprised the core programme of the conference. To enhance science communication, a BCI Science Slam was organized for the first time.

Protein- und Zell-Engineering für umweltfreundliche biokatalytische Prozesse

Protein and Cell Engineering for Eco-Friendly Biocatalytic Processes

Robert Kourist

Enzyme sind die Katalysatoren der Natur. Sie katalysieren anspruchsvolle Reaktionen unter sehr milden Reaktionsbedingungen. Eine Optimierung im Hinblick auf synthetische Anwendungen erfordert eine gute Kenntnis der molekularen Mechanismen – und eine geschickte Einbindung des Zufalls.

Zur Bewältigung der Komplexität des natürlichen Stoffwechsels entstanden in der Evolution Biokatalysatoren mit herausragender Selektivität, die man heute für biotechnologische Prozesse nutzen kann. Die Möglichkeit, zwischen Molekülen zu unterscheiden oder von mehreren möglichen Reaktionsprodukten nur eines herzustellen, erlaubt oft die Einsparung von Reaktionsschritten und vereinfacht die Aufreinigung der Reaktionsprodukte. Es reduziert Kosten, Energiebedarf und die Entstehung von Abfall. Biokatalyse kann so einen erheblichen Beitrag zur Entwicklung umweltfreundlicher Prozesse für die chemische und pharmazeutische Industrie leisten. Die Fähigkeit vieler Enzyme, nicht-natürliche Substrate umzusetzen, erlaubt ihren Einsatz zur Herstellung eines breiten Produktspektrums. Zudem katalysieren Enzyme viele Reaktionen, die für chemische Synthese zu anspruchsvoll wären. So können Enzyme selektiv Sauerstoffatome in unreaktive Moleküle einführen und stabile Bindungen wie Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindungen unter milden Reaktionsbedingungen selektiv brechen.

Wie bei allen katalytischen Prozessen stehen den Vorteilen der Aufwand und die Kosten der Herstellung des Katalysators gegenüber. Oft lässt sich ein Enzym mit seinen natürlichen Eigenschaften nicht einfach technisch einsetzen. Enzyme werden heute hauptsächlich im Bereich von Hochwertprodukten wie Pharmaka, Kosmetikprodukten und Lebensmittelzusätzen eingesetzt. Die Komplexität der Chemikalien und die hohen Anforderungen an die Produktreinheit führen bei chemischen Prozessen zu drastischen Abfallmengen und hohem >

Enzymes are the catalysts of nature. They catalyze challenging chemical reactions under very mild reaction conditions. An optimization of synthetic applications requires a good knowledge of their structure and their mechanisms – and a fortuitous contribution of chance.

An essential feature of the cellular metabolism is its immense complexity. To cope with this complexity, nature developed biocatalysts with outstanding selectivity. This selectivity can be utilized for the development of efficient biotechnological processes. The possibility to discriminate between very similar molecules or to selectively produce one compound from several possible products allows the number of reaction steps or synthetic routes to be reduced and the separation and purification of the reaction products to be greatly facilitated. This results in tremendous savings in terms of cost, energy and waste accumulation. Biocatalysis thus makes a significant contribution to the development of sustainable processes for the chemical and pharmaceutical industries. The capacity of many enzymes to convert non-natural substrate allows their application in the synthesis of a wide spectrum of products. On top of this, many enzymes catalyze reactions that would not be possible or would be too challenging for chemical catalysts. This includes the selective introduction of oxygen atoms into unreactive molecules and the breaking of highly stable chemical bonds, such as those between carbon-carbon atoms.

As in all catalytic processes, these advantages have to justify the cost and effort of the production of the catalyst. A large number of enzymes catalyze highly interesting reactions but do not meet all the requirements for a successful process. Nowadays, most synthetic applications of enzymes aim to manufacture high-value products, such as pharmaceutical ingredients, cosmetics and food and feed additives. The complexity of these chemicals and the high requirements regarding the purity of >



Robert Kourist leitet das Institut für Molekulare Biotechnologie und beschäftigt sich mit der molekularen Optimierung von Zellen und Enzymen und deren Einsatz für umweltfreundliche biotechnologische Prozesse.

Robert Kourist is head of the Institute of Molecular Biotechnology and specializes in the molecular optimization of cells and enzymes and their use in eco-friendly biotechnological processes.

Energiebedarf. Enzyme können hier die Nachhaltigkeit eines Prozesses deutlich verbessern. Die Biokatalyse ist in diesem Bereich oft die Methode der Wahl. Hochwertprodukte werden allerdings in relativ geringen Mengen hergestellt. Chemische Prozesse zur Herstellung von Massenprodukten produzieren generell weniger Abfall, sodass sich geringere Einsparungsmöglichkeiten ergeben. Dazu ist der Preis für Plattformchemikalien und Spezialchemikalien geringer, sodass Enzyme oft zu teuer sind. Bei der Nutzung erneuerbarer Rohstoffe in einer zukünftigen Bioökonomie kann die Biokatalyse einen wichtigen Beitrag leisten, da Enzyme zur Umsetzung biobasierter Stoffe hervorragend geeignet sind. Die Erhöhung der Effizienz biokatalytischer Prozesse zur Herstellung von biobasierten Massenprodukten und damit eine effektive Verbesserung der Kohlenstoffbilanz werden aktuell erforscht.

the products lead to considerable consumption of energy and accumulation of polluting waste. The potential of biocatalytic methods in the improvement of the environmental footprint is here very high. For the production of high-value products, biocatalysis is thus very competitive and often the method of choice. High-value products, however, are often manufactured in relatively small quantities. Due to higher cost pressure, processes for the production of specialty chemicals and commodities are usually more efficient and produce less waste. In turn, this allows less savings to be made by enzymes. Moreover, the lower price for mass products makes it more difficult to afford the cost for the catalyst production. This is an important factor in view of potential applications of biotechnological processes for the utilization of renewable resources in the future bioeconomy. In principle, enzymes are highly suitable for the conversion of bio-based molecules. The utilization of bio-based chemicals only has a beneficial effect when this can be done in large quantities. This requires a considerable increase in the efficiency of biocatalytic processes in terms of cost, waste accumulation and energy consumption.

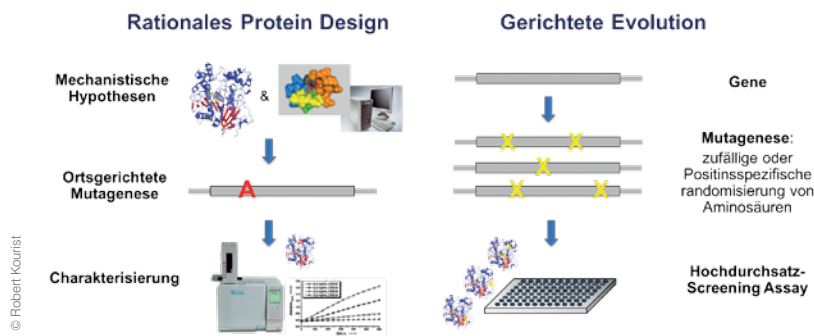


Abbildung 1:
Verständnisbasiertes und daher „rationales“ Protein-Design und molekulare Optimierungsalgorithmen wie „gerichtete Evolution“ sind komplementäre Ansätze zur Optimierung von Enzymen für biotechnologische Anwendungen.

Figure 1:
Knowledge-based and thus “rational” design of proteins and molecular optimization algorithms, such as “directed evolution”, are complementary approaches for the optimization of enzymes for biotechnological applications.

Optimierung von Enzymen

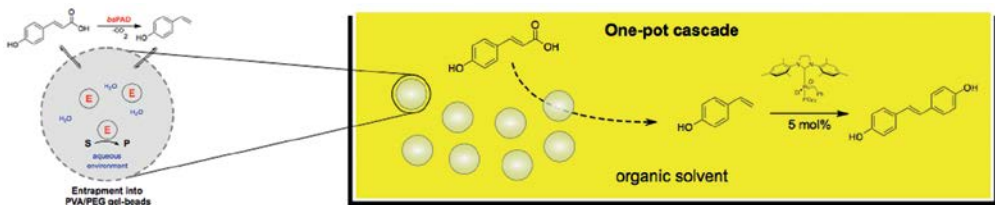
Biokatalysatoren wurden durch die Evolution für ihre Funktion unter natürlichen Bedingungen angepasst, die sich oft erheblich von denen in industriellen Prozessen unterscheiden. Eine Optimierung von Biokatalysatoren kann entweder über eine Anpassung der Reaktionsbedingungen oder ein molekulares Design erfolgen. Bei Letzterem werden Mutationen in das Gen eingefügt, die in einer veränderten Zusammensetzung des Enzyms und so in neuen Eigenschaften resultieren. Das ermöglicht eine Aktivitätssteigerung, eine angepasste Selektivität, eine höhere Stabilität oder ein erweitertes Substratspektrum. Da das molekulare Verständnis oft keine akkuraten Vorhersagen über den Effekt einer Veränderung des Enzyms erlaubt, sind randomisierte Optimierungsverfahren wichtig. Molekulare Techniken führen über das Gen verteilt oder an ausgewählten Positionen eine Reihe verschiedener Aminosäuren ein. Die so entstehende kombinatorische Vielfalt wird in Hochdurchsatz-Screening-Assays durchmustert. Eine Kombination randomisierter Verfahren mit vorhandenem Wissen ist oft Schlüssel zum Erfolg. Rationales Protein-design und gerichtete Evolution erlaubten so maßgeschneiderte Enzymvarianten.

Optimization of enzymes

Enzymes have evolved to function optimally with their natural substrates and their natural reaction conditions. These often differ significantly from those that are required for industrial processes. In principle, the optimization of a biocatalyst can be done either by reaction engineering or by molecular design. In the latter, mutations in its gene alter the structure of an enzyme, which results in modified catalytic properties. Examples for successful molecular optimizations include an adjustment of the selectivity, an increase of the stability or an expansion of the substrate spectrum. Molecular design also allows new functions to be introduced to enzymes. In many cases, our understanding of enzyme catalysis on a molecular level is not sufficient to make accurate predictions on the outcome of mutations. Therefore, randomized optimization methods play an important role in biotechnology. Introduction of sets of amino acids whether randomly or site-specifically allows mutant libraries to be generated. An evaluation of the resulting combinatory diversity in high-throughput screening assays allows enzyme variants with the desired properties to be identified. A well-planned combination of randomized approaches with the available knowledge on structure and mechanism is in many cases straightforward for the generation of tailor-made enzyme variants for catalytic processes.

Enzymes as components

Since many enzymes show outstanding activities in water and under mild reaction conditions, their



© Robert Kourist

Abbildung 2:
Die Verbindung chemischer und biokatalytischer Katalysatoren ermöglicht neue, umweltfreundliche biotechnologische Prozesse. Das Beispiel zeigt die Kombination einer enzymatischen Decarboxylierung mit der Olefin-Metathese zur Synthese biobasierter Antioxidantien. Die Abtrennung des Enzyms in Polymerkapseln ermöglichte eine Kompatibilität mit den Reaktionsbedingungen der chemischen Reaktion im organischen Lösemittel.

Figure 2:
Combining chemical and biocatalytic catalysts allows new eco-friendly biotechnological processes to be created. This example shows the combination of an enzymatic decarboxylation using olefin metathesis for the synthesis of bio-based antioxidants. The separation of the enzyme in polymeric capsules allows compatibility with the reaction conditions of the chemical reaction in the organic solvent to be achieved.

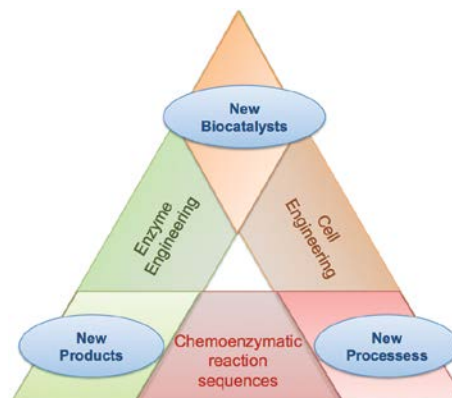
Enzyme als Bausteine

Da die meisten Enzyme in wässrigen Systemen und unter sehr moderaten Reaktionsbedingungen hervorragende Aktivitäten zeigen, können Enzyme zu Reaktionskaskaden zusammengestellt werden. Das ist ein Unterschied zu vielen chemischen Syntheserouten, in denen sich die Bedingungen der Reaktionsschritte oft drastisch unterscheiden und Kompatibilität nicht erreichbar ist. Die Aufarbeitung der intermediären Reaktionsprodukte in den Kaskadenreaktionen ist so nicht mehr nötig, was die Prozesse effizienter gestaltet. Ein weiterer Ansatz ist die Kombination von Enzymen mit chemischen Katalysatoren. Das erlaubt die Kombination der synthetischen Stärken beider Gebiete.

Enzyme aus verschiedenen Organismen unterscheiden sich oft in ihren optimalen Reaktionsbedingungen und katalysieren oft die Umsetzung der Reaktionspartner von anderen Reaktionsschritten der Kaskade. Eine erfolgreiche Etablierung und Skalierung von multi-katalytischen Reaktionskaskaden ist daher erheblich anspruchsvoller als bei Einzelreaktionen. Der Schlüssel liegt hier im erfolgreichen Zusammenspiel molekularer Ansätze wie Protein- und Zell-Engineering und verfahrenstechnischer Methoden. Trotz dieser Schwierigkeiten zeichnet sich ab, dass die Stärke von Biokatalysatoren in ihrer einfachen Anknüpfbarkeit an andere Reaktionen liegt. Das immense metabolische Potenzial von Reaktionskaskaden in lebenden Zellen und zellfreien Systemen ist nicht ausgeschöpft. Beispiele wie die Kombination von Enzymen mit chemischen Katalysatoren in Tandemreaktionen oder die Anknüpfung von Enzymen an die natürliche Photosynthese als Energiequelle unterstreichen das synthetische Potenzial der Biokatalyse. Die Komplexität der Reaktionssysteme erfordert aber eine stärkere interdisziplinäre Integration von molekularen Methoden und Prozesstechnik. Protein-Engineering ist ein effizientes Werkzeug, um Enzyme im Hinblick auf Aktivität, Selektivität und Stabilität für den Einsatz in Kaskadenreaktionen zu optimieren. ■

assembly regarding reaction cascades is often straightforward. This is different to chemical synthesis routes, where the reaction conditions differ considerably in many cases. This makes it very difficult to achieve a compatibility of the subsequent steps. Cascade reactions allow the work-up and purification of intermediate products to be saved. This results in a significant increase in the efficiency of the overall process. An extension of the concept is the combination of enzymes with chemical catalysts. This allows the strengths of both fields to be combined.

Enzymes from different organisms often show some differences regarding their optimal reaction conditions. Moreover, they often interact with the reagents of other reaction steps of the cascade. A successful establishment and scaling of a multi-step reaction cascade is therefore more difficult compared to single-step enzyme reactions. The key here is a successful integration of molecular methods, such as cell and protein engineering and process engineering. Despite these technical differences, the



© Robert Kourist

Abbildung 3:
Forschung an der Arbeitsgruppe für Biokatalyse und Enzym Engineering am Institut für Molekulare Biotechnologie. **Figure 3:**
Research in the Biocatalysis and Enzyme Engineering working group at the Institute of Molecular Biotechnology.

combination of enzymes with other catalysts is emerging as a particular strength of biocatalysis. The immense metabolic potential of reaction sequences in living cells and cell-free systems is still unexploited. Examples such as the combination of enzymes with chemical catalysts and the coupling of biocatalysts with photosynthesis as energy source underline the synthetic potential of biocatalysis. The higher complexity of these reaction systems, however, requires an interdisciplinary approach. Molecular engineering is a highly efficient tool to design biocatalysts with the desired activity, selectivity and stability for applications in cascade reactions. ■

Information, Communication & Computing



Kay Uwe Römer, Leitungsteam FoE
„Information, Communication & Computing“
Kay Uwe Römer, executive team FoE
Information, Communication & Computing

Der zurückliegende Sommer war von einigen wichtigen Ereignissen geprägt, die für unser FoE von weitreichender Bedeutung sein dürften. Mit der Entscheidung, die Silicon Austria Labs mit Hauptquartier am Campus Inffeldgasse anzusiedeln, werden sich in den nächsten Jahren 100 bis 200 Forschende in Themenbereichen der Informatik und Informationstechnik neu an unserer Universität ansiedeln. Während der Schwerpunkt in Graz auf „Systemintegration“ liegen soll, werden voraussichtlich die anderen Cluster „Sensorik“, „Hochfrequenztechnik“ und „Leistungselektronik“ mit Leitung in Villach und Linz zumindest teilweise auch in Graz bearbeitet werden. Durch die räumliche Nähe des Zentrums zu den Fakultäten für Informatik und Biomedizinische Technik sowie Elektrotechnik und Informationstechnik bietet sich hier einerseits großes Potenzial für Synergien, andererseits wird es sehr wichtig sein, Strukturen zu schaffen, sodass diese Synergien auch wirklich befruchtend für alle Seiten genutzt werden können.

Neben solchen strategischen Großinitiativen sind grundlagenorientierte Forschungsprogramme ebenso wichtig für unser FoE. Hier können wir den Kollegen Martin Horn herzlich beglückwünschen, der ein neues Christian Doppler Labor im Bereich der Regelungstechnik, speziell für Prüfstände, als Leiter einrichten durfte.

Auch bei den internen Förderinstrumenten Leadprojekte und Anschubfinanzierung können wir Positives aus Sicht von „Information, Communication & Computing“ vermelden. In beiden neu bewilligten Leadprojekten werden jeweils auch Vertreter unseres FoE mitarbeiten. Und damit diese Erfolgsserie nicht abreist, wurden bei der letzten Runde der Anschubfinanzierung zwei Anträge bewilligt. So will Michael Gadringer mit der Anschubfinanzierung einen Horizon 2020-Antrag im Bereich der Hochfrequenztechnik vorbereiten. Wolfgang Woess wiederum hat eine Anschubfinanzierung erhalten, um das Graduiertenkolleg „Discrete Mathematics“ in enger Kooperation mit ähnlichen Einrichtungen in Berlin und Zürich erfolgreich in die dritte Phase zu bringen und so möglichst viele junge Nachwuchsforscherinnen und -forscher ausbilden zu können. Über diese Aktivitäten berichtet Michael Samec auch in der vorliegenden Ausgabe von TU Graz *research*.

Ferner schreibt Christoph Aistleitner über Forschungsaktivitäten im Rahmen seines START-Grants. Viel Spaß beim Lesen!

The past summer was marked by a number of important events that will have a far-reaching impact on our FoE. With the decision to locate the Silicon Austria Labs headquarter at TU Graz campus Inffeldgasse, about 100 to 200 researchers working in different areas of computer science and information technology will find a new home on our university. While the focus in Graz will be on “system integration”, the other clusters “sensors”, “microwave engineering”, and “power electronics” with lead in Villach and Linz will also conduct research in Graz. The co-location of this new center with the faculties of Computer Science and Biomedical Engineering as well as Electrical and Information Engineering offers huge potential for synergies, however it will be of crucial importance to establish structures in such a way that these synergies are beneficial for all parties.

Besides such large strategic initiatives, fundamental research is equally important for our FoE. In this respect we congratulate our colleague Martin Horn, who will establish a new Christian Doppler Laboratory in the area of Control Engineering with a focus on test benches.

Also with respect to the internal funding instruments, we can report positive news from the point of view of the FoE. In both newly granted lead projects, researchers affiliated to “Information, Communication & Computing” will participate. In order to make sure that this series of success stories will continue in the future, two proposals for competitive initial funding were approved in the last round. Michael Gadringer will use the funding to prepare a Horizon 2020 proposal in the area of microwave engineering. Wolfgang Woess received funding to extend the graduate college “Discrete Mathematics” for another funding period in close collaboration with similar initiatives in Berlin and Zurich in order to educate even more young researchers. Michael Samec reports about this activity in the present issue of TU Graz research.

Furthermore, Christoph Aistleitner writes about research activities in the context of his START grant. Enjoy reading!

Probabilistische Methoden in Analysis und Zahlentheorie

Probabilistic Methods in Analysis and Number Theory

Christoph Aistleitner

2016 wurde der Start-Preis des FWF (Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung) an das Projekt „Probabilistische Methoden in Analysis und Zahlentheorie“ an der TU Graz vergeben.

Die Hearings des Start-Preises fanden in der Österreichischen Nationalbank statt – nach längerer Wartezeit, die sich die Nominierten mit einem Spaziergang durch die umfangreiche Ausstellung vertreiben konnten, dauerte das Hearing selbst nur wenige Minuten. Ein Anruf aus dem FWF-Präsidium informierte mich dann bald, dass mein Projekt genehmigt wurde. Ich war erleichtert – nur rund zehn Prozent der Nominierten erhalten auch einen Preis.

Das Projekt spaltet sich auf recht natürliche Weise in zwei Teile: Ein Teil ist eher grundlagenorientiert und fokussiert auf Fragen aus Analysis und Zahlentheorie. Der zweite Teil ist anwendungsnäher und beschäftigt sich mit Fragen aus der numerischen Mathematik und Computermathematik.

Grundlagen

Eines der Themen meiner Forschungsarbeit ist die metrische Zahlentheorie – eine Theorie, die sich mit „typischen“ Eigenschaften reeller Zahlen beschäftigt. Dazu sollte man sagen, dass es in der Mathematik verschiedene Größenordnungen von unendlich gibt, nämlich „abzählbar unendlich“ und „überabzählbar unendlich“. Abzählbar unendlich sind Mengen, die man auf einer unendlichen Liste aufschreiben könnte, immer ein Element nach dem anderen – von dieser Größenordnung sind etwa die ganzen Zahlen oder (etwas überraschend) die Menge der rationalen Zahlen, also der Bruchzahlen. Die reellen Zahlen hingegen (also alle Zahlen, die sich in unendlicher Dezimalentwicklung schreiben lassen) sind überabzählbar – man könnte sie also auch auf einer unendlichen Liste nicht eine nach der anderen aufschreiben. Das alles ist vielleicht etwas irritierend, wenn man es das erste Mal >

TU Graz's Institute of Analysis and Number Theory was awarded the FWF START Prize in 2016.

The hearings for the FWF START Prize took place in rooms of the Austrian National Bank. After some waiting time, during which the nominees could entertain themselves by visiting the huge exhibition, the hearings only took a few minutes. The phone call from the steering committee of the FWF soon informed me that our project had been granted. Initially I was relieved – because only ten per cent of the nominees are granted an award.

My project is split into two parts, one of a more fundamental nature concerning questions on analysis and number theory, and one concerning questions arising from "real-world" applications of mathematics.

Basics

One of my research topics is metric number theory – a theory concerned with the properties of "typical" real numbers. Here one should note that in mathematics there are different sizes of "infinities", namely "countably infinite" and "uncountably infinite". A set is countably infinite if one could write down its elements on an infinite list one after another. The integers are of this cardinality, as are (somewhat surprisingly) the rational numbers, that is, fractions. In contrast, the real numbers (all numbers that can be written as an infinite decimal expansion) are uncountable – even on an infinite list one could not write all of them one after another. This might be somewhat irritating, and it probably does not come as a surprise that Georg Cantor, who developed this theory, met heavy resistance in the mathematical community at first (though his ideas are generally accepted today). To come back to metric number theory: since we now know that there are very many real numbers, it does not make sense to investigate them one after another, instead it makes sense to find properties which hold for all >



Christoph Aistleitner ist Associate Professor am Institut für Analysis und Zahlentheorie der TU Graz.

Christoph Aistleitner is an associate professor at the Institute of Analysis and Number Theory at TU Graz.

Abbildung 1:
Zufällige Punkte (rechte Spalte) und spezielle, sehr gleichmäßig verteilte Punkte (sogenannte Niedrigdiskrepanz-Punkte, linke Spalte). In der obersten Zeile 10, dann 100, 1.000 und schließlich 10.000 Punkte. Die Punkte rechts entsprechen der Monte-Carlo-Methode, die Punkte links der Quasi-Monte-Carlo-Methode. Die Niedrigdiskrepanz-Punkte füllen das Quadrat regelmäßiger als die zufälligen Punkte – sie sind zur numerischen Integration daher besser geeignet.

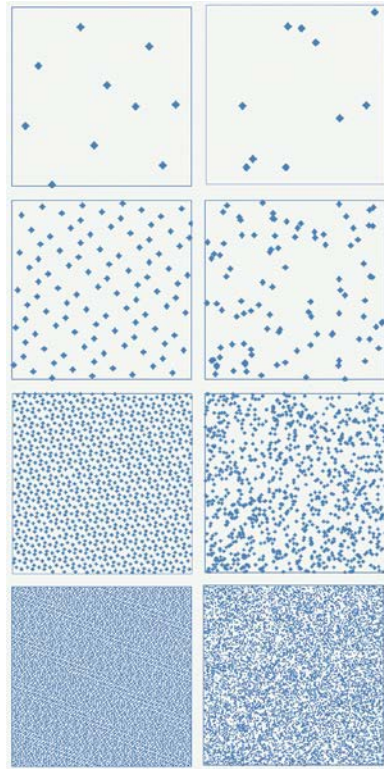


Figure 1:
Random points (right column) and specially designed non-random points (so-called low-discrepancy points, left column). In the first row there are 10, then 100, 1000, and finally 10,000 points. Random points correspond to the Monte Carlo method, low-discrepancy points to the quasi-Monte Carlo method. The low-discrepancy points fill the square more evenly – accordingly they are better suited for numerical integration.

hört, und es ist nicht überraschend, dass Georg Cantor, der Entwickler dieser (heute allgemein anerkannten) Theorie der Unendlichkeiten zunächst heftig angefeindet wurde. Um zur metrischen Zahlentheorie zurückzukommen: Da es also sehr viele reelle Zahlen gibt, kann man nicht versuchen, sie eine nach der anderen zu untersuchen. Stattdessen ist es naheliegend, Eigenschaften zu finden, die (in einem sehr genauen Sinn) für alle „typischen“ reellen Zahlen gelten. So taucht etwa bei einer typischen reellen Zahl die Ziffer 0 nach dem Dezimalpunkt (asymptotisch) gleich oft auf wie die Ziffer 1. Wenn der Leserin oder dem Leser all das unbegreiflich ist, dann wird sie oder er zumindest glauben, dass es sich bei diesem Teil um den eher theoretischen Teil des Projekts handelt – von Anwendungen in der sogenannten wirklichen Welt ist all das tatsächlich recht weit weg. Für die Mathematikerin bzw. den Mathematiker ist das freilich kein Hinderungsgrund – ganz im Gegenteil, wenn, wie auf diesem Gebiet, verschiedene mathematische

"typical" (in a very precise sense) real numbers. For example, a typical real number has as many zeros in its decimal places as it has ones. If any of this does not make any sense to the reader, then at least he will believe that such questions are of a rather fundamental nature and somewhat detached from the so-called real world. For the mathematician this is not a problem. However, if many many different mathematical areas come together in a mathematical field (such as in our case number theory, Fourier analysis, probability theory and ergodic theory) and little by little one comes to realize the hidden connections between different phenomena, then this gives the mathematician great pleasure.

Practical application

Assume you want to calculate an integral, namely the average depth of a lake (yes, that is given by an integral). You cannot obtain a precise solution, so you need an approximation method. One possibility is the Monte Carlo method. Here, you take a large number of random points on the surface of the lake and determine the depth at these points, then the average depth of the lake will be roughly as large as the average depth at these sampling points. However, the size of the error will depend on the random choice of sampling points – where it is not clear how "random" points can actually be chosen. Another method is the quasi-Monte Carlo method. Here, rather than taking random sampling points, you take carefully chosen (non-random) sampling points. One can show that this method often performs much better than the Monte Carlo method. Now imagine that rather than a two-dimensional integral (such as the average depth of the lake) you want to calculate a 1000-dimensional integral. That may sound absurd, since everybody knows that the "real world" is only three-dimensional. However, high-dimensional integrals are extremely important for applications – for example, if you want to calculate the expected loss in an insurance contract for 1000 insured persons, then mathematically this is a 1000-dimensional integral. Again, the quasi-Monte Carlo-method can give very good results – but many questions are still open, including very partial ques-

Abbildung 2:
Christoph Aistleitner (links) mit seinem Sohn Paul und dem (damaligen) Staatssekretär Harald Mahrer bei der Verleihung des FWF-Start-Preises 2015 in Wien.

Figure 2:
Christoph Aistleitner (left) and his son Paul together with (former Secretary of State Harald Mahrer at the "FWF Start-Preise 2015" award show in Vienna.



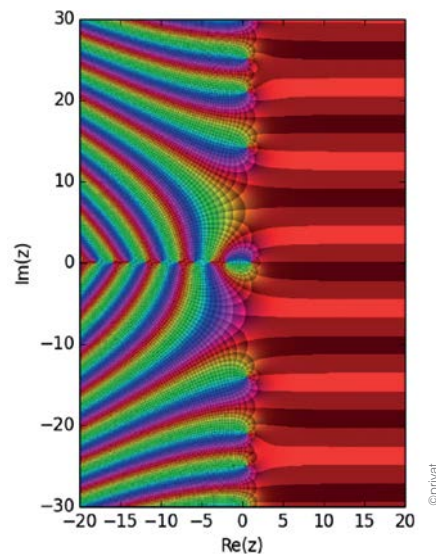
Disziplinen ineinandergreifen (zum Beispiel Zahlentheorie, Fourier-Analyse, Wahrscheinlichkeitstheorie, Ergodentheorie) und sich nach und nach die Zusammenhänge zwischen verschiedenen Phänomenen offenbaren, dann ist das ein wunderbarer intellektueller Genuss.

Praxis

Stellen Sie sich vor, Sie wollen ein Integral berechnen, und zwar die durchschnittliche Tiefe eines Gewässers. Eine exakte Lösung zu bekommen, ist unmöglich, daher verwenden Sie eine Näherungsmethode. Eine Möglichkeit wäre die sogenannte Monte-Carlo-Methode: Sie wählen eine große Zahl von zufälligen Punkten auf der Seeoberfläche und bestimmen dort die Tiefe des Sees – die tatsächliche durchschnittliche Seetiefe wird dann ungefähr so groß sein wie der Durchschnittswert an diesen zufälligen Punkten. Der Fehler allerdings wird von der zufälligen Auswahl der Messpunkte abhängen – wobei auch nicht ganz klar ist, wie man „zufällige“ Punkte überhaupt auswählt. Die sogenannte Quasi-Monte-Carlo-Methode folgt einem anderem Prinzip – statt rein zufälliger Punkte verwenden Sie sorgfältig ausgewählte (nicht-zufällige) Messpunkte. Man kann zeigen, dass diese Methode oft ein deutlich besseres Ergebnis liefert. Und jetzt stellen Sie sich vor, Sie wollen nicht ein zweidimensionales Integral (wie im Beispiel der durchschnittlichen Seetiefe) berechnen, sondern ein tausenddimensionales. Das klingt für den Laien vielleicht absurd (schließlich ist die „normale“ Welt nur dreidimensional), ist aber für Anwendungen extrem wichtig – wenn Sie beispielsweise den erwarteten Schaden bei der Versicherung mit 1.000 Versicherungsnehmerinnen und -nehmern berechnen wollen, dann ist das eben ein 1.000-dimensionales Integral. Wieder kann die Quasi-Monte-Carlo-Methode gute Ergebnisse liefern – aber viele Fragen sind für solche Probleme noch offen, und zwar ganz praktische Probleme von der Sorte: Bis zu welcher Größenordnung kann ich das Ergebnis effizient am Computer berechnen lassen? Wie wirkt sich eine Erhöhung der Dimension aus? Kann ich nur einfache oder auch komplizierte Funktionen integrieren?

So weit eine kurze Beschreibung der Themen, die dem Projekt zugrunde liegen. Die tatsächlichen Forschungsfragen sind natürlich deutlich spezialisierter und deutlich komplexer. Gemeinsam mit mir arbeiten zwei Postdoc-Wissenschaftler und ein Doktoratsstudent in diesem Projekt. Alle drei Stellen wurden international ausgeschrieben, und für alle drei Ausschreibungen gab es eine sehr große Zahl an (qualifizierten) Bewerbungen – für mich eine deutliche Bestätigung der Attraktivität der TU Graz für junge internationale Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler. ■

tions such as: up to which size can the quasi-Monte Carlo method be efficiently implemented on a computer? What happens when the number of dimensions is increased? Can I only integrate simple functions or also irregular ones?



Of course, the actual research topics in our project are much more focused, and much more complex as well. I am working in this project together with two postdoc researchers and one PhD student. All three positions were advertised internationally, and in all three cases there was a very large number of (qualified) applicants. For me this is a clear confirmation that the TU Graz is an attractive place for young international scientists. ■

Abbildung 3:

Die Riemannsche zeta-Funktion „verschlüsselt“ viele Eigenschaften von zahlentheoretischem Interesse, etwa die Anzahl an Primzahlen bis zu einer gewissen Größenordnung. Die Funktion ändert zwischen Realteil 0 und 1 (untere Achse) ihr Verhalten – die Erforschung der zeta-Funktion in diesem „kritischen Bereich“ gehört zu den Themen dieses Projekts, und zu den wichtigsten mathematischen Problemen überhaupt.

Figure 3:

The Riemann zeta function encodes information of number-theory interest, such as the number of primes below a given bound. The function changes its behaviour between real part 0 and 1 (bottom axis). The investigation of the zeta function in this "critical strip" is among the topics of our project, and is also one of the most important unsolved mathematical problems.

Mobility & Production



Helmut Eichlseder, Leitungsteam FoE
„Mobility & Production“
*Helmut Eichlseder, executive team FoE
Mobility & Production*

Über Aktivitäten und Ergebnisse des FoE „Mobility & Production“ gibt es einiges Erfreuliches zu berichten: So wurde im Mai vom Institut für Maschinenelemente und Entwicklungsmethodik das AVL-TU Graz Transmission Center in der Inffeldgasse eröffnet. Hier können auf einer Versuchsfläche von 750 m² Grundlagenuntersuchungen im Bereich der Tribologie, Getriebetechnik und Antriebssystementwicklung durchgeführt werden, was neue Möglichkeiten eröffnet und eine hervorragende Stärkung auf dem Gebiet Automotive-Antriebstechnik für die TU Graz darstellt. Ebenso erfreulich ist die Genehmigung der Forschungsinitiative „Alp.Lab“, die Testumgebung, Testszenarien und Dienstleistungen für das Testen und Verifizieren von Komponenten und Systemen für automatisiertes Fahren zur Verfügung stellt. Die TU Graz erhielt im Juli den Zuschlag zur zweiten Industrie 4.0-Pilotfabrik Österreichs, die aktuell am Standort Inffeldgasse 25f eingerichtet wird. Zudem ist der Ausbau des „Fablab“ durch Aufstockung des FSI-Gebäudes der TU Graz derzeit voll im Gange.

Dass eine Vielfalt von mobilen Antriebssystemen und Fragen der erforderlichen Infrastruktur im FoE behandelt wird, zeigen auch mehrere von TU Graz-Instituten (mit)organisierte Veranstaltungen, wie die internationale Motorentagung im September in Graz, die Brennstoffzellenakademie in Japan und die „Smart Production and Services“-Diskussionsrunde im Rahmen des diesjährigen Forums Alpbach. Hier wurde auch die von der TU Austria und der Ö-WGP gemeinsam herausgegebene Broschüre „Österreichs Zukunft als Produktionsstandort“ präsentiert.

Einen Einblick in ein nachhaltiges Konzept zur dezentralen Wasserstoffproduktion vermittelt der folgende Bericht von Viktor Hacker.

Als erfolgreiches „Instrument“ des FoE besonders hervorzuheben ist die Anschubfinanzierung: In den bisherigen acht Runden wurden alleine im FoE „Mobility & Production“ 55 Anträge eingereicht, von denen 37 gefördert werden konnten. Viele davon haben bereits zu erfolgreichen Projektanträgen mit einem Gesamtvolumen von über 2,5 Millionen Euro geführt – ein aus meiner Sicht ausgezeichnetes „Investment“.

There is plenty of encouraging news about the activities and results of the FoE Mobility & Production. In May 2017, the Institute of Machine Components and Methods of Development launched the AVL-TU Graz Transmission Center at the Campus Inffeldgasse. Basic research in the fields of tribology, transmission technology and drive-train development is carried out on a testing area of 750m². This offers new opportunities and will provide an excellent support for TU Graz in the area of automotive-driving technology. More good news is also the approval of the research program Alp.Lab, offering testing environments, test scenarios and services for testing and verification of components and systems for automated driving. In July 2017, TU Graz was awarded the contract for the second Industry 4.0 Pilot Factory Austria, being actually set up in Inffeldgasse 25f. Furthermore, the expansion of Fablab by extending the FSI building at TU Graz is in full swing.

The treatment of a diversity of mobile drive trains and the demand for the needed infrastructure in the FoE is represented in various events, also (co)-organized by TU Graz institutes, such as the international engine conference in September in Graz, the fuel cell academy in Japan and the Smart Production and Services round table on the occasion of this year's Forum Alpbach. At this event, TU Austria together with Ö-WGP published a brochure on Austria's Future as a Production Site.

An impression of the "Sustainable solution for decentralised hydrogen production" is given in Viktor Hacker's following report.

The start-up financing as successful "instrument" of FoE is especially noteworthy. In the preceding eight rounds, 55 applications, of which 37 were funded, were submitted to the FoE Mobility & Production. Many have led to successful project applications with a total volume of 2.5 million euros. From my point of view an excellent investment.

Nachhaltiges Konzept zur dezentralen Wasserstoffproduktion

Sustainable Solution for Decentralised Hydrogen Production

Viktor Hacker, Sebastian Bock, Robert Zacharias

Die zukünftige Nutzung von Wasserstoff in Brennstoffzellenanwendungen wird von der flächendeckenden Verfügbarkeit von nachhaltig produziertem Wasserstoff abhängen. Zur dezentralen Erzeugung von Wasserstoff aus lokal verfügbaren Ressourcen wurde ein Verfahren zur kombinierten Wasserstoffproduktion und -reinigung entwickelt. Im Mai wurde die Forschung mit dem Houskapreis für wirtschaftsnahen Forschung prämiert.

Brennstoffzellensysteme erzeugen hocheffizient und mit niedrigen oder ohne Emissionen elektrische Energie und Wärme. Der Wirkungsgrad von Brennstoffzellen ist weitgehend von der Baugröße unabhängig. Daher bietet diese Technologie auch die Möglichkeit, dezentral – vor Ort beim Kunden bzw. bei der Kundin – elektrischen Strom mit erneuerbaren Energieträgern (zum Beispiel Biogas) herzustellen.

Brennstoffzellenfahrzeuge und auch Brennstoffzellenkraftwerke zur Hausenergieversorgung werden mit Wasserstoff betrieben. Die Nachhaltigkeit und die Umweltbelastung durch die Stromerzeugung werden maßgeblich durch den Primärenergieträger zur Produktion von Wasserstoff beeinflusst. Gegenwärtig werden mehr als 90 Prozent des weltweiten Wasserstoffbedarfs durch die Umwandlung fossiler Rohstoffe gedeckt, wodurch der Ausstoß des klimaschädlichen Kohlendioxids nicht unterbunden, sondern nur an die Produktionsstätte von Wasserstoff verlagert wird. Lange Transportwege von zentralen Produktionsanlagen zum Anwender bzw. zur Anwenderin in Kombination mit der vergleichsweise geringen Speicherdichte von Wasserstoffspeichern verlangen nach neuen, innovativen Lösungen.

Chemical-Looping Hydrogen

Schon im 19. Jahrhundert wurde der Eisen-Dampf-Prozess patentiert und zur Erzeugung von Wasserstoff für Luftschiffe eingesetzt. Aus diesem >

The dimension of hydrogen utilisation in future fuel-cell applications largely depends on the widespread availability of hydrogen produced from renewable resources. A process to use local available renewables for decentralised hydrogen production on-site was invented at TU Graz. This combined hydrogen production and purification method was honoured with the Houska award in May 2017 for industry-related research.

Fuel-cell systems produce electrical power and heat in a highly efficient system with or without minor direct harmful emissions. The efficiency of fuel-cells does not depend on the stack size, and for this reason hydrogen is proposed as energy carrier for the on-site allocation of electrical energy from renewable primary energy sources.

Fuel-cell electric vehicles (FCEV) and fuel-cell power stations for home use are possible applications which make use of hydrogen for power generation. The sustainability and environmental effects are largely influenced by the production method from primary energy sources. Today, carbon dioxide emissions from hydrogen utilisation are just shifted towards the place of hydrogen production since more than 90% is produced from fossil hydrocarbons. Long shipping distances from centralised production plants to the consumer in combination with the comparatively low-energy density of hydrogen storage solutions require new, innovative solutions.

Hydrogen production with chemical looping systems

In the early 19th century the steam-iron process was patented for the production of hydrogen for airship travel. This process was very inefficient since it consisted of only one step carried out in a blast furnace utilizing coal for heat generation and as reducing agent. Within the last 17 years of research and development at Graz University of Technology, starting with Christian Doppler (CD) and Research Studios Austria (RSA) programs, this process >



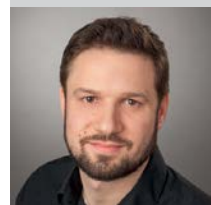
Viktor Hacker ist Leiter der interdisziplinären Forschungsgruppe Brennstoffzellen und Wasserstoffsysteme.

Viktor Hacker is head of the interdisciplinary research group fuel cells and hydrogen systems.



Sebastian Bock arbeitet seit 2016 als Universitäts-Projektassistent an der Entwicklung der Komponenten und des Gesamtsystems des Chemical-Looping-Hydrogen-Verfahrens zur Wasserstoffherzeugung.

Sebastian Bock has been working since 2016 as a university project assistant on the development of the prototype system of the chemical looping hydrogen process for hydrogen production.



Robert Zacharias arbeitet seit 2016 an seiner Dissertation in der Forschungsgruppe Brennstoffzellen und Wasserstoffsysteme mit dem Schwerpunkt Materialentwicklung zur Wasserstoffherzeugung.

Robert Zacharias has been working since 2016 on his PhD thesis in the research group Fuel Cells and Hydrogen Systems with a focus on material development for hydrogen production.

Abbildung 1:
Projektgruppe Wasserstoff-
systeme unter der Leitung
von Viktor Hacker.

Figure 1:
Project team of the Fuel-Cell
and Hydrogen Systems Group
supervised by Viktor Hacker.



© Lunghammer – TU Graz

einstufigen, ineffizienten Prozess, der im Hochofen mit Kohle betrieben wurde, entstand im Rahmen der Forschungs- und Entwicklungsarbeiten an der TU Graz im Rahmen eines Christian Doppler Labors und eines Research Studios Austria (im Rahmen einer FFG-Förderung) ein effizientes Verfahren basierend auf erneuerbaren Energieträgern. Das Verfahren wird vom Kooperationspartner zum Produkt weiterentwickelt.

was able to be transformed into an efficient, contemporary method for hydrogen production from renewable hydrocarbons. Because of this exceptional experience in fixed-bed chemical looping systems, the Fuel Cell and Hydrogen Systems Group became the scientific partner in a cooperative project of making this unique process ready for the market.

Abbildung 2:
Grundlagenforschung zur
kontinuierlichen Weiterentwick-
lung des innovativen Systems
zur Wasserstofferzeugung.

Figure 2:
Fundamental research for a
continuous development
of the innovative hydrogen
production system.



© ICVT – TU Graz

Der zyklische Prozess basiert auf der Umsetzung von erneuerbaren Kohlenwasserstoffen, wie zum Beispiel Biogas, im Dampfpreformer unter Zugabe von Wasserdampf zu einem Synthesegas. Das Synthesegas reduziert bei Temperaturen zwischen 600 und 1.000°C ein Metalloxid. Im nachfolgenden

The process is based on the conversion of renewable hydrocarbons, e.g. biogas or bioethanol, which are converted to a synthesis gas in a steam reformer. This gas reduces a metal oxide in a temperature range between 600°C to 1000°C. In a subsequent process step the metal is reoxidized with steam and pure hydrogen is released from this reaction. The fixed-bed operation was evaluated to be the best case within the scope of a decentralised hydrogen production system. The coupling and integration of the two process steps in a compact reactor permits the design of efficient small-scale systems for decentralised on-site hydrogen production.

Abbildung 3:
Betrieb des Prototyps in
enger Zusammenarbeit mit
dem Industriepartner.

Figure 3:
Operation of the prototype
plant in intensive cooperation
with industrial partners.



© ICVT – TU Graz

Decarbonised hydrogen society

The long-term stability of the oxygen carrier material used for the cyclic reduction and oxidation played a crucial role for economic feasibility in the industrial process. Iron was chosen as an oxygen carrier because of its outstanding properties in terms of reactivity and oxygen-exchange capacity. It further provides an easy and safe manipulation at a reasonable price for industrial use. Extensive material tests were conducted to accomplish the challenges of long-term stability. Different high-melting metal oxides were tested as additives to achieve a high cycle stability and maintain the reactivity throughout the period of application. The tests are carried out ex-situ for several hundred cycles to prove the material suitability. Afterwards, selected samples are tested for their mechanical strength and oxygen-exchange capacity in special lab systems.

Prozessschritt wird durch die Oxidation des Metalloxids mit Wasserdampf hochreiner Wasserstoff freigesetzt. Das Verfahren erlaubt unterschiedliche Möglichkeiten der Prozessführung. Der Festbett-Reaktor wurde als beste Option für die dezentrale Wasserstoffproduktion ausgewählt. Die Koppelung und Integration aller Prozessschritte in der kompakten Reaktoreinheit erlaubt dabei den Bau von kleinen, effizienten Anlagen für die dezentrale Vor-Ort-Produktion von Wasserstoff.

Dekarbonisierte Mobilität

Die Entwicklung der langzeitstabilen Kontaktmasse zur Wasserstofferzeugung war ein notwendiges Kriterium für die wirtschaftliche Darstellung des neuen Verfahrens. Für den Einsatz eisenbasierter Materialien als reaktive Schüttung sprechen die hohe Austauschkapazität, die einfache Handhabung des ungiftigen Materials und der geringe Preis. Durch umfangreiche Testserien konnten die Herausforderungen im Bereich der Zyklenstabilität durch die Zugabe hochschmelzender Additive bewältigt werden. Die Charakterisierung und Reaktivität verschiedener Mischungen wird zuerst in ex-situ-Lebensdauertests über mehrere hundert Zyklen nachgewiesen. Anschließend werden ausgewählte Materialkombinationen in Laborsystemen auf Austauschkapazität und mechanische Stabilität untersucht.

Neben der Materialforschung wurde in Kooperation mit Industriepartnern die Komponentenentwicklung und die Prozessoptimierung am Institut für Chemische Verfahrenstechnik und Umwelttechnik durchgeführt. Im Rahmen der Gesamtsystemanalyse rückt die Möglichkeit der prozessintegrierten CO₂-Abtrennung immer mehr in den Fokus. Innovative Ansätze ermöglichen dabei die Sequestrierung des reinen Kohlendioxidstroms im Prozess.

Das Verfahren wurde von der TU Graz kommerziell verwertet und wird nun vom Wirtschaftspartner in Kooperation mit der Arbeitsgruppe zu einem kommerziellen Produkt entwickelt.

Als Anerkennung der engen Kooperation mit der Industrie und der wissenschaftlichen Leistung wurde die Arbeitsgruppe Brennstoffzellen und Wasserstoffsysteme unter der Leitung von Viktor Hacker mit dem Houska-Anerkennungspreis 2017 sowie dem Houska-Publikumspreis ausgezeichnet. ■



© ICVT – TU Graz

Abbildung 4:
Materialforschung zur Verbesserung von Reaktivität und Stabilität der eingesetzten Kontaktmasse.

Figure 4:
Materials research to improve reactivity and stability of the carrier material.

In addition to research on materials, process development is conducted in cooperation with industrial partners to optimise the process conditions and the system design at the Institute of Chemical Engineering and Environmental Technology. The research team is particularly focusing on carbon dioxide sequestration. Innovative approaches enable the process-integrated separation of a pure carbon dioxide stream to be used in carbon capture and storage (CCS) systems.

The hydrogen production method was commercialized by Graz University of Technology in cooperation with the research group and has now been realized as a commercial product.

In May 2017, Viktor Hacker and his research team were recognised with the prestigious Houska award. The committee appreciated the scientific development of the hydrogen production system from the basic idea all the way to the realization at industrial scale with intensive cooperation with Austrian industrial partners. ■

Abbildung 5:
Forschungsreaktor für die Analyse des Gesamtsystems.

Figure 5:
Analysis of combined system in prototype reactor.



© ICVT – TU Graz

Sustainable Systems



Urs Leonhard Hirschberg,
Leitungsteam FoE „Sustainable Systems“
Urs Leonhard Hirschberg,
executive team FoE Sustainable Systems

Mit der regelmäßig ausgeschriebenen Anschubfinanzierung haben die Fields of Expertise die Möglichkeit, junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler beim Vorbereiten eines Forschungsantrags zu unterstützen. In der achten Runde wurden acht Projekte im Bereich „Sustainable Systems“ eingebracht, von denen fünf gefördert werden konnten.

Christoph Breser vom Institut für Stadt und Baugeschichte will mit Partnerinnen und Partnern aus der Informatik ein neues System zur digitalen Bauaufnahme und Dokumentation historisch wertvoller Bausubstanz entwickeln. „Scan to BIM“ ist Kurztitel des ambitionierten Projekts, das mit einem Netzwerk von nationalen und internationalen Partnerinstitutionen zur Projektreife entwickelt wird.

Um die Entwicklung von dauerhaft korrosionsresistenten Zementprodukten für die Abwasserwirtschaft geht es im Projekt von Cyrill Grengg vom Institut für Angewandte Geowissenschaften. Das Projekt baut auf umfangreichen Studien und Entwicklungen auf und wird mit Partneruniversitäten in Österreich und Deutschland entwickelt.

Unter dem Titel „Energy Self-Sufficient Desalination“ will Armin Buchroithner vom Institut für Elektrische Meßtechnik und Meßsignalverarbeitung ein neuartiges, mit Photovoltaik betriebenes Entsalzungssystem entwickeln. Durch die Nutzung von Synergieeffekten zwischen Konzentratoren-Photovoltaik und solarthermischer Entsalzung soll eine signifikante Effizienzsteigerung erreicht werden. Die Gewinnung von Trinkwasser aus Meerwasser ist weltweit bereits sehr verbreitet und wird in Zukunft noch stark zunehmen.

Auch Projekte zur Entwicklung und Erschließung der Künste können Themen der Nachhaltigkeit behandeln. In dieser Runde wurden gleich zwei solche Anträge gefördert. Das Projekt von Franziska Hederer vom Institut für Raumgestaltung behandelt die Performativität von Raum und die Aktivierung des öffentlichen Raums durch Kunstpraktiken. Mit einer Reihe internationaler Partnerinnen und Partnern werden empirische Studien darüber erarbeitet, wie soziokulturelle Transformationsprozesse durch veränderte Raumwahrnehmungen initiiert werden können. Ebenfalls an einem Projektantrag arbeitet Constantinos Miliades mit Ismini Christokopoulou vom Institut für Architektur und Medien. In Partnerschaft mit dem Institut für Straßen- und Verkehrswesen und dem Institut für Elektronische Musik sowie mit internationalen Künstlerinnen und Künstlern sollen durch den Einsatz von Virtual und Augmented Reality urbane Klangwelten auf neuartige Weise erleb- und verstehbar gemacht werden.

With the regularly awarded initial funding the Fields of Expertise can support young scientists in their efforts to prepare a research proposal. The eighth round of the funding saw eight proposals submitted to the FoE Sustainable Systems, five of which were able to be funded.

Christoph Breser of the Institute of Urban and Architectural History and several partners from Computer Science want to develop a novel system for the digital documentation and representation of culturally significant buildings. „Scan to BIM“ is the short title of their ambitious project, which they want to submit with a network of national and international partners.

The development of corrosion-resistant concrete products for sewage systems is the goal of the project of Cyrill Grengg of the Institute of Applied Geosciences. The project builds on the results of previous wide-ranging studies and will be developed with partners in Austria and Germany.

Under the title Energy Self-Sufficient Desalination, Armin Buchroithner of the Institute of Electrical Measurement and Measurement Signal Processing wants to develop a novel desalination system, driven by photovoltaics. By making use of the synergies between concentrator photovoltaics and solar thermal desalination, the approach promises a significant increase in efficiency over existing processes. Desalination is already an important part of the production of drinking water around the world and is bound to become even more widespread.

Arts-based research can also deal with topics of sustainability. In this round, two such project-proposals are being funded. The project by Franziska Hederer of the Institute of Spatial Design deals with the performativity of space and the activation of public space through the practice of art. With a number of international partners, empirical studies are being designed which investigate how socio-cultural transformations can be triggered by changed perceptions of our spatial environment. Another project was proposed by Constantinos Miliades and Ismini Christakopoulou of the Institute of Architecture and Media. In partnership with the Institute of Highway Engineering and Transport Planning and the Institute of Electronic Music, as well as several international artists, the project seeks to provide novel experiences and understanding of urban sonic environments through the application of virtual and augmented reality.

Ein Leben ohne CO₂-Emissionen: Was bedeutet das für den Bausektor?

A Life Without CO₂ Emissions: What Does This Mean for Our Buildings?

Alexander Passer, Martin Röck

Vor dem Hintergrund des Klimawandels und der Notwendigkeit einer Reduktion des Gesamt-Primärenergieverbrauchs und der Treibhausgasemissionen im Gebäudelebenszyklus hat die TU Graz ein internationales Forschungsvorhaben mit initiiert. Die Arbeit des „IEA EBC Annex 72“ umfasst die Harmonisierung und Integration von Bewertungsmethoden zur Ermittlung von Umweltwirkungen über den ganzen Lebenszyklus von Gebäuden.

Die internationale Staatengemeinschaft hat sich 2015 beim UN-Klimagipfel in Paris verbindlich darauf geeinigt, langfristig „den Anstieg der Durchschnittstemperatur weltweit auf deutlich weniger als 2° C gegenüber dem vorindustriellen Stand zu beschränken und einen Temperaturanstieg von höchstens 1,5° C anzustreben“. Für die Weltwirtschaft folgt daraus die Notwendigkeit einer vollständigen Entkarbonisierung – also die gänzliche Reduktion von CO₂-Emissionen durch den consequenten Verzicht auf fossile Energieträger – um ab spätestens 2050 keine weiteren Treibhausgase (THG) mehr zu emittieren. Bisher wurden THG-Emissionen zudem weitestgehend „territorialbasiert“ erfasst, sprich anhand der geografischen Lage ihrer Entstehung zugeordnet. Sinnvollerweise müssen allerdings auch die „konsumbasierten“ Emissionen berücksichtigt werden, also jene Emissionen, die bei der Produktion von Gütern im Ausland anfallen, jedoch hierzulande konsumiert und somit „importiert“ werden (siehe Abbildung 1). Unter Beibehaltung des bisherigen Emissionsniveaus dürfte Österreich in spätestens 20 Jahren keine weiteren THG-Emissionen mehr verursachen, um die Klimaziele noch zu erreichen. Der Weg, um dieses Extremszenario zu verhindern, ist klar: Wir brauchen einen schrittweisen Übergang zu „Netto-Null-Treibhausgasemissionen“.

Life Cycle Sustainability Assessment

Für die Erreichung der notwendigen Emissionsreduktionen im Bausektor sind ambitionierte, zielgerichtete Strategien und eine laufende Evaluierung der Maßnahmen erforderlich. Die gute Nachricht ist, dass infolge strengerer gesetzlicher >

Against the background of ubiquitous climate change and the need to reduce the total primary energy consumption and greenhouse gas emissions in the building life cycle, Graz University of Technology has co-initiated a new international research project. The work program of "IEA EBC Annex 72" includes the harmonization and integration of assessment methods to identify environmental impacts throughout the life cycle of buildings.

In 2015, the international community agreed at the UN Climate Summit in Paris (COP21) to "limit the average global temperature increase to well below 2 °C compared to the pre-industrial level and strive to limit temperature increase to no more than 1.5° C". As a consequence, the global economy needs to pursue a full decarbonisation program – i.e. the total reduction of CO₂ emissions through the complete abandonment of fossil fuels – in order to avoid emitting any further greenhouse gases (GHG) by 2050 at the latest. To date, GHG emissions have also been largely recorded "on a territorial basis", that is to say counted on the basis of the geographical location in which they were created. However, it will be required to include "consumption-based" emissions, i.e. those emissions that occur in the production of goods abroad, but are consumed in another country and thus "imported" (see Figure 1). If Austria maintained the current level of GHG emissions, it would have to stop emitting any further GHGs to still be able to meet the climate goals in less than 20 years from now. The path to prevent this extreme scenario is clear: we need a gradual transition to "net zero greenhouse gas emissions".

Life Cycle Sustainability Assessment

In order to achieve the required emission reductions in the construction sector, targeted strategies as well as a continuous evaluation of the effectiveness of measures are required. The good news is that, as a result of stricter legal requirements for the operation of buildings >



Alexander Passer ist Leiter der Arbeitsgruppe Nachhaltiges Bauen. Sein Forschungsschwerpunkt liegt im Bereich der lebenszyklusbasierten Nachhaltigkeitsanalyse (LCSA) und digitaler Gebäudemodellierung (BIM).

Alexander Passer is head of the Working Group Sustainable Construction. His research focuses on Life Cycle Sustainability Assessment (LCSA) and Building Information Modeling (BIM)



Martin Röck ist Universitätsassistent und Doktorand in der Arbeitsgruppe Nachhaltiges Bauen. Er ist Experte für Building Information Modeling (BIM) mit Schwerpunkt auf der Integration von Life Cycle Assessment (LCA) in innovativen Designprozessen für zukunftsfähige Gebäudekonzepte.

Martin Röck is junior scientist and PhD candidate in the Working Group Sustainable Construction. He is an expert in Building Information Modelling (BIM) and focuses on integration of Life Cycle Assessment (LCA) in innovative design processes for future-proof building concepts.

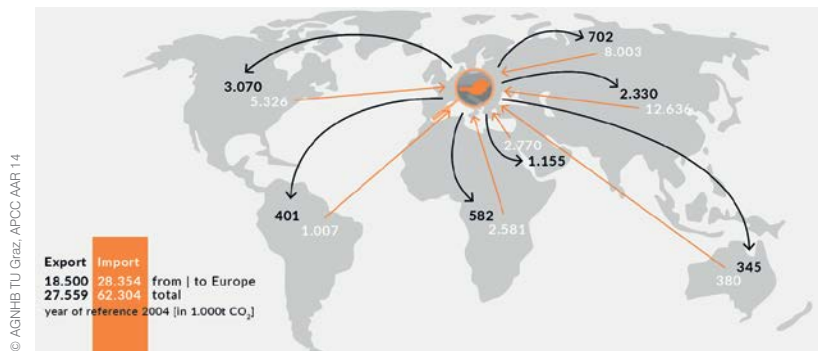


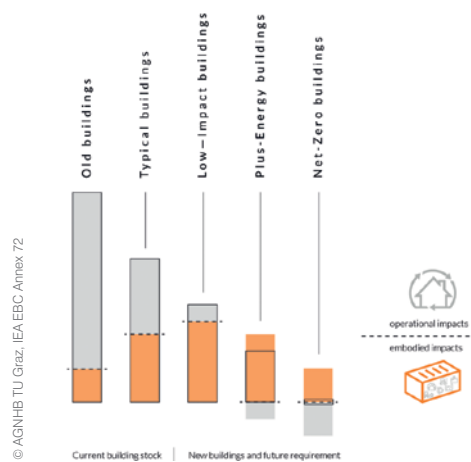
Abbildung 1:
Import/Export-Bilanz der „österreichischen“ Treibhausgasemissionen.

Figure 1:
Import / export balance of "Austrian" greenhouse gas emissions.

Vorgaben für den Gebäudebetrieb (zum Beispiel Energieausweis und bautechnische Vorschriften) bereits eine Steigerung der Energieeffizienz im Neubaubereich erreicht werden konnte. Das Ausmaß der thermischen Sanierung von Bestandsbauten bleibt jedoch noch stark hinter den Erwartungen zurück. Gemeinhin wird oft vergessen, dass nicht nur die Emissionen aus dem Betrieb (bedingt durch Stromverbrauch, Klimatisierung etc.) relevant sind, sondern auch die sogenannten „grauen“ Emissionen. Diese entstehen beim Abbau von Rohstoffen und deren Weiterverarbeitung zu Produkten und deshalb in hohem Maß auch bei der Herstellung von Bauwerken. Vor allem beim Neubau von Gebäuden verschiebt sich der Schwerpunkt der umweltbezogenen Auswirkungen – sowohl relativ als auch absolut – zunehmend von der Nutzungs- auf die Errichtungsphase (siehe Abbildung 2).

Abbildung 2:
Entwicklung betriebsbedingter (operational) und baustoffspezifischer (embodied) Umweltwirkungen.

Figure 2:
Development of operational and embodied GHG emissions.



Die Bewertung und gezielte Beeinflussung von Umweltwirkungen während des ganzen Lebenszyklus von Gebäuden, mit dem Ziel, Verlagerungen in andere Lebenszyklusphasen (siehe Abbildung 3) zu verhindern und die Gesamtbelastung deutlich zu verringern, bildet den Ausgangspunkt des neuen „IEA EBC Annex 72“. Die systematische Analyse der Stoff- und Energieflüsse sowie zugehöriger Emissionen und anderer Umweltwirkungen im Gebäudelebenszyklus erfolgt darin auf Basis der Methode des Life Cycle Assessment (LCA).

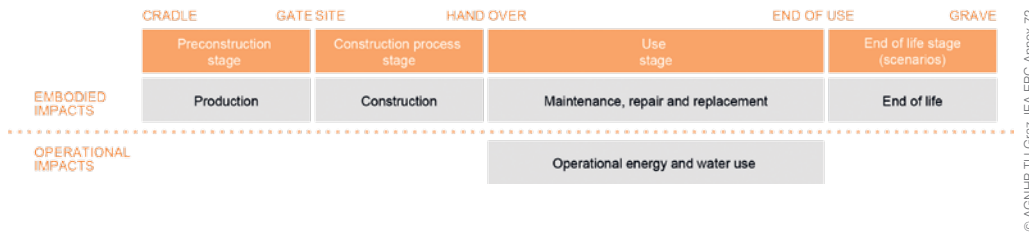
(e.g. energy performance certification and construction regulations), energy efficiency in new buildings has been increased. The extent of the thermal refurbishment of the building stock, however, still falls far short of expectations. It is generally overlooked that not only emissions from building operation (electricity consumption, heating and cooling, etc.) are relevant, but also the so-called "embodied" emissions. These result from the sourcing of raw materials and their processing into products and therefore also occur to a great extent in the manufacturing of buildings. Especially in the construction of new buildings, the focus of environmental impact – both relative and absolute – is increasingly shifting from the use phase to the production and construction phase (see Figure 2).

The evaluation and targeted influencing of environmental impacts during the entire life cycle of buildings with the aim of preventing environmental impacts being shifted into other life cycle stages (see Figure 3) and thus significantly reducing the overall burden, form the starting point of the new "IEA EBC Annex 72". The systematic analysis of material and energy flows as well as associated emissions and other environmental impacts in the building life cycle is based on the Life Cycle Assessment (LCA) method.

IEA EBC Annex 72

In the international research project IEA EBC Annex 72: Assessing Life Cycle Related Environmental Impacts Caused by Buildings, 35 institutes from over 20 countries will develop next steps in the determination of the environmental impacts along the life cycle of buildings. The Austrian representative in the project (duration 4 years) is TU Graz's Sustainable Construction Working Group. In late November the working phase of IEA EBC Annex 72 was officially launched with the first expert meeting at TU Graz.

IEA EBC Annex 72 explores not only the harmonization of assessment methods (Subtask 1) and their integration into digital building design processes (Subtask 2), but also analyses a large number of case studies (Subtask 3) and possible benchmarks for the environmental impact of buildings. The focus of the Austrian participation is the lead of Subtask 2, which seeks to integrate the harmonized assessment methods into workflows and tools of the design process. Computer-aided design methods such as Building Information Modeling (BIM) provide opportunities for integrating relevant information on building components and their specific characteristics in multidimensional, digital building models, enabling, among other things, integrated evaluation and visualization of embodied emissions (Figure 4).



© AGNH TU Graz, IEA EBC Annex 72

Abbildung 3:
Phasen und Umweltwirkungen im Lebenszyklus von Gebäuden.

Figure 3:
Stages and environmental impacts in the life cycle of buildings.

„IEA EBC Annex 72“

35 Institute aus über 20 Ländern werden im internationalen Forschungsprojekt „IEA EBC Annex 72“ relevante Grundlagen zur Ermittlung der gesamten lebenszyklusweiten Umweltwirkungen von Gebäuden erarbeiten. Österreichische Vertreterin im Projekt (Laufzeit 4 Jahre) ist die Arbeitsgruppe Nachhaltiges Bauen der TU Graz, die Ende November auch den ersten offiziellen Workshop der Annex-Expert/innen an der TU Graz ausrichten durfte.

Im Projekt werden neben der Harmonisierung der Bewertungsmethoden (Subtask 1) und deren Integration in computergestützte Planungsprozesse (Subtask 2) auch eine erhebliche Anzahl an Case Studies analysiert (Subtask 3) und mögliche Benchmarks für die Umweltwirkungen von Gebäuden untersucht. Arbeitsschwerpunkt der österreichischen Beteiligung bildet die Leitung von Subtask 2 zur Integration der harmonisierten Bewertungsmethoden in Werkzeuge des Entwurfs- und Planungsprozesses. Computergestützte Planungsmethoden wie das Building Information Modeling (BIM) bieten hier Möglichkeiten, relevante Bauteilinformationen und spezifische Kennwerte innerhalb multidimensionaler, digitaler Gebäudemodelle abzubilden, und ermöglichen unter anderem eine integrierte Ermittlung und Visualisierung grauer Emissionen (Abbildung 4).

Von der grauen Theorie zur praktischen Umsetzung

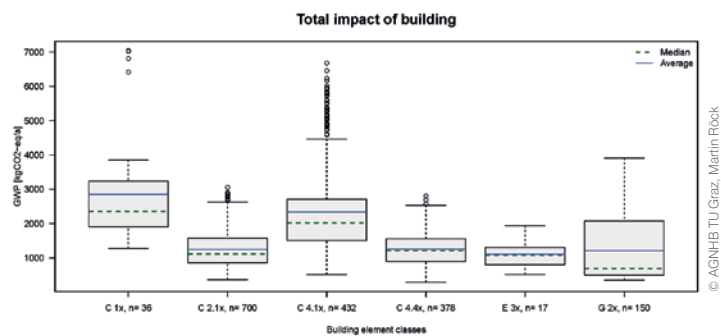
Der „IEA EBC Annex 72“ soll durch die Harmonisierung der Bewertungsmethoden und deren Anwendung im Planungsprozess dazu beitragen, richtungssichere Entscheidungen in Bezug auf die formulierten Klimaziele ermitteln zu können und diese auch in der täglichen Praxis umsetzbar zu machen. In Expert/innenbefragungen und Stakeholder/innen-Workshops sollen Akteurinnen und Akteure aus Praxis, Wissenschaft und Verwaltung aktiv eingebunden werden. Anfang November fand dazu am UN-Klimagipfel in Bonn im Zuge des Building Action Symposiums ein erster Workshop statt, wo konkrete Vorschläge und der „IEA EBC Annex 72“ von Alexander Passer präsentiert wurden. Als Ergebnis des Projekts werden Handlungsempfehlungen und Leitfäden entwickelt, die den einzelnen Akteur/innen Orientierung geben sollen, um die Umsetzung zielgerichteter Strategien im Bereich des nachhaltigen Bauens zu unterstützen. ■

From gray theory to practical implementation

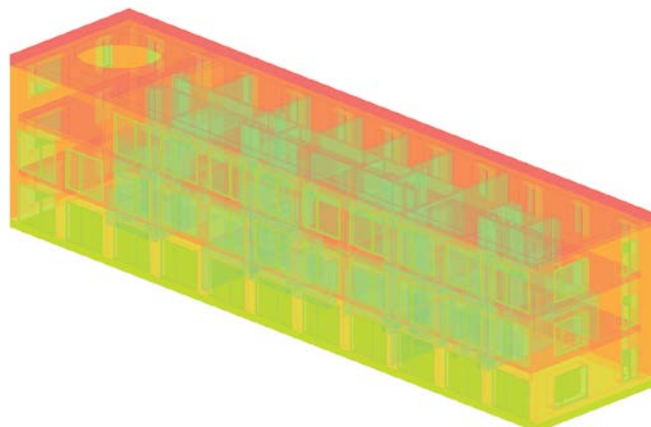
By harmonizing assessment methods and enabling their application in the design process, IEA EBC Annex 72 aims to support the determination of adequate measures with regard to the formulated climate goals and enhance their implementation in the construction sector's daily practice. In the project, expert surveys and stakeholder workshops will be conducted to actively involve stakeholders from everyday practice, science and policy level. At the COP23 summit in Bonn in early November, an initial workshop was held during the Building Action Symposium where specific measures and the IEA EBC Annex 72 were presented by Alexander Passer. As a result of the project, recommendations and guidelines for action will be developed to provide guidance for individual actors and support the implementation of targeted strategies in the field of sustainable construction. ■

Abbildung 4:
Ermittlung und Visualisierung der LCA-Ergebnisse im BIM-basierten Planungsprozess.

Figure 4:
Assessment and visualization of embodied impacts in BIM-based design process.



© AGNH TU Graz, Martin Röck



© AGNH TU Graz, Martin Röck

Eine neue Thermohülle für alte Häuser

A New Thermal Shell for Old Houses

Im „Smart City“-Projekt STELA setzte die TU Graz neue Akzente: Statt Hightech zur thermischen Sanierung mehrgeschoßiger Bestandsbauten rückte man die soziale Verträglichkeit in den Mittelpunkt des Projekts. Mit einer neuen, thermischen Hülle können große Energieeinsparungen erreicht und gleichzeitig in die Jahre gekommene Wohnsiedlungen relativ kostengünstig aufgewertet werden.

Frau Anna hat jetzt mehr Platz. Die Rollstuhlfahrerin wohnt im Erdgeschoß eines elfstöckigen Hauses in Leoben. Im Rahmen des „Smart City“-Projekts STELA der TU Graz wurde an Frau Annas Wohnung im März 2017 der Prototyp einer thermischen Pufferzone montiert: eine wohnliche Stahl-Holz-Hülle mit Glas- und Photovoltaik-Elementen. Im Sommer dient der neue, 30 m² große Raum als Terrasse, im Winter als Wintergarten. Durch die Ummantelung sinkt der Wärmeenergiebedarf der Wohnung um drei Viertel, in der Folge nehmen die CO₂-Emissionen um fast 60 Prozent ab. Und das Beste: Die Konstruktion, mit der sich alte, mehrgeschoßige Bauten aufwerten lassen, ist gleich effizient und kommt nur wenig teurer als die konventionelle Wärmedämmung mit Verbundplatten, die keinen Wohnraumgewinn bringt.

Soziale Verträglichkeit

STELA steht für „Smart Tower Enhancement Leoben Austria“. Das Projekt startete 2013 in einer zentrumsnahen Siedlung in Leoben und hatte das Ziel, eine innovative Lösung für die thermische Sanierung der Häuser zu finden, dadurch den Stadtteil aufzuwerten und neue Mieter anzulocken. Von hier aus ist man in nur fünf Minuten am Leobener Hauptplatz, ohne in ein Auto steigen zu müssen –

TU Graz highlights new features in the Smart City project “STELA”. Instead of relying on high tech for the thermal refurbishment of existing multi-storey buildings, social compatibility returns to the centre stage of the project. Great energy savings can be made by means of a new thermal shell. At the same time ageing housing developments can be given added value relatively cheaply.

Anna has now got more room. A wheelchair user, she lives on the ground floor of an 11-storey house in Leoben. In the framework of the Smart City “STELA” project, the prototype of a thermal shell was installed on Anna’s apartment in March 2017: a habitable steel-wooden shell with glass and photovoltaic elements. In summer the new 30-m² space serves as a terrace; in winter as a conservatory. Due to this envelope, thermal energy demand has been lowered by three quarters, and as a consequence CO₂ emissions reduced by almost 60%. And the wonderful thing is, the construction by which old, multi-storey buildings can be upgraded is as efficient as and only marginally more expensive than conventional insulation using composite sheets which implement no added living space.

Social compatibility

STELA stands for “Smart Tower Enhancement Leoben Austria”. The project was started in 2013 in a housing estate near the centre of Leoben, with the brief to find an innovative solution for the thermal refurbishment of houses which would in turn upgrade the district and attract new tenants. Here you are only five minutes away from the main square of Leoben without having to jump into a car – keyword “soft mobility”. The housing development

Abbildung 1:
Innenansicht des neuen, sehr hellen
Raumes.
Figure 1:
Inside the new, luminescent room.

Stichwort „sanfte Mobilität“. In der Siedlung stehen zehn Häuser mit je fünf bis elf Stockwerken, darin befinden sich über 300 Wohnungen mit einheitlichem 75-m²-Grundriss, ausgelegt auf die Zweikindfamilie der 1970er-Jahre. Das Projektteam der TU Graz sollte auch Wege finden, auf den mittlerweile geänderten Wohnraumbedarf reagieren zu können. Das war recht einfach: Für die flexible Anpassung der Wohnungsgrößen wurden verschiedene Grundrissvarianten entwickelt, die sich mit relativ wenig Aufwand umsetzen lassen. Einen längeren Weg musste das Projektteam zurücklegen, um eine passende Antwort auf die Frage nach der angemessenen thermischen Sanierung zu finden.

„Unsere erste Idee war es, für die Häuser eine neue Hülle zu schaffen, die von den Einsparungswerten her das gleiche Ergebnis erzielt wie die konventionelle Sanierung mit Wärmedämmverbundplatten“, erzählt Projektleiter Hans Gangoly, Vorstand des Instituts für Gebäudelehre. „Ursprünglich wollten wir für diesen Ansatz aktuelle Materialentwicklungen kombinieren, wie z. B. High-Performance-Beton, aber auch digitale Steuerungsmöglichkeiten. Die technischen Lösungen wären allerdings für die Bewohnerinnen und Bewohner der Siedlung nicht finanzierbar gewesen“, sagt Gangoly. In der Kommunikation mit den Mieterinnen und Mietern wurde schnell klar, dass die Leistbarkeit einer solchen Konzeption oberste Priorität für eine Akzeptanz haben würde. Der Aspekt der sozialen Verträglichkeit rückte damit ins Zentrum der Bemühungen. 2014 wurden eine Hotline und ein Dialogbüro in der Siedlung eingerichtet, das über den Projektfortschritt informierte und Anregungen entgegennahm. Im Frühjahr 2017 wurde zudem in einem der Häuser eine „E-Lobby“ eröffnet, wo sich die Mieter kostenlos E-Bikes ausborgen konnten.

Sonne, Wärme, Energie

Auf der gestalterischen Seite räumte man der Kostenfrage oberste Priorität ein. Das Architekturteam entwickelte für die thermische Pufferzone konventionelle Stahl-Holz-Konstruktionen, die den Wohnraum nach außen hin vergrößern. Im Modell ziehen sich diese Module wie verglaste, zwischen den Wohnungen abgeteilte Umlaufbalkone um die Wohngeschoße und bilden eine neue Fassade. Bis zur Decke reichende Einfachverglasungen lassen Sonne und damit Wärme in den entstehenden Raum. Die Glasflächen sind zu zwei Drittel beweglich – so ist auch für die nötige Frischluftzufuhr und den Wärmeausgleich gesorgt. Damit nicht genug: Mit Photovoltaik-elementen, die unterhalb der Verglasungen auf der Ost-, Süd- und Westseite des Gebäudes angebracht sind, produziert das Haus genug Strom für den Eigenbedarf. >

consists of ten apartment houses, each of five to eleven storeys, which contain more than 300 dwellings, every one with a uniform layout of 75 m² designed for the two-child family of the 1970s. The task of the project team of TU Graz was to find ways of responding to today's changed living space demands. This aspect was quite easy. A variety of layouts were developed which can be implemented at relatively little cost for the flexible adaptation of the dwelling size. But the project team had to go down a much longer route to find a suitable answer to the question of appropriate thermal refurbishment.



© Alexander Gebetsroither

“Our first idea was to create a new shell for the houses which would yield the same savings as conventional refurbishment using heat installation composite plates,” explains project leader Hans Gangoly, head of the Institute of Design and Building Typology. “Originally, we wanted to combine current developments in materials in this approach, such as high-performance concrete, and also draw on possibilities for digital control. But the technical solutions were not affordable for the residents of the housing development,” says Gangoly. During consultations with the tenants it became clear very quickly that the affordability of such a concept was key for it to be accepted. The aspect of social compatibility thus became the focus of our efforts. A hotline and a dialogue office was set up in the housing development in 2014 to inform people about progress in the project and also to receive any suggestions. As a crowning initiative, in early >

Abbildung 2:
Im Gebäudeinneren entstand ein heller Raum mit 30 m², der im Sommer als bequeme Terrasse und im Winter als warmer Wintergarten genutzt wird.

Figure 2:
The bright 30-m² space may be used as a terrace in the summer and as a conservatory in the winter.

Abbildung 3:
Die thermische Pufferzone: Außen am Gebäude wurde eine Stahl-Holz-Hülle mit Glas- und Photovoltaik-Elementen montiert, die den Stromverbrauch drastisch senkt.

Figure 3:
The thermal shell: a steel-wooden shell with glass and photovoltaic elements was installed on the surface of the building, which drastically lowered the energy demand.



© Alexander Gebetsroither

„Eine Erkenntnis aus dem Projekt war für uns, dass sich nicht jedes Ziel mit rein technischen Lösungen erreichen lässt“, resümiert Hans Gangoly. „Einen Mehrwert für die Gesellschaft haben innovative Gebäudelösungen nur dann, wenn sie für die Leute auch finanzierbar sind.“ Das ist bei STELA gelungen. Rechnet man Kosten und Einsparungen beim Pilotprojekt gegeneinander auf, so erhöht sich die Wohnungsmiete durch die Thermohülle mit der 30 m² großen Zusatzfläche im günstigsten Fall um 24 Euro pro Monat. Im Vergleich: Eine konventionelle thermische Sanierung erhöht die Miete um 13 Euro, bringt aber abgesehen von der gestiegenen Energieeffizienz keinerlei Mehrwert.



© Alexander Gebatsrother

Abbildung 4:
**Der Ausblick vom neuen Raum
aus auf einen kleinen Park ist
sehenswert.**

Figure 4:
*The view from the new
space onto a little park is
breathtaking.*

Dennoch – und das ist die bittere Pille, die STELA schlucken muss – haben sich die Bewohner der Leobener Siedlung mehrheitlich gegen die innovative Sanierung ihrer Häuser entschieden. Die Stadtgemeinde Leoben als Eigentümerin der Siedlung hat das Projekt damit ad acta gelegt. Dafür zeigen andere Wohnbauträger bereits Interesse an den Thermo-Modulen, die im Rahmen von STELA entwickelt wurden.

Siedlungen wie diese, in sehr guter Lage, aber nicht mehr zeitgemäßem Zustand, gibt es in jeder österreichischen Stadt“, sagt Hans Gangoly. „Unser Modell kann für sehr viele Gemeinden und Wohnbauträger interessant sein. Wenn wir unseren Ansatz weiter systematisieren, kann das Modul noch kostengünstiger gefertigt werden; rasch anbringen lässt es sich schon jetzt.“ Frau Anna beispielsweise musste lediglich für zwei Tage ausziehen, als der Prototyp der Thermohülle an ihre Wohnung angebaut wurde. Jetzt hat sie mehr Platz und als Einzige in ihrer Siedlung einen hellen Zusatzraum, in dem sie sich gerne aufhält.

Text: Werner Schandor ■

2017 an “e-lobby” was opened in one of the houses where tenants could borrow e-bikes free of charge.

Sun, heat, energy

On the design side, we gave top priority to the issue of costs. The architectural team developed conventional steel-wooden constructions for the thermal buffer zone which would enlarge the living space outwards. In the model, these modules go round the residential floors like glazed, divided running balconies and form a new facade. Single glass panels which reach up to the ceiling allow sun and thus heat into the created space. Two thirds of the glass surfaces are moveable and thus provide the necessary fresh air supply and heat equilibrium. And if this were not enough, the house produces enough electricity for its own use by means of photovoltaic elements attached to the glazing on the east, south and west sides of the building.

“One realisation we gained from the project was that not every objective can be achieved through technical solutions alone,” sums up Hans Gangoly. “Innovative building solutions only achieve added value for society when people can afford them.” This was achieved with STELA. If you calculate costs against savings in the pilot project – for the thermal shell with its additional 30 m² surface area, the rent increases in the cheapest case by 24 euros per month. In comparison, a conventional thermal refurbishment increases the rent by 13 euros but brings with it no added value apart from increased energy efficiency.

However, and this is the bitter pill which STELA has to swallow, the residents of the housing development in Leoben voted against taking up this innovative refurbishment of their apartment houses. The municipality of Leoben as housing developer of the estate has therefore shelved the project. However, other residential housing developers have shown interest in the thermal modules which were developed in the framework of STELA.

“Housing estates like this one, very well situated but no longer up to contemporary standards, can be found in every Austrian town,” says Hans Gangoly. “Our model could be of interest for very many councils and housing developers. If we make our approach even more systematic, the module can be produced even more cheaply. It can be built on quickly even now.” For example, Anna only had to move out for two days while the prototype of the thermal shell was built onto her apartment. Now she’s got more space and is the only person on the estate to have a bright additional room where she is very happy to spend time.

Text: Werner Schandor ■

NOTIONS
 $(G_1 * G_2) = V(\dots)$
 $(x_1, x_2), (y_1, y_2) \in E$
 $= y_1$ and $(x_2, y_2) \in E$
 or
 $(x_1) \in E(G_1)$ and x

$(x_1) \in E(G_1)$ and
 $(x_1) \in E(G_1)$ and x
 $(x_1) \in E(G_1)$ and

$(x_1) \in E(G_1)$ or (x_1, y_1)

Abbildung 1:
Tafelbild, wie es für Lehrveranstaltungen
im Bereich „Discrete Mathematics“
üblich ist.

Figure 1:
A typical blackboard in the field of
discrete mathematics.

Überhaupt nicht diskret Not At All Discrete

Nomen ist nicht omen: Mit ihrer Exzellenz-Initiative im Bereich „Discrete Mathematics“ lassen TU Graz, KF-Uni Graz und Montanuni Leoben aufhorchen – weil sie sich eben überhaupt nicht diskret verhalten.

„Jeder, den Sie fragen, wird die Grenzen anders ziehen“, sagt Wolfgang Woess, spricht man ihn darauf an, was „Discrete Mathematics“ ist. Irgendwie tatsächlich diskret, weil eben nicht exakt abgrenzbar – und das in einem Bereich, der sonst der Inbegriff für Exaktheit ist: Mathematik. Und Woess muss es wissen, hat er doch eine der beiden Professuren auf dem entsprechenden Institut an der TU Graz inne. Als solcher ist er auch Leiter des Doktoratskollegs „Discrete Mathematics“, das die TU Graz gemeinsam mit der Karl-Franzens-Universität Graz und der Montanuniversität Leoben initiiert hat.

Discretus

Der Begriff für dieses Forschungsgebiet leitet sich ab vom lateinischen *discretus*, das Partizip Perfekt von *discernere*. Das Verb bedeutet „absondern, unterscheiden, trennen“. *Discretus* ist also das Gegenteil von „kontinuierlich“, von dessen Synonym „stetig“. Also „unstetig“. Und auf dieser Unterscheidung beruht eben die diskrete Mathematik. Kombinatorik, Graphentheorie, Zahlentheorie, Wahrscheinlichkeit sind einige der Stichworte, mit denen sich diese Wissenschaft auseinandersetzt. Anwendungsgebiete: unter anderem die Kryptographie zur Absicherung von elektronischen Systemen.

Doktoratskolleg

Während die Kryptographie mit >

It's not all in the name: with their excellence initiative in the field of discrete mathematics, TU Graz, the Uni Graz and the University of Leoben are causing people to sit up and take notice – because they're not behaving discretely at all.

“Everyone you ask will have a different idea of the boundary,” says Wolfgang Woess, on being asked what discrete mathematics is all about. Somehow it is actually discrete because it can't be exactly demarcated – which is surprising in a field which is the epitome of exactness: mathematics. And Woess should know since he holds two professorships at the eponymous institute of TU Graz. As professor, he is also the head of the Discrete Mathematics doctoral programme, which was initiated by TU Graz together with the University of Graz and the University of Leoben.

Discretus

The term for this research area is derived from the Latin “discretus” – the perfect participle of “discernere”. It means to isolate, to distinguish, to separate. It's thus the opposite of “continuous” and its synonym “constant”. In other words, changeable. And discrete mathematics is based on this distinction. Combinatorial analysis, graph theory, number theory and probability are some of the keywords of this discipline. Areas of application include cryptography to secure electronic systems, among other areas.

Doctoral programme

While cryptography is closely interwoven with discretion, the three Styrian universities, in contrast, don't make a secret of their activities. Together they >

Cooperations

> INFORMATION,
COMMUNICATION &
COMPUTING

Diskretion ja eng verwoben ist, halten die drei steirischen Universitäten ihr Wirken hingegen nicht geheim: Sie haben gemeinsam das Doktoratskolleg gegründet, dessen Hauptgeldgeber der Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (FWF) ist – mit tatkräftiger Unterstützung der drei Trägerinitiativen. Es ist eine Exzellenz-Initiative im Bereich der diskreten Mathematik und wird von Wolfgang Woess geleitet.

established a doctoral programme whose main financial backer is the Austrian Science Fund (FWF) – with active support from the three involved universities. The doctoral programme is an excellence initiative in the field of discrete mathematics and is headed by Wolfgang Woess.

Together with originally nine, but currently ten and in 2019 eleven other professors, Woess is forming a group of faculty members who have taken on the task of broadening research in this field and promoting budding mathematicians. And with evident success – not least due to the international network on which the group places so much value. The doctoral students are integrated into the far-reaching network of the group and its members, which spans Germany, Switzerland, France, Italy, Hungary, Slovenia, Czech Republic, Poland, Great Britain, Iceland, USA, Australia and Canada.

This scholarly and social exchange “is a very important aspect”, explains Woess, “since it has to be sustainable”. This is an aspiration which the Austrian Science Fund also shares. Woess has been promoting the initiative for two four-year periods. Currently he and his colleagues are working on a time-consuming application for the third period.

Alumni

If you take a quick look at the careers of the programme’s graduates – more than a third of whom are women – nothing should stand in the way of the programme being extended. The doctoral students of the first generation can be found in well-known positions all over the world: in famous universities in the USA, Canada and Paris – Johns Hopkins University, Warwick, Birmingham and in many other eminent tertiary educational institutes.

This internationalisation is one of the strengths of the programme, and for this reason only a short while ago some of the current doctoral students met up in Strobl with their colleagues from Zurich and Berlin to exchange experiences. For Woess, such meetings are among the most important keys to success. Sharing knowledge and experiences advances scholarship, and it works even better when everyone knows each other personally.

Support

Another factor of success is the intensive supervision of the budding mathematicians by the pool of professors in the faculty. “We support them, but we make demands on them, too. We place great value on the creativity of the doctoral students, especially when it’s a matter of developing new research approaches and introducing new ideas about how to achieve new results,” stresses Woess. “We expect a certain amount of cleverness!” Which in the best



© Institut für Diskrete Mathematik

Abbildung 2:
Wolfgang Woess (ganz links im Bild) bei der Eröffnung des Doktoratskollegs 2010.

Figure 2:
Wolfgang Woess (left) attending the doctoral programme opening in 2010.

Gemeinsam mit ursprünglich neun, mittlerweile zehn und ab 2019 elf weiteren Professorinnen und Professoren bildet er ein Kollegium, das es sich zur Aufgabe gemacht hat, die Forschung in diesem Bereich auszuweiten und zugleich den Nachwuchs zu fördern. Mit Erfolg, wie sich zeigt – nicht zuletzt aufgrund der internationalen Vernetzung, auf die das Kollegium so großen Wert legt: Die Doktorantinnen und Doktoranden werden eingebunden in das weitreichende Netzwerk des Kollegiums und seiner Mitglieder, das sich von Deutschland, der Schweiz und Frankreich über Italien, Ungarn, Slowenien, Tschechien, Polen, Großbritannien sowie Island bis in die USA, nach Australien und Kanada spannt.



© Institut für Diskrete Mathematik

Abbildung 3:
Feier zum 75. Geburtstag von Wilfried Imrich (Montanuniversität Leoben), der als Emeritus und „senior associated scientist“ das Kolleg positiv beeinflusst.

Figure 3:
Celebration on the 75th birthday of Wilfried Imrich (University of Leoben) who as emeritus and “Senior associated scientist” has a positive influence at the doctoral school.

Dieser wissenschaftliche wie auch gesellschaftliche Austausch „ist ein ganz wichtiger Punkt“, erklärt Woess, gehe es doch darum, nachhaltig zu wirken. Ein Anspruch, den auch der FWF erhebt. Er fördert die Initiative bereits seit zwei Vierjahresperioden, derzeit arbeitet Woess mit seinen Kolleginnen und Kollegen gerade an der zeitintensiven Bewerbung für die dritte Periode.

Alumni

Wirft man einen Blick auf die Werdegänge der

bisherigen Absolventinnen und Absolventen – mehr als ein Drittel von ihnen sind Frauen –, dürfte der Verlängerung des Programms nichts im Wege stehen. Die Doktorandinnen und Doktoranden des ersten Turnus findet man mittlerweile auf der ganzen Welt in renommierten Positionen: auf namhaften Universitäten in den USA, in Kanada und Paris – Johns Hopkins University, Warwick, Birmingham und viele andere bedeutende Hochschulen finden sich auf der Liste.

Dieser Turnus ist eine der Stärken des Programms, und so trafen sich erst unlängst einige der derzeitigen Doktorandinnen und Doktoranden mit ihren Kolleginnen und Kollegen aus Zürich und Berlin in Strobl, um sich dort auszutauschen. Für Woess zählen solche Meetings zu den wichtigen Schlüsseln zum Erfolg. Das Teilen von Erfahrungen und Wissen bringt die Wissenschaft voran, und das funktioniert eben viel besser, wenn man einander auch persönlich kennt.

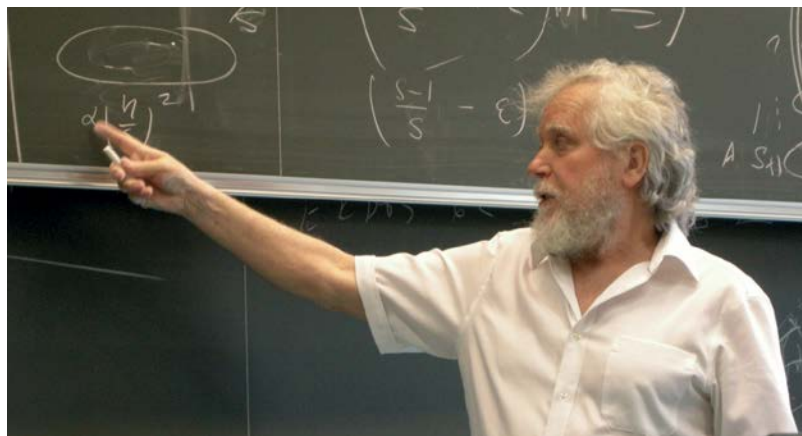
Förderung

Ein weiterer Erfolgsfaktor ist die intensive Betreuung des Nachwuchses durch die im Kollegium zusammengeführten Professorinnen und Professoren. „Wir fördern sie, fordern sie aber auch. Wir legen Wert auf die Kreativität der Doktorandinnen und Doktoranden, vor allem, wenn es darum geht, neue Forschungsansätze zu entwickeln und innovative Ideen einzubringen, wie man zu neuen Resultaten gelangt“, betont Woess. „Wir verlangen schon ein gutes Maß an Klugheit!“ Die im besten Fall dazu führt, dass selbst die erfahrenen Professorinnen und Professoren einmal ins Staunen geraten. „Das ist natürlich das Optimum, unser Wunsch – und manchmal wird er auch erfüllt“, zollt er manch junger Mathematikerin bzw. manch jungem Mathematiker durchaus Respekt. Diese stammen übrigens fast zur Hälfte aus Österreich, die anderen kommen in erster Linie aus dem übrigen Europa in die Steiermark, aber auch aus China, Südkorea, Neuseeland, den USA und demnächst aus Afrika sind Vertreterinnen und Vertreter mit von der Partie.

Bis sie ins Doktoratskolleg aufgenommen werden, haben sie ein hartes Auswahlverfahren hinter sich. An die 150 Bewerberinnen und Bewerber mit einem Masterstudium in Mathematik oder einem Studium mit mathematischer Ausrichtung gab es bei den ersten Durchgängen. Nach der ersten Vorauswahl auf Basis der Bewerbungsunterlagen wurden an die 50 von ihnen zum Hearing geladen – jeweils 20 von ihnen kamen dann in das Programm.

Text: Michael Samec ■

cases leads even experienced professors to stand back in admiration of a student. “That’s obviously the best thing, what we want – and sometimes it’s fulfilled,” he says, paying respect to a number of younger mathematicians. Incidentally, almost half of the mathematicians come from Austria. The other half first and foremost come from the rest of Europe, but some come from China, South Korea, New Zealand and the USA as well as Africa.



© Institut für Diskrete Mathematik

They have gone through a hard selection procedure by the time they have been accepted into the doctoral degree programme. The first rounds consisted of some 150 applicants who have a master’s degree in mathematics or a degree where they majored in mathematics. After the preliminary selection was carried out on the basis of the application documents, some 50 were invited to a hearing, of whom 20 entered the programme.

Text: Michael Samec ■

Abbildung 4:
Berühmter Gast 2013: Endre Szemerédi, ungarischer Mathematiker am Rényi-Institut und Abel-Preisträger 2012.

Figure 4:
Famous guest 2013: Endre Szemerédi, Hungarian mathematician at the Rényi Institute (Budapest) and winner of the Abel Prize 2012.

Abbildung 5:
Gemeinsame Aktivitäten: Ausflug des Doktoratskollegs in die Südsteiermark.

Figure 5:
Social activities: the doctoral programme on a trip to southern styria.



© Institut für Diskrete Mathematik

Mit Thiface zum internationalen Doktorat

An International PhD via Thiface

Vierzehn junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler arbeiteten die vergangenen vier Jahre über ganz Europa verteilt im multidisziplinären Trainingsnetzwerk Thiface gemeinsam am Thema Advanced Materials und finalisieren nun ihr grenzüberschreitendes Doktorat.

Gemeinsames Forschen und internationale Zusammenarbeit sind zentrale Eckpfeiler, auf denen die Arbeit an der TU Graz aufbaut und die die Universität intensiv fördert. Erst kürzlich konnte wieder ein erfolgreiches europaweites Projekt mit zentraler Beteiligung des Instituts für Festkörperphysik der TU Graz abgeschlossen werden. Thiface ist ein europaweites Trainingsnetzwerk, das vom europäischen Forschungsnetzwerk PCAM (Physics and Chemistry of Advanced Materials) ins Leben gerufen wurde.

Mit Thiface wurde es nun 14 jungen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern aus der ganzen Welt, die sich an einer europäischen Universität beworben hatten, ermöglicht, gemeinsam und multidisziplinär an einem Thema zu arbeiten und jeweils ihre eigene PhD-Arbeit voranzutreiben. Finanziert wurde das Programm über die Marie-Sklodowska-Curie-Fördermaßnahmen. Zwei dieser jungen Forschenden traten ihre Stelle an der TU Graz an.

Nachhaltige Energielösungen

Grundidee im Trainingsnetzwerk Thiface war es, die Forschung an nachhaltigen, effizienteren und kostengünstigeren Energielösungen zu fördern. Die Forschungsaktivitäten fokussierten auf neue Ideen und Techniken im Bereich neue Energiesysteme und hybride Photovoltaik. Ge-

In the last four years, 14 young scientists worked in the field of advanced materials across Europe in the multidisciplinary training network Thiface and are now completing their cross-border doctoral degrees.

Joint research and international collaboration are the main cornerstones on which the work which is intensively promoted by TU Graz is built. Recently a Europe-wide project was brought to a successful conclusion with the centre-stage involvement of TU Graz's Institute of Solid State Physics. Thiface is a European training network which was initiated by the European research network PCAM (Physics and Chemistry of Advanced Materials).

Thiface enabled 14 young scientists from all over the world to work together on a topic in a multidisciplinary way and to each further their own PhD thesis at a European university. The programme was funded by the EU funding scheme Marie Skłodowska-Curie Actions. Two of these aspiring scientists have since taken up their jobs at TU Graz.

Sustainable energy solutions

The fundamental idea of the Thiface training network was to promote research into sustainable, more efficient and economical energy solutions. The research activities focused on novel ideas and techniques in the field of new energy systems and hybrid photovoltaics. Research was conducted in five areas of work – starting from the basics and moving towards production and stability. But the students were not limited to their own research areas. A key element of the training programme was international mobility and specialized training of the

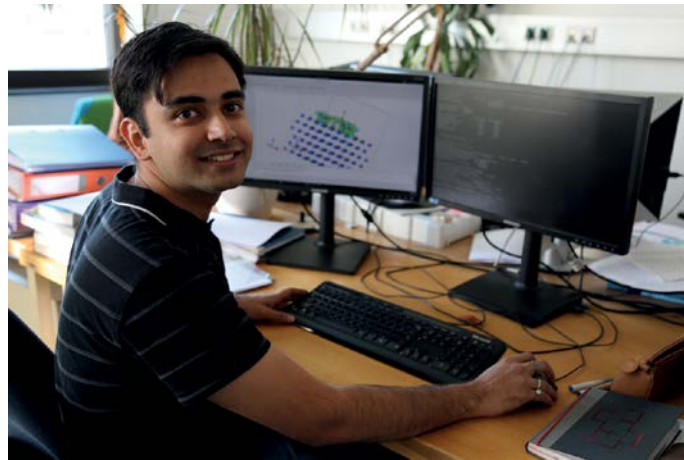
Abbildung 1:
Grundidee im Trainingsnetzwerk Thiface war es, die Forschung an nachhaltigen, effizienteren und kostengünstigeren Energielösungen zu fördern.

Figure 1:
The fundamental idea of the Thiface training network was to promote research into sustainable, more efficient and economical energy solutions.

forscht wurde in fünf Arbeitsbereichen – von den Grundlagen bis zu Bauelementherstellung und Stabilität. Für die Studierenden blieb es aber nicht nur bei ihrem eigenen Forschungsgebiet: Zentrales Element der Ausbildung war nämlich der fachliche und internationale Austausch. So verbrachten die Studierenden längere Zeit an einer der Partneruniversitäten oder an einem der Partnerunternehmen im europäischen Ausland und forschten dort auch abseits ihres eigentlichen Forschungsschwerpunktes. „Ich komme ursprünglich aus dem Bereich Materialmodellierung und Simulation, habe mich aber während eines halben Jahres an der University of Southern Denmark in Sønderborg intensiv mit dem Thema Fabrikation beschäftigt“, erzählt Shashank Harivyasi.

Er ist einer von zwei internationalen Studenten, die über das Programm eine Doktoratsstelle an der TU Graz bekommen haben. Er absolvierte sein Masterstudium am Amity Institute of Nanotechnology in Uttar Pradesh, Indien, und beendete es mit seiner Master-Arbeit an der TU Graz. Seine Forschungsarbeit in Graz konnte er fortsetzen, in dem er sich erfolgreich um eine der Thinline-PhD-Stellen in Graz bewarb. „Ich habe für meine Masterarbeit speziell nach auf diesem Gebiet tätigen Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftern gesucht und bin bei Egbert Zojer fündig geworden“, erzählt der Forscher. „Das ist ein sehr ungewöhnlicher Weg, denn im Normalfall entscheiden Studierende auf Master-Ebene nach dem Namen der Universität und suchen erst im Postdoc-Bereich nach Betreuerinnen bzw. Betreuern, die vom Thema her zu ihnen passen. Dass Shashank das schon in einem so frühen Stadium anders gemacht hat, hat mich durchaus beeindruckt“, erklärt Egbert Zojer, Betreuer der Master- und PhD-Arbeit von Shashank Harivyasi und Forscher am TU Graz-Institut für Festkörperphysik.

Am Netzwerk sind außer der TU Graz die University of Southern Denmark (drei Studierende), die Technische Universität Dresden (ein Studierender), die Université Pierre et Marie Curie (ein Studierender), die Università degli Studi di Milano-Bicocca (zwei Studierende), die Universidad Autónoma de Madrid (zwei Studierende), Abengoa Research (eine Studierende) und CIC nanoGune (zwei Studierende) beteiligt. Darüber hinaus gab es Unterstützung von Synchrotron SOLEIL und den >



© Bausstätter – TU Graz

scientists. To this end the students spent much time at one of the partner universities or partner companies. In other European countries to carry out research outside their own particular research areas. “I have a background in materials modelling and simulation – but during my six months at the University of Southern Denmark in Sønderborg I turned my attention towards device fabrication,” explains Shashank Harivyasi.

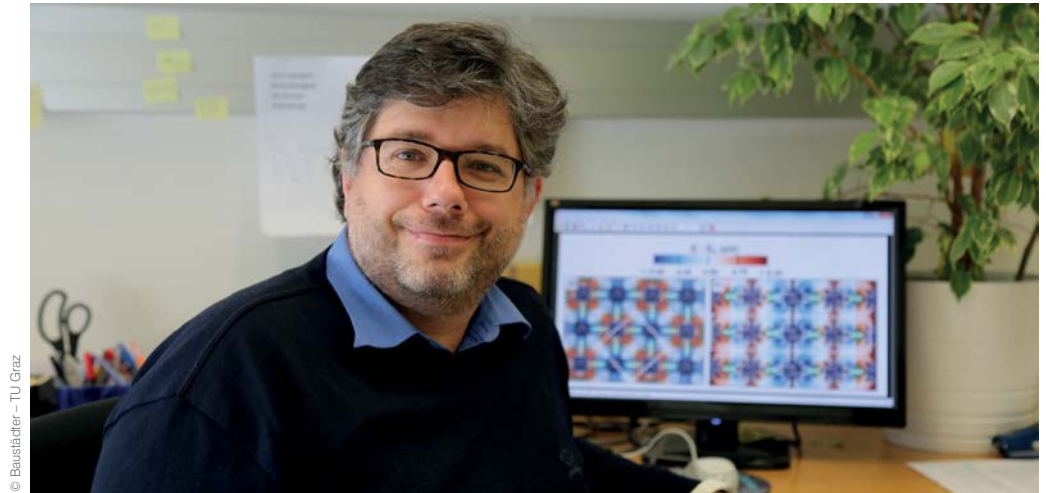
He is one of two international students who had been given a doctoral place at TU Graz through the programme. He did his masters’s studies at Amity Institute of Nanotechnology in Uttar Pradesh, India, and he concluded them by conducting research for his master’s thesis at TU Graz. He then continued the research by successfully applying for one of the Thinline-associated PhD positions at Graz. “For my master’s thesis I particularly sought researchers in this field and came across Egbert Zojer,” explains the researcher. “This is a very unusual way to go about it. Usually students at the master’s level make their choice based on the name of their future host university, and only at the post-doc level seek out researchers which suit their field. I was impressed by Shashank doing that differently,” explained Egbert Zojer, supervisor of Shashank Harivyasi’s master’s and doctoral theses and researcher at TU Graz’s Institute of Solid State Physics.

In addition to TU Graz, the Thinline-network also includes the University of Southern Denmark (three students), TU Dresden (one student), Université Pierre et Marie Curie (one student), Università Degli Studi di Milano-Bicocca (two students), Universidad Autónoma de Madrid (two students), Abengoa Research (one student) and >

Abbildung 2:
Shashank Harivyasi kam für sein Masterstudium nach Graz und schloss einen PhD über das Trainingsnetzwerk Thinline an.
Figure 2:
Shashank Harivyasi did his master’s thesis in Graz and continued his PhD with the training network Thinline.

Abbildung 3:
Egbert Zojer ist am Netzwerk
PCAM beteiligt und initiierte
das Projekt Thinline mit.

Figure 3:
Egbert Zojer is part of the
PCAM network and helped to
initiate the Thinline project.



© Baustädter – TU Graz

fünf Firmen Novaled, Plasmore, Pirelli, Graphenea S.A. und Mecwins.

Internationaler Austausch

Shashank Harivyasi fungierte auch als Repräsentant der PhD-Studierenden, vertrat ihre Interessen im Lenkungsconsortium des Netzwerks und organisierte auch die abschließenden Summer Schools mit. „Die Vernetzung hat ganz wunderbar geklappt“, freut sich der Physiker. „Wir hatten ausreichend Gelegenheiten, uns zu treffen, neue Forschungslandschaften kennenzulernen und Kontakte zu anderen Forschungseinrichtungen aufzubauen.“ Haben die Studierenden darüber hinaus zumindest eine Prüfung an einer anderen europäischen Einrichtung abgelegt, können sie über ihren Dokortitel hinaus auch ein internationales Forschungszertifikat über ihre paneuropäische Erfahrung von der Universität Milano-Bicocca bekommen.

Wissenschaftlicher Output

Neben den vielfältigen Möglichkeiten zur persönlichen Weiterentwicklung ist auch der wissenschaftliche Output der 14 Dissertationen nicht zu vernachlässigen. Bisher wurden 38 Veröffentlichungen, zwei Patente und zwei Poster-Awards gezählt. „Vermutlich werden wir in den kommenden Jahren aber auf insgesamt rund 50 Veröffentlichungen kommen. Derzeit werden noch zahlreiche Publikationen abgeschlossen und wir warten auf gemeinsam veröffentlichte Bücher“, erklärt Shashank Harivyasi.

Text: Birgit Baustädter ■

CIC nanoGune (two students). There was also support from Synchrotron SOLEIL and the five companies Novaled, Plasmore, Pirelli, Graphenea S.A. and Mecwins.

International exchange

Shashank Harivyasi also acted as a representative of the PhD students, championed their interests in the steering group of the network and helped organising the final summer school. “The network worked amazingly,” says the delighted physicist. “We had many opportunities to meet each other, to get to know new research communities and make contacts with other research institutes.” If students take an exam at another European institute, in addition to their PhD they can receive an international research certificate for their pan-European experience from the University of Milano-Bicocca.

Academic output

On top of the possibility for students to evolve personally, the academic output of the 14 doctoral students is not to be ignored. So far this includes 38 publications, two patents and two poster awards. “In the next few years this will probably amount to some 50 publications altogether. We’re currently waiting for several papers as well as jointly published books,” explains Shashank Harivyasi.

Text: Birgit Baustädter ■

Forschung @ www.tugraz.at: Bleiben Sie auf dem Laufenden! *Research @ www.tugraz.at: Keep up to date!*



© Fotolia

TU GRAZ RESEARCH MONTHLY

Mit dem Forschungsnewsletter erhalten Sie jeden Monat ausgewählte Beiträge rund um aktuelle Forschungsthemen an der TU Graz – verpackt in News, Geschichten, Interviews und Blogbeiträge. Zudem informieren wir Sie über die nächsten Event-Highlights in den Bereichen Wissenschaft und Forschung an der TU Graz. Die Anmeldung ist ab sofort über die TU Graz-Website möglich:

> www.tugraz.at/go/research-monthly

PLANET RESEARCH

Erfahren Sie, woran die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der TU Graz in den Fields of Expertise und darüber hinaus forschen und wie sich ihre Ergebnisse auf unser Leben auswirken. Lernen Sie junge Forschungstalente kennen und informieren Sie sich über Forschungsinfrastruktur der TU Graz:

> www.tugraz.at/go/planet-research

FIELDS OF EXPERTISE

Erfahren Sie mehr über die fünf Fields of Expertise und aktuelle Forschungsprojekte:

> www.tugraz.at/go/foe

TU GRAZ RESEARCH MONTHLY

Research highlights straight to your mailbox

The monthly research newsletter provides you with selected news, stories, interviews and blog posts from the world of research at TU Graz. We will also be informing you about upcoming events in science and research at TU Graz.

You can subscribe to "TU Graz research monthly" by following this link:

> www.tugraz.at/go/research-monthly-en

PLANET RESEARCH

See what our researchers are doing in the Fields of Expertise and other areas, and learn about how their results will affect our lives. Get to know young research talent and keep informed about research infrastructure at TU Graz:

> www.tugraz.at/go/planet-research-en

FIELDS OF EXPERTISE

Find out more about the five Fields of Expertise and current research projects:

> www.tugraz.at/go/fields-of-expertise



research

ISSN 2074-9643

© Verlag der Technischen Universität Graz 2017, www.ub.tugraz.at/Verlag

Fields of Expertise der TU Graz Fields of Expertise of TU Graz



Die fünf Fields of Expertise sind Kompetenzbereiche, die zu einzigartigen Markenzeichen der TU Graz im 21. Jahrhundert werden sollen. Gestärkt werden die Fields of Expertise durch thematisch neue Professuren und Investitionen sowie intensive Zusammenarbeit mit Industrie und Wirtschaft in Form von zahlreichen gemeinsamen Beteiligungen an wissenschaftlichen Kompetenzzentren und Forschungsnetzwerken. Kooperationen mit wissenschaftlichen Partneereinrichtungen wirken als weiterer Motor zum Erfolg.

Five Fields of Expertise will become distinctive hallmarks of Graz University of Technology in the 21st century. They will be strengthened by new professorships in new areas and investments as well as intensive co-operation with business and industry in the form of numerous shared participations in competence centres and research networks. Cooperations with scientific partner institutes represent a further dynamo to success.