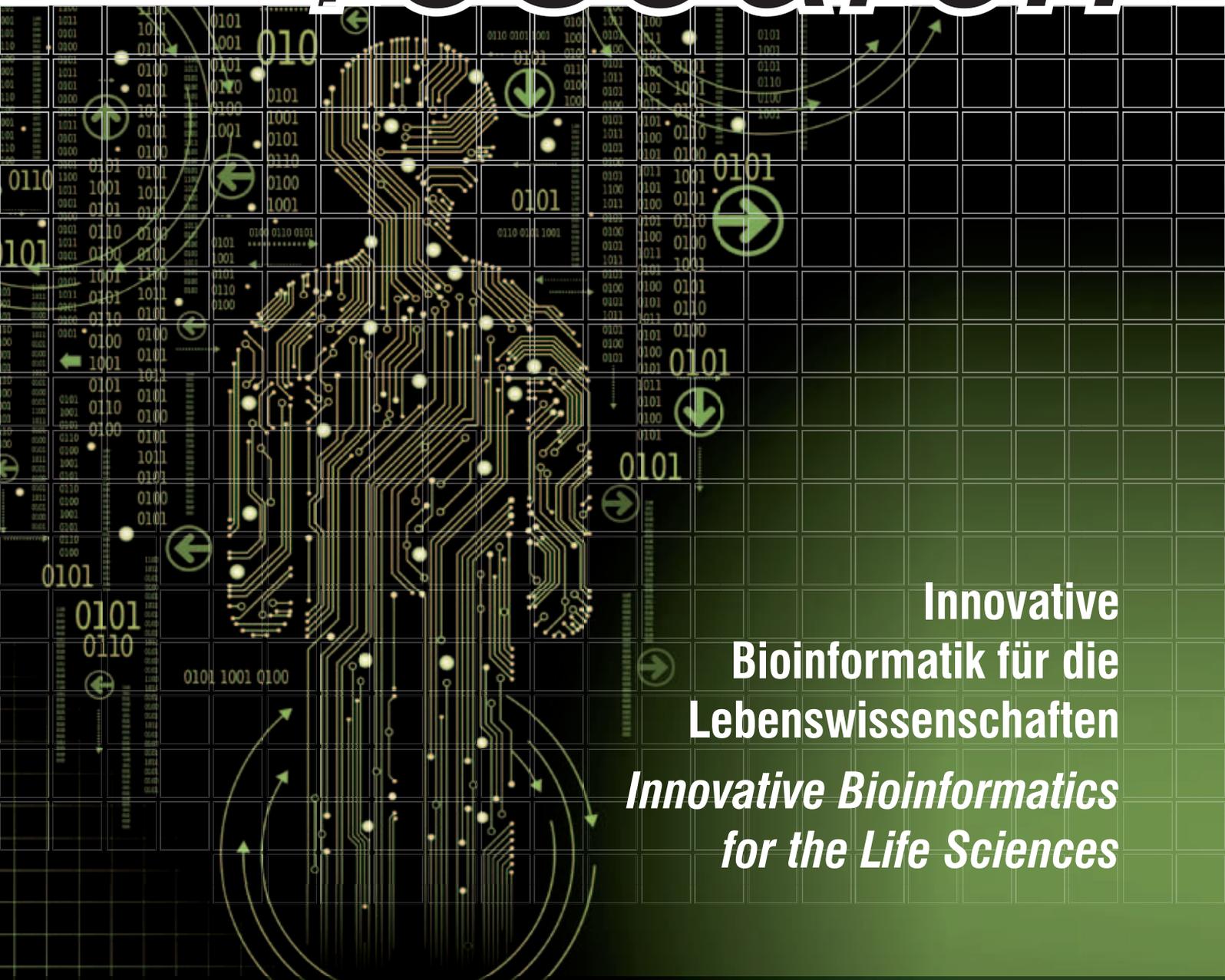


TU GRAZ *research*



Innovative Bioinformatik für die Lebenswissenschaften *Innovative Bioinformatics for the Life Sciences*

Korrelierte topologische Isolatoren: Alte Materialien mit neuen Eigenschaften ■ Im Fokus: Computational Biotechnology ■ Quasi-Zufall auf Abruf ■ Betriebsstrategien für Hybridantriebe ■ Festoxidbrennstoffzelle – eine vielversprechende Zukunftstechnologie

Correlated Topological Insulators: Old Materials with New Properties ■ Focus on Computational Biotechnology ■ Pseudo-Randomness on Demand ■ Operating Strategies for Hybrid Drivetrains ■ Solid Oxide Fuel Cells: A Promising Future Technology

Inhalt / Contents

3 Vorwort / Preface

On the Top

4 Innovative Bioinformatik für die Lebenswissenschaften

Innovative Bioinformatics for the Life Sciences

Mario Albrecht, Ines Hopfer-Pfister

Fields of Expertise

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

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

10 Advanced Materials Science
Klaus Reichmann, Leiter/Head of FoE „Advanced Materials Science“

11 Korrelierte topologische Isolatoren: Alte Materialien mit neuen Eigenschaften
Correlated Topological Insulators: Old Materials with New Properties
Markus Aichhorn

14 Human & Biotechnology
Gernot Müller-Putz, stellvertretender Leiter/Deputy Head of FoE „Human & Biotechnology“

15 Im Fokus: Computational Biotechnology
Focus on Computational Biotechnology
Christoph W. Sensen

18 Information, Communication & Computing
Johannes Wallner, Leiter/Head of FoE „Information, Communication & Computing“

19 Quasi-Zufall auf Abruf
Pseudo-Randomness on Demand
Peter Grabner
Robert Tichy

22 Mobility & Production
Helmut Eichseder, Leiter/Head of FoE „Mobility & Production“

23 Betriebsstrategien für Hybridantriebe
Operating Strategies for Hybrid Drivetrains
Wolfgang Monschein
Peter Grabner

26 Sustainable Systems
Urs Hirschberg, Leiter/Head of FoE „Sustainable Systems“

27 Festoxidbrennstoffzelle – eine vielversprechende Zukunftstechnologie
Solid Oxide Fuel Cells: A Promising Future Technology
Vanja Subotić
Christoph Schluckner
Christoph Hochenauer

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 Das IBL LeanLab – die erste Lernfabrik der TU Graz
The IBL LeanLab: The First Training Factory at Graz University of Technology
Doris Griesser

Co-operations

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 Forschungsverbund für atomare Auflösung
Research Association for Atomic Resolution
Annemarie Happe

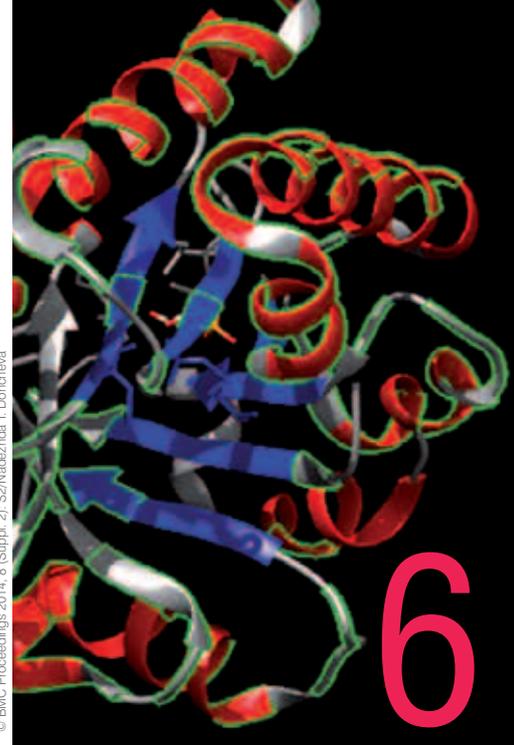
Internationalisation

EXZELLENTER 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 Die bessere Wirklichkeit
A Better Reality
Verena Ahne

© BMC Proceedings 2014, 8 (Suppl. 2): S2/Natezhida, T. Doncheva





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 everyone interested in our research activities,

Sie halten gerade die neueste Ausgabe unseres Forschungsjournal TU Graz *research* in Ihren Händen, die sich in der Coverstory der Initiative BioTechMed und im Speziellen dem Thema Bioinformatik widmet. Dazu aber später mehr. Zu allererst möchte ich die freudige Nachricht über die ersten beiden ERC Grants, die an die TU Graz gegangen sind, überbringen:

Stefan Freunberger und Thomas Pock haben kürzlich zwei ERC Starting Grants vom European Research Council bekommen: Stefan Freunberger für ein Thema aus dem Bereich der Batterieforschung (FoE „Advanced Materials Science“) und Thomas Pock für ein Thema aus dem Bereich der Computer Vision (FoE „Information, Communication & Computing“). In der Geschichte der TU Graz sind die beiden Forscher die ersten ERC-Preisträger überhaupt. ERC Starting Grants unterstützen exzellente Forscherinnen und Forscher in einem frühen Karrierestadium auf dem Weg in die wissenschaftliche Unabhängigkeit. Die maximale Förderung beträgt 1,5 Millionen Euro für fünf Jahre. Ich gratuliere beiden Forschern ganz herzlich zu dieser herausragenden Leistung. In einem nächsten Forschungsjournal werden wir detailliert über die Forschungsprojekte berichten. Als ich als Vizerektor antrat, setzte ich mir zum Ziel, dass auch die TU Graz einen ERC Grant erhält. Dieses Ziel ist nun übererfüllt, worüber ich mich sehr freue. Aber mit dem Essen wächst der Appetit und ich hoffe, dass noch zahlreiche dieser Auszeichnungen folgen werden.

Aber nicht nur bei den ERC Grants gibt es herausragende Erfolge zu vermelden. In der letzten FWF-Kuratoriumssitzung wurden sechs Projekte (davon zwei Schrödinger-Projekte) genehmigt. Das Bemerkenswerte daran ist, dass fünf dieser Projekte von Frauen geholt wurden – bei den momentanen FWF-Bewilligungsraten eine herausragende Leistung.

Die Coverstory dieses TU Graz *research* ist dem Thema Bioinformatik gewidmet. Nachdem dieses Thema seit dem Abgang von Prof. Zlatko Trajanowski an der TU Graz nicht besetzt gewesen ist, haben wir seit Kurzem zwei neue Kollegen, die sich diesem für den Standort so wichtigen Thema widmen. Kollege Albrecht hat eine Stiftungsprofessur des Landes Steiermark (wofür ich mich an dieser Stelle recht herzlich bedanke) und ist einer der neuen BioTechMed-Professorinnen und -Professoren. Kollege Sensen ist an der Chemie-Fakultät angesiedelt. Ich wünsche beiden Kollegen viel Erfolg und Freude mit ihrer neuen Tätigkeit.

Weihnachten naht und nach der hektischen Vorweihnachtszeit bleibt hoffentlich während der Feiertage auch etwas Zeit, in diesem Forschungsjournal zu schmökern. In diesem Sinne wünsche ich bei der Lektüre dieses TU Graz *research* viel Freude und Ihnen und Ihren Familien frohe Weihnachten und einen guten Rutsch.

You're holding the latest issue of our research journal TU Graz research in your hands and this time its cover story is dedicated to the BioTechMed initiative and to bioinformatics, in particular. More about this later. First of all, good news about the first ever ERC grants to Graz University of Technology.

Stefan Freunberger and Thomas Pock have recently been awarded two ERC Starting Grants from the European Research Council: Stefan Freunberger for a topic in the field of battery research (FoE Advanced Materials Science) and Thomas Pock for a topic in the field of Computer Vision (FoE Information, Communication & Computing). These two researchers are the first ever to have been awarded ERC grants in the history of the University. ERC Starting Grants support excellent researchers in an early career stage on the way to scientific independence. The maximum funding is 1.5 million euros over five years. My sincere congratulations go to both of them for this outstanding achievement. We will report on the research projects in detail in a future issue. When I took over as Vice Rector, one of my aims was to make sure that Graz University of Technology is awarded an ERC grant. I am extremely pleased to say that this goal has now been over-fulfilled. But, as appetite grows with eating, I hope that more of these awards will follow.

But the good news is not limited to ERC grants. At the last meeting of the board of trustees of the Austrian Science Fund (FWF), six projects were approved (two of which are Schrödinger projects). What is remarkable about this is that five of the projects were picked up by women – a great achievement in view of the Austrian Science Fund's present approval rates.

The cover story of this issue of TU Graz research is dedicated to bioinformatics. Although not addressed at the University since Zlatko Trajanowski's departure, this extremely important subject is now being focused on by two new colleagues. Mario Albrecht holds a professorship endowed by the State of Styria (for which I'd like to extend my sincere thanks) and is one of the new BioTechMed professors. Christoph Sensen works at the Faculty of Technical Chemistry, Chemical and Process Engineering and Biotechnology. I wish both colleagues much success and joy in their new activities.

Christmas is approaching and, after the hectic pre-Christmas rush, hopefully there'll be time to browse through our journal during the holidays. In this spirit, I hope you enjoy reading this new issue, and I wish you and your families a merry Christmas and a very good new year.

Horst Bischof



Mario Albrecht, Ines Hopper-Pfister

Innovative Bioinformatik für die Lebenswissenschaften

Innovative Bioinformatics for the Life Sciences

Von der Neurowissenschaft über Gesundheitsforschung bis hin zur Bioinformatik: BioTechMed-Graz agiert an der Schnittstelle von Mensch, Medizin und Technik. Die erfolgreiche Kooperation zwischen den drei Grazer Universitäten TU Graz, Karl-Franzens-Universität und Medizinischer Universität setzt neue Impulse am Wissenschaftsstandort Graz. Dank der interuniversitären Forschungsplattform konnte auch die Bioinformatik an der TU Graz weiter gestärkt werden.

From neuroscience and health research to bioinformatics, BioTechMed-Graz is at the interface of people, medicine and technology. The successful collaboration between three Universities in Graz, i.e. Graz University of Technology, the University of Graz and the Medical University of Graz is creating new momentum for the research location Graz. As part of the inter-university research platform, it is now possible to strengthen bioinformatics research at Graz University of Technology further.



Abbildung 1:
BioTechMed: drei Grazer Universitäten auf Erfolgskurs. TU Graz-Vize rektor für
Forschung Horst Bischof, BioTechMed-Professorin Christine Moissl-Eichinger,
Uni Graz-Rektorin Christa Neuper, BioTechMed-Professor Mario Albrecht sowie
MedUni Graz-Rektor Josef Smolle (v. l. n. r.)

Figure 1:
BioTechMed: three Graz universities set on a course for success. Graz University of Technology Vice Rector of Research Horst Bischof, BioTechMed Prof. Christine Moissl-Eichinger, Uni Graz Rector Christa Neuper, BioTechMed Prof. Mario Albrecht and MedUni Graz Rector Josef Smolle (from left to right.)

„Innovation durch Kooperation“ lautet wohl das Motto der drei Grazer Universitäten, die sich im Jahr 2012 zum Forschungsverbund BioTechMed-Graz zusammengeschlossen haben. Im Rahmen von BioTechMed-Graz bündeln die drei Big Player ihre bereits vorhandenen Kompetenzen in den vier großen gemeinsamen Forschungsthemen „Molekulare Biomedizin“, „Neurowissenschaften“, „Pharmazeutische und medizinische Technologie“ sowie „Quantitative Biomedizin und Modellierung“. Gemeinsame Forschung für die Gesundheit ist das große Ziel, die durch die optimale Nutzung der Infrastruktur auch eine verstärkte internationale Sichtbarkeit mit sich bringt.

BioTechMed-Graz dient als Plattform, um Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus dem biomedizinischen Bereich zusammenzubringen. „Im Rahmen dieser Initiative haben wir auch mehr Möglichkeiten, Spitzenforscherinnen und -forscher nach Graz zu holen“, wie Horst Bischof, Vize rektor für Forschung an der TU Graz, unterstreicht. Beispielhaft dafür ist die gemeinsame Ausschreibung und Besetzung von vier neuen Professuren im Rahmen von BioTechMed. Eine dieser vier BioTechMed-Professuren wurde dem Fachbereich Bioinformatik gewidmet. Die Professur wird drei Jahre lang vom Land Steiermark gefördert und ist seit März dieses Jahres an der TU Graz angesiedelt. >

“Innovation through cooperation” is the motto of the three Universities in Graz, which united in the “Forschungsverbund BioTechMed-Graz” in the year 2012. Through BioTechMed-Graz, the three big players bundle the already existing competences into four larger joint research areas “Molecular Biomedicine,” “Neurosciences,” “Pharmaceutical and Medical Technology,” as well as “Quantitative Biomedicine and Modeling.” Combined research activities for health are the big goal, with heightened international visibility through optimal use of the available shared infrastructure.

BioTechMed serves as the platform that allows researchers in the biomedical area to connect. “In the framework of this initiative, we have more possibilities to recruit top scientists to Graz,” says Horst Bischof, Vice Rector of Research of Graz University of Technology. An example for this is the joint recruitment of four new professors via BioTechMed to Graz. One of these four new BioTechMed professorships is dedicated to bioinformatics. This appointment, which has been in effect since March 2014, will be funded for three years by the State of Styria. >

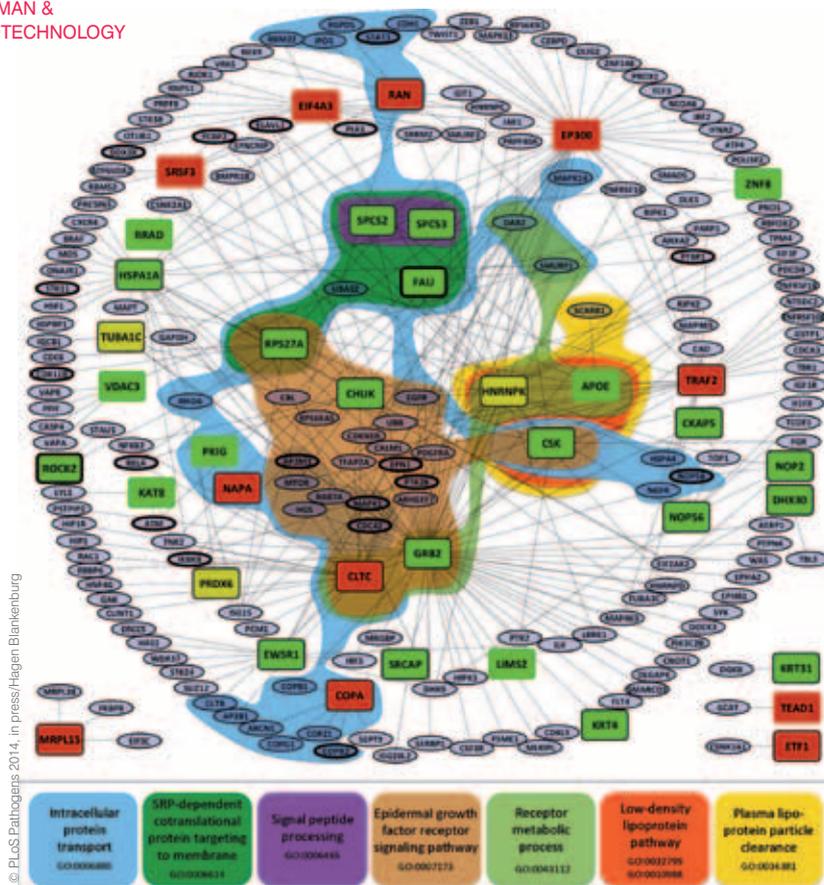


Abbildung 2 :
Netzwerkdarstellung der Wechselwirkungen humaner Gene und Proteine, die für die Vermehrung des Hepatitis-C-Virus in menschlichen Zellen relevant sind. Die farblich hinterlegten Gene und Proteine sind den unten angeführten Funktionsbeschreibungen zugeordnet.
Figure 2:
Network representation of the interactions of human genes and proteins, which are relevant to the life cycle of the hepatitis C virus in human cells. The functions of the genes and proteins in colored areas are described at the bottom.

Aufschwung für die Bioinformatik an der TU Graz

Die Bioinformatik ist eine junge, interdisziplinäre Wissenschaft und bildet eine Schnittstelle zwischen Biologie, Medizin, Statistik und Informatik. Die Anwendungsbereiche sind breit gefächert und reichen von neuen Methoden zur Diagnose und Therapie genetischer Krankheiten über die Unterstützung bei der Züchtung neuer Nutzpflanzenrasen bis hin zur Erzeugung von Medikamenten auf biologischen Wegen. Durch die ständige Erweiterung der Anwendungsfelder besteht nach wie vor ein hoher Bedarf an zusätzlichen Bioinformatikerinnen und Bioinformatikern weltweit. Universitäten sind daher gefragt, das Lehr- und Forschungsangebot auszuweiten – die TU Graz hat darauf entsprechend reagiert.

„Durch die Initiative BioTechMed ist es uns gelungen, die Professur Bioinformatik mit Mario Albrecht an der TU Graz einzurichten, parallel dazu konnte auch eine Professur für Computational Biotechnology mit Christoph Sensen besetzt werden“, freut sich Horst Bischof über die Neuzugänge und die damit verbundene Stärkung der Bioinformatik an der TU Graz. Während Christoph Sensen sich mit der Auswertung von Hochdurchsatzexperimenten aus der Genomforschung und der Entwicklung von Bioinformatikpipelines für solche Experimente auseinandersetzt (mehr über seine Forschungen auf Seite 15 f.), widmet sich Mario Albrecht einem kompletären Bereich der Bioinformatik.

Bioinformatics revival at Graz University of Technology

Bioinformatics is a relatively young, interdisciplinary research area, at the intersection of biology, medicine, statistics and informatics. The application domains of research results from bioinformatics are widespread, covering new diagnostic methods and therapeutic approaches for genetic diseases, the support of plant breeding, and the creation of new pharmaceutical compounds through biological production. Through the continual expansion of the application areas, there is a high demand for additional scientists with bioinformatics skills worldwide. Universities are therefore challenged to expand the teaching as well as the research in the area of bioinformatics, and Graz University of Technology is now responding to this with the recruitment of two new professors.

“Through BioTechMed, we were able to install the bioinformatics professorship for Mario Albrecht, in parallel, we were also able to recruit Christoph Sensen for a professorship for computational biotechnology”, reports Horst Bischof enthusiastically about the efforts to strengthen the field of bioinformatics at Graz University of Technology. While Christoph Sensen focuses on the analysis of high-throughput genomics experiments and the development of new bioinformatics analysis pipelines (see also page 15 f.), Mario Albrecht concentrates on a complementary field of bioinformatics research.

New bioinformatics methods

Mario Albrecht develops new bioinformatics methods that can be used to filter the most important facts from the vast experimental data collections in biology and medicine, with the goal of discovering and visualizing hidden molecular interactions. The main focus is on the integrative data analysis and creation of network models, in particular, with the goal of better understanding the cause and course of diseases. Through this, the bioinformatics professorship will contribute to all four areas of BioTechMed-Graz, but first and foremost to the area of molecular and quantitative biomedicine. The large quantities of genomic data, which are available today, have to be connected to functional knowledge about cellular processes, as well as quantitative results from high-throughput omics experiments such

```

1 11 21 31 41
2 ARTFFVGGNF K L N G K K E I V E R L N A I P E V E V V I C P P A Y L D Y
2 ARTPFVGGNW K M N G T K A E A K E L V E A L K A . K L P D D V E V V V A P P A V Y L D T A

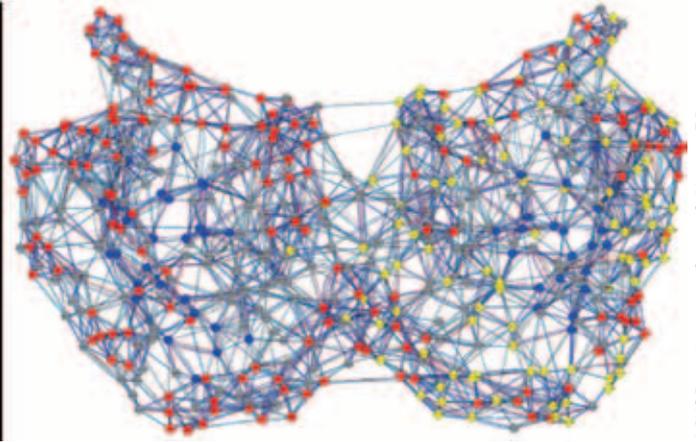
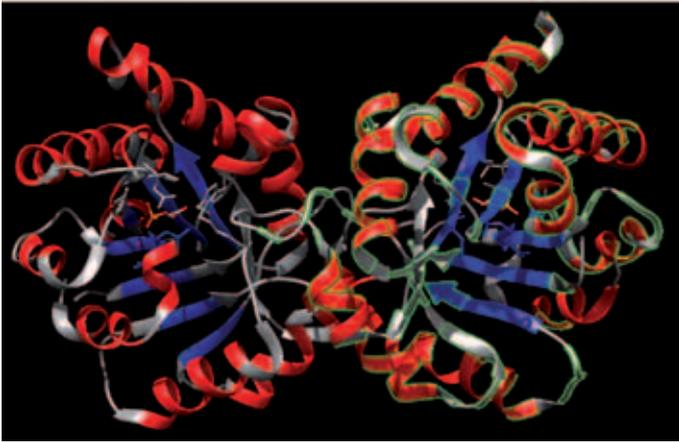
51 61 71 81 91
52 L V K K P V V G A Q N A Y L K A G A F T G E S V D I K D V G A K V I L G H S E R R
51 E A L K G S K I K V A A Q N C Y K E A K G A F T G E I S P E M L K D L G A D Y V I L G H S E R R H

101 111 121 131 141
102 F H E D D K F I A D K K E A L G S V G V I L C I B E T L E E K K A G K T L D V V E R Q L A V
101 F G E T D E L V A K K V A H A L E H G L K V I A C I G E T L E E R E A G N T E E V V F R Q T K A L

151 161 171 181 191
152 E E V K D . W N V V V A Y E P V W A I S T G L A A T P E D A Q D I H A I R K L A K I G D K
151 A S L G D E W K N V V I A Y E P V W A I S T E K T A T P E Q A Q E V H A F I R K W L A E N V S A E

201 211 221 231 241
201 A E L R I L Y G S S A G N A V F K D K A D D G F L V G G A S L K P E F L D I I N S R N
201 A E S V R I L Y G S S V K P A N A K E L A A O P D I D G F L V G G A S L K P E F L D I I N S R N

```



© BMC Proceedings 2014, 8 (Suppl. 2): S2/Nabzhdia T. Doncheva

Neue Bioinformatikmethoden

Mario Albrecht entwickelt neue Bioinformatikmethoden, um die wichtigsten Informationen aus der großen experimentellen Datenflut der Biowissenschaften und Medizin herauszufiltern und verborgene molekulare Beziehungen zu entdecken und zu visualisieren. Der Fokus der Forschung liegt dabei auf der integrativen Datenanalyse und der Erstellung von Netzwerkmodellen, insbesondere um Ursachen und Verlauf von Krankheiten besser zu verstehen. So wird die Bioinformatik-Professur zu allen vier Forschungsthemen von BioTechMed-Graz beitragen, insbesondere zur molekularen, quantitativen Biomedizin. Die heutzutage in großen Mengen produzierten Genomikdaten sind oft mit Wissen über die Funktion zellulärer Vorgänge sowie mit quantitativen Omik-Hochdurchsatzdaten wie der Transkriptomik, Metabolomik und Proteomik zu verknüpfen. Durch diese Integration von genomischen Sequenzdaten mit Funktionswissen und dynamischen Daten wie zum Beispiel aus Genexpression, metabolischen Stoffwechselwegen und Proteininteraktionen wird es erst möglich, biologische Prozesse im Detail zu analysieren und zu modellieren. Um die Daten zu verarbeiten und hinsichtlich funktioneller Zusammenhänge zu interpretieren, entwickelt die Bioinformatik effiziente Informationssysteme und Algorithmen. Daher stehen im Rahmen der Professur nicht nur die methodischen Anwendungen der Bioinformatik in Biologie und Medizin im Fokus, sondern auch die >

as transcriptomics, metabolomics or proteomics. Through this integration of genomic sequences with knowledge about function as well as dynamic data such as from gene expression, metabolic pathways or protein interactions, it will become possible to analyze biological processes in detail and create models. Bioinformaticians develop efficient algorithms and information systems to process and interpret the data with the aim of elucidating the functional relationships. Therefore, the bioinformatics professorship is not only focused on the application of bioinformatics in the biological and medical field, but also on the computational aspects, such as the development of efficient network algorithms, database searches, knowledge technologies, modeling methods, and the visual analysis of molecular data. The developed bioinformatics methods are applied in close collaboration with biologists and medical researchers and implemented as software packages and web services so that they can be utilized easily by researchers in the life sciences. To this end, the bioinformatics agenda also includes training and teaching modules.

Molecular and medical bioinformatics

Especially for medical research, where the topic of personalized medicine is beginning to play a larger role, it is still a big challenge to integrate molecular data with functional information about biological processes in healthy and diseased >

Abbildung 3: Visuelle Analytik von Sequenzvariationen unterschiedlicher Triosephosphat-Isomerasen (scTIM und dTIM). Die oben dargestellten Sequenzunterschiede sind unten in der Proteinstruktur (links) und der entsprechenden Netzwerkrepräsentation (rechts) abgebildet.
Figure 3: Visual analysis of sequence variations of triosephosphate isomerases (scTIM and dTIM). The sequence differences displayed in the upper part are mapped to the protein structure (left) and the network representation (right) in the lower part.



Mario Albrecht: BioTechMed-Professor für Bioinformatik BioTechMed Professor of Bioinformatics

Mario Albrecht studierte Informatik an der Universität in Passau, an der University of Manchester und an der Universität in Bonn. 2006 promovierte er in Bioinformatik an der Universität des Saarlandes. Von 1999 bis 2002 war er als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Fraunhofer-Institut für Algorithmen und Wissenschaftliches Rechnen (SCAI) in Sankt Augustin tätig, danach am Max-Planck-Institut für Informatik in Saarbrücken. Von 2008 bis 2012 war Albrecht an diesem Max-Planck-Institut Leiter der Forschungsgruppe „Molekulare Netzwerke in der Medizinischen Bioinformatik“. Von Jänner 2012 bis März 2014 war er Professor für Bioinformatik am Institut für Biometrie und Medizinische Informatik der Universitätsmedizin Greifswald, bevor der 39-Jährige als Professor für Bioinformatik an die TU Graz wechselte.

Mario Albrecht studied informatics at the University of Passau, the University of Manchester and the University of Bonn. He gained his doctorate in bioinformatics at Saarland University in 2006. From 1999 to 2002 he was research associate at the Fraunhofer Institute for Algorithms and Scientific Computing SCAI in St. Augustin, following this at Max Planck Institute for Informatics at Saarbrücken. From 2008 to 2012 he was head of the research group "Molecular Networks in Medical Bioinformatics" at Max Planck Institute. From January 2012 to March 2014 he was professor of bioinformatics at the Institute of Biometrics and Medical Informatics at the Medical University of Greifswald before the 39-year-old was appointed professor of bioinformatics at Graz University of Technology.

informatischen Aspekte wie effiziente Netzwerkalgorithmen, Datenbanksuchen, Wissenstechnologien und Modellierungsmethoden sowie die visuelle Analytik der molekularen Daten. Die entwickelten Bioinformatikmethoden werden außerdem in engen Kooperationen mit Biologinnen und Biologen sowie Medizinerinnen und Medizinern angewandt und in einsatzfähige Software und Webservices umgesetzt, sodass sie von Forscherinnen und Forschern in den Lebenswissenschaften leicht verwendet werden können. Hierfür sollen auch geeignete bioinformatische Trainingskurse und Lehrveranstaltungen angeboten werden.

Molekulare und medizinische Bioinformatik

Gerade in der aktuellen medizinischen Forschung, in der die personalisierte Medizin immer wichtiger wird, ist es noch eine große Herausforderung, molekulare Daten zusammen mit Informationen über die Funktion biologischer Vorgänge im gesunden und kranken Zellzustand zur Interpretation individueller Variationen des menschlichen Genoms zu verwenden. Das Ziel der Bioinformatik ist es hierbei, krankheitsrelevante Genomvariationen wie zum Beispiel Sequenzmutationen zu identifizieren und ihre funktionelle Auswirkung auf die Krankheit möglichst genau abzuschätzen. Hierzu werden bioinformatische Methoden benötigt, die aus vorhandenen Daten und bekanntem biologischen Wissen mögliche molekulare Effekte ableiten können und zuverlässige funktionelle Vorhersagen generieren. Dies ist für den Arzt bzw. die Ärztin zur verlässlichen Diagnose, Prognose und Therapieplanung von Krankheiten von größter Wichtigkeit und erfolgreiche Bioinformatikmethoden werden immer mehr Verwendung in der klinischen Praxis finden.

Zur Repräsentation von biologischem Wissen eignen sich nicht nur Datenbanken, sondern insbesondere auch Netzwerke. Die Vielzahl von Wechselwirkungen unterschiedlicher Moleküle (u. a. Gene, Proteine, Metaboliten, Lipide und Nukleinsäuren) wird am besten durch Interaktionsnetzwerke dargestellt. Mittels Netzwerkalgorithmen der Informatik lassen sich diese Interaktionsnetzwerke näher analysieren und zur Interpretation molekularer

cell states for the interpretation of individual variants of the human genome. The objective of bioinformaticians in this case is to identify genomic variations (for example, sequence mutations) relevant to the disease and to determine their functional impact. To achieve this, bioinformatics approaches are needed that can be used to derive potential molecular effects from existing data and biological knowledge and to generate reliable functional predictions. This is very important for the medical doctor for the dependable diagnosis, prognosis, and the planning of the therapy. Therefore, successful bioinformatics methods will be used more and more in clinical practice.

Not only databases, but especially networks are capable of representing biological knowledge. The multitude of interactions amongst molecules (e.g. genes, proteins, metabolites, lipids or nucleic acids) is best represented by interaction networks. The detailed analysis of these networks can be achieved through the use of network algorithms from computer science, which allows the interpretation of molecular high-throughput data (Figure 2). At the same time, networks can be used to model biological mechanisms on the molecular level, for example, the impact of sequence variations on protein function (Figure 3). For diseases, subnetworks can point to potential biomarkers. Thus the development of suitable innovative network methods for the study of dynamic processes in cells is an important task of current bioinformatics research.

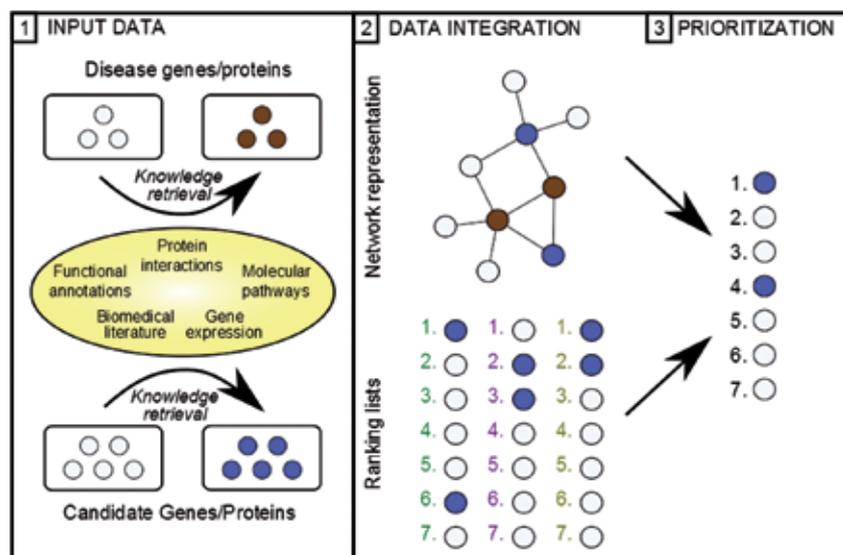
Finally, bioinformatics becomes increasingly more important in the design and prioritization of new biological experiments through the generation of functional hypotheses. Time and resources can be saved through reliable predictions about cellular processes and their function on the molecular level. This requires sophisticated computer methods that calculate ranked lists of genes, proteins or molecular processes with respect to their relevance for the disease (or phenotype),

Hochdurchsatzdaten anwenden (Abb. 2). Gleichzeitig können mittels Netzwerken biologische Mechanismen auf molekularer Ebene modelliert werden, zum Beispiel die Auswirkung von Sequenzvariationen auf Proteinfunktionen (Abb. 3). Bei Krankheiten dienen Teilnetzwerke auch als mögliche Biomarker. Daher ist die Entwicklung geeigneter innovativer Netzwerkmethoden eine wichtige Aufgabe der aktuellen bioinformatischen Forschung zu dynamischen Vorgängen in der Zelle.

Schließlich spielt die Bioinformatik durch die Generierung funktioneller Hypothesen eine immer bedeutsamere Rolle bei der Auswahl und Priorisierung weiterer Experimente. Durch verlässliche Vorhersagen über zelluläre Prozesse und ihre molekulare Beeinflussung können im Labor viel Zeit und enorme Kosten eingespart werden und so die Erfolge von Experimenten optimiert werden. Hierfür benötigt man ausgefeilte Computermethoden, die aus diversen Datenmengen und zusätzlichem biologischen Wissen Ranglisten von Genen, Proteinen oder molekularen Prozessen im Hinblick auf ihre Relevanz für eine Krankheit (oder allgemein einer zellulären Situation) berechnen (Abb. 4). Oft sind auch völlig unterschiedliche Ranglisten miteinander zu vergleichen und zu integrieren, um eine finale Priorisierung vornehmen zu können. Auch auf diesem Forschungsgebiet, das seine informatischen Wurzeln z. B. bei der Priorisierung von Webseiten hat, gibt es noch einige Herausforderungen zu lösen, um die besonderen biologischen Gegebenheiten in den Ranglistenalgorithmen zu berücksichtigen.

Grazer Forschungsarbeiten in Bio- und Medizininformatik

Insgesamt lässt sich beobachten, dass die Bedeutung der Bioinformatik in den letzten Jahren aufgrund der generierten Datenmengen und der damit möglichen Anwendungen in den Lebenswissenschaften stark zunahm und sich die medizinische Bioinformatik auch immer mehr mit der klinischen Medizininformatik verzahnt. Daher organisiert Mario Albrecht zusammen mit seinem Kollegen Christoph Sensen ab Jänner eine universitätsübergreifende Vortragsreihe verschiedener Grazer Institutionen, in der die Methoden und Werkzeuge der Bio- oder Medizininformatik möglichen Benutzerinnen und Benutzern mit ihren jeweiligen Vor- und Nachteilen vorgestellt werden sowie in Graz vorhandene, wichtige Datenressourcen präsentiert werden. ■



© Mario Albrecht – TU Graz

using diverse datasets and additional biological knowledge as input (Figure 4). It is often necessary to compare and integrate disparate ranking lists to achieve the final prioritization. In this research area, which initially emerged for the ranking of web pages, there are several unsolved challenges, especially the use of biological information in the ranking lists.

Research in Graz on bioinformatics and medical informatics

Overall, it can be stated that the importance of bioinformatics has increased vastly in recent years, particularly, due to the large datasets that are now being generated and their applicability in the life sciences. The medical aspects of bioinformatics are also more and more interconnected with clinical medical informatics. Therefore, Mario Albrecht and Christoph Sensen will organize a new inter-university seminar series within Graz, starting in January, where methods and tools for bioinformatics and medical informatics, as well as important data resources from Graz, are introduced to potential users, and their pros and cons will be discussed. ■

Abbildung 4: Dreistufiges Priorisierungsverfahren zur Identifizierung von weiteren Kandidatengenen/-proteinen für Erkrankungen, für die bereits ein paar Krankheitsgene/-proteine bekannt sind: 1. Wissensverarbeitung und Funktionsannotation. 2. Datenintegration mittels Netzwerken oder Ranglisten. 3. Priorisierung der finalen Rangliste.

Figure 4: Three-step prioritization approach for the identification of additional candidate genes/proteins for diseases for which some of the genes/proteins involved are already known: 1. Knowledge processing and functional annotation. 2. Data integration using networks or ranking lists. 3. Prioritization of the final ranking list.

Advanced Materials Science



Klaus Reichmann ist Leiter des FoE „Advanced Materials Science“.
Klaus Reichmann is head of the FoE Advanced Materials Science.

Griechen oder Babylonier: Wer ist erfolgreicher? Im Buch „Feynmans Regenbogen. Die Suche nach Schönheit in der Physik und im Leben“ beschreibt der Autor Leonard Mlodinow die Anfänge seiner Karriere am Caltech zwischen den Giganten Richard Feynman und Murray Gell-Mann.

Feynman unterschied zwei Arten von Forschenden, den Babylonier und den Griechen, aufgrund der unterschiedlichen Strategien dieser beiden Zivilisationen. Lange vor den Griechen entwickelten Babylonier Zahlen und Formeln, dennoch gelten die Griechen als Erfinder der Mathematik.

Seiner Meinung nach deshalb, weil die Babylonier vor allem die Nützlichkeit einer Methode beurteilten, kaum aber ihre logische Systematik. Dagegen suchten die Griechen das zugrunde liegende Prinzip und erreichten damit einen höheren Grad der Abstraktion.

Für Mlodinow war Feynman der Babylonier und Gell-Mann der Grieche. Der Grieche erobert ein Gebiet mit der vollen Macht der logischen Systematik, der Babylonier setzt auf Instinkt und Intuition. Zugespielt könnte man von Rationalisten und Empirikern sprechen oder, noch provokativer, von Theoretikern und Praktikern.

Am Materials Day 2014 Ende Oktober fand ich Griechen und Babylonier unter den Teilnehmenden. Beide Forschertypen haben in den Materialwissenschaften beachtliche Erfolge vorzuweisen. Bei den Herausforderungen, die die Modellierung und Simulation von Materialien über weite Skalenbereiche (das Schlagwort „Multiscale Modelling“) mit sich bringen, war zu bemerken, dass diese beiden „Völker“ sich gegenseitig unterstützen und voranbringen. So gesehen, war diese Veranstaltung ein Beitrag zur „Völkerverständigung“. Viel mehr noch ist im FoE geschehen. Forschungsprojekte wurden eingeworben, aber eine noch viel größere Zahl an Anträgen geschrieben. Einer der renommierten START-Preise ging an Markus Aichhorn, der im Folgenden über sein Forschungsgebiet schreibt. Viele andere Preise, wie der Woman Award des Austrian Cooperative Research an Michaela Albu (Näheres zu ihren Forschungen auf Seite 33), der Masing-Gedächtnispreis der Deutschen Gesellschaft für Materialkunde an Cecilia Poletti oder der Outstanding Young Investigator Award der Bio-Environmental Polymer Society an Adriana Gregorova, sind eine Anerkennung der Leistungen, die in diesem FoE erbracht werden. Ebenfalls eine Bestätigung ist das Abhalten zahlreicher Workshops und Konferenzen auf dem Gebiet der Materialwissenschaften in Graz.

Spannend wird das Semester auch durch die Einreichung der Vorträge für die Lead-Projekte der TU Graz. Hier hoffe ich, dass sich Griechen und Babylonier unseres FoE zu einem starken Team zusammenfinden werden.

Greeks or Babylonians: Who is the winner? In “Feynman’s Rainbow, a Search for Beauty in Physics and Life”, the author Leonard Mlodinow describes his early career at CalTech between the giants Richard Feynman and Murray Gell-Mann.

Feynman defined two kinds of scientists, the Babylonians and the Greeks, because of different strategies of these ancient civilizations. Long before the Greeks, the Babylonians developed numbers and equations, yet it was the Greeks who are credited with inventing mathematics. He argues that Babylonians cared more about applicability than complete logical systems. The Greeks in contrast looked for the underlying principle and achieved a higher degree of abstraction.

For Mlodinow, Feynman was the Babylonian and Gell-Mann was the Greek. The Greek conquers a field by the “full force of logical machinery”, whereas the Babylonian employs instinct and intuition. These types might be called rationalist and empiricist or, more provocatively, theorist and practitioner.

On Materials Day 2014, at the end of October, I found Greeks and Babylonians among the participants. Both kinds of scientists are successful in Materials Science. It was remarkable that the challenges connected to multiscale modelling and simulation could be overcome by complementary support between both “civilizations”. In this regard, Materials Day was an act of “international understanding”.

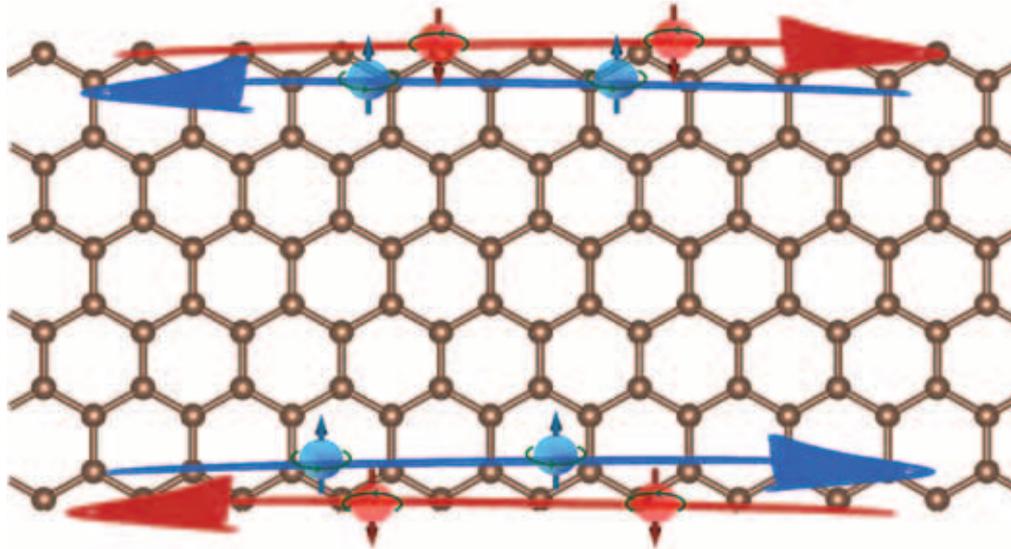
Of course, there was much more in our FoE. Many new projects were procured, and many more applications have been written. One of the renowned START prizewinners is Markus Aichhorn, who has contributed an article about his research field to this issue. Many other awards, such as the Woman Award from Austrian Cooperative Research to Michaela Albu (see page 33 for her article), the Masing-Memorial Award by Deutsche Gesellschaft für Materialkunde to Cecilia Poletti and the Outstanding Young Investigator Award by the Bio-Environmental Polymer Society to Adriana Gregorova, are all recognition of the achievements of this FoE. Another kind of recognition is the organization of a number of workshops and conferences in the field of Materials Science taking place in Graz.

The semester will become exciting when we receive pre-proposals for the lead projects of Graz University of Technology. I hope that the Greeks and Babylonians of our FoE will come together to form a strong team for this challenge.

Korrelierte topologische Isolatoren: Alte Materialien mit neuen Eigenschaften

Correlated Topological Insulators: Old Materials with New Properties

Markus Aichhorn



© Robert Triebel, Master Thesis, TU Graz, 2014

Abbildung 1:
Graphen-Nanobänder mit Zickzackrändern. An diesen Rändern fließt der Oberflächenstrom, in entgegengesetzte Richtungen für Up-Spins (blaue Pfeile und Symbole) und Down-Spins (rote Pfeile und Symbole).

Figure 1:
Graphene nano-ribbon with zig-zag edges. The current flows through these edges in opposite directions depending on whether the spin polarisation is up (blue arrow and symbols) or down (red arrow and symbols).

Seit einigen Jahren sind sogenannte topologische Isolatoren ein Hauptforschungsgebiet in der Festkörperphysik. Diese Materialien sind deswegen interessant, weil sie Strom nur an der Oberfläche leiten, aber in ihrem Inneren isolieren. Ein neues Forschungsprojekt, finanziert durch das START-Programm des FWF, wird den Einfluss von elektronischen Wechselwirkungen auf diesen Materiezustand untersuchen.

Bei der Klassifizierung von Materialien unterscheidet man normalerweise zwischen Metallen, Halbleitern und Isolatoren, wobei nur Erstere Strom leiten können. Vor etwa 10 Jahren wurde allerdings eine weitere Klasse vorgeschlagen, ein Hybrid mit isolierendem Inneren und metallisch leitenden Oberflächen. Dieser Zustand ist topologisch geschützt, das heißt, er kann nicht durch externe Störungen des Systems, wie z. B. Fehlstellen oder Einschlüsse, zerstört werden. Dadurch ergeben sich faszinierende neue Möglichkeiten für neue funktionelle Bauteile.

Ein einfaches Beispiel

Wir wollen das Auftreten von topologischen Zuständen am Beispiel von Graphen illustrieren. Das Kristallgitter dieses zweidimensionalen Systems >

Topological insulators are one of the leading research topics in modern solid state physics. These materials are interesting because they can only conduct electrical current at their surface, but otherwise insulate in the bulk. A new research project funded by the START program of the FWF is going to investigate the effects of electronic correlations on these new states of matter.

Materials are normally classified into three different kinds: metals, semiconductors, and insulators, with only metals conducting electrical current. However, about ten years ago researchers postulated yet another class of materials – a hybrid class with insulating bulk and conducting surfaces. This state is topologically protected, which means that it cannot be destroyed by external perturbations such as dislocations or impurities. This property opens up very interesting new possibilities for new functional materials.

A simple example

Let's illustrate the occurrence of a topological insulating state using the example of graphene. The crystal structure of this two-dimensional material is built up by a honeycomb lattice, on which the electrons can move (see Fig. 1). This system has recently attracted a lot of interest because it >



Markus Aichhorn ist theoretischer Physiker und beschäftigt sich mit der Modellierung von Materialien am Computer.

Markus Aichhorn, theoretical physicist, is working on the modelling of materials on the computer.

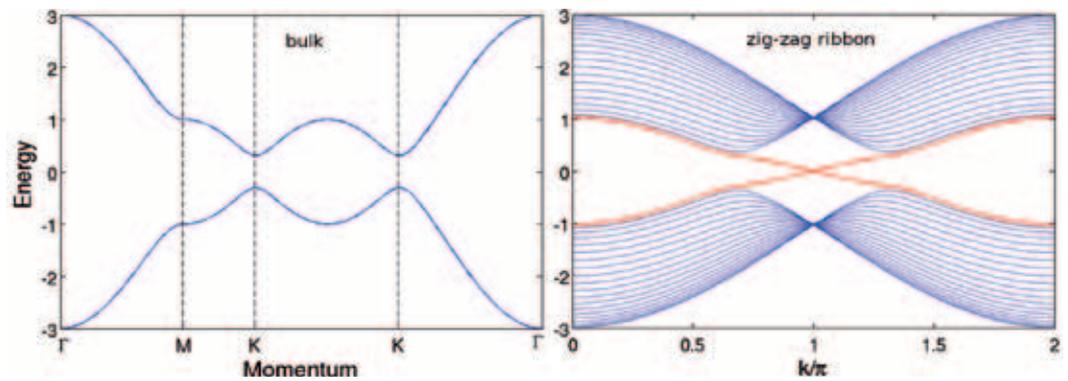


Abbildung 2:
Bandstruktur von Graphen mit Spin-Orbit-Kopplung im Bulk (links) und im Nanoribbon (rechts). Im Bulk ist eine Anregungslücke erkennbar, während im Ribbon leitende Oberflächenzustände auftreten (rote Linien).

Figure 2:
Band structure of graphene with spin-orbit coupling in the bulk (left) and in the nano-ribbon (right). A clear excitation gap is visible in the bulk, whereas conducting edge states occur in the ribbon (red lines).

besteht aus einer Honigwabenstruktur, auf der sich Elektronen bewegen können (siehe Abb. 1). Dieses System hat große Aufmerksamkeit auf sich gezogen, weil es sogenannte masselose Dirac-Fermionen mit ganz speziellen Transporteigenschaften realisiert. Verantwortlich für das Auftreten von topologischen Zuständen ist die Spin-Orbit-Kopplung, die den magnetischen mit dem Bahndrehimpuls des Elektrons koppelt. Lässt man diese Kopplung zu, so öffnet sich eine Lücke im Anregungsspektrum des Materials, was zu einem isolierenden Zustand führt (Abb. 2 links). Betrachtet man nun aber die Oberflächenzustände am Rande eines Graphen-Nanobandes (Abb. 1), so sieht man sofort, dass zwei Randzustände auftreten, die das Leitungsband mit dem Valenzband verbinden und somit metallische Eigenschaften besitzen (Abb. 2 rechts). Diese Ambiguität – Isolator im Bulk, Metall an der Oberfläche – ist gerade die zentrale Eigenschaft von topologischen Isolatoren. Darüber hinaus ist der Transport am Rand auch noch spinabhängig. Wie in Abb. 1 dargestellt, werden Spin-up-Elektronen (blaue Pfeile) in die entgegengesetzte Richtung von Spin-down-Elektronen geleitet. Das führt zur Leitung von Strom im Wesentlichen ohne Wärmeentwicklung, was für technologische Entwicklungen sehr interessant ist.

Den ersten theoretischen Postulaten folgten schnell experimentelle Nachweise dieser topologischen Eigenschaft.¹ Allerdings wurden diese topologischen Zustände in Materialien gefunden, in denen Wechselwirkungen zwischen den Elektronen vernachlässigt werden können. Wie bereits gesagt, ist die Spin-Orbit-Kopplung eine zentrale Größe bei topologischen Isolatoren. Weil der Einfluss dieser Kopplung mit der vierten Potenz der Ordnungszahl steigt, sind Materialien mit schweren Elementen wie Bismut prädestiniert für topologische Phasen. Theoretische Modelle für diese Systeme sind problemlos zu behandeln, weil ohne elektronische Wechselwirkungen eine Einteilchenbeschreibung möglich ist.

Korrelierte topologische Isolatoren

Erst kürzlich sind auch Übergangsmetalloxide in den Fokus der Forschung gerückt. Mehrere Verbindungen, die teilweise schon vor einigen Jahr-

hosts so-called massless Dirac fermions, with very special and peculiar transport properties. The reason for the occurrence of topological states is the spin-orbit coupling, which couples the magnetic spin of the electron to its orbital momentum. This additional term opens a gap in the single-particle excitation spectrum of the material, leading to an insulating state (Fig. 2 left). Considering now surface states on a graphene nano-ribbon as depicted in Fig. 1, we immediately see that two edge states occur that connect the valence band with the conduction band, and therefore are metallic (Fig. 2 right). This ambiguity – insulating in the bulk, but conducting at the surface – is the central and most important property of topological insulators. Moreover, the transport properties at these edges are spin-dependent. As is shown in Fig. 1, electrons with up-spin (blue arrows) move in the opposite direction to electrons with down-spin (red arrows). This leads to electrical conductance basically without creating heat, which makes this effect very promising for technological applications.

Soon after the first theoretical proposals, topological properties of materials were achieved in experiments.¹ However, these properties have been found in materials where the interaction between the electrons can be neglected. As mentioned above, the driving force for topological states is the spin-orbit coupling. Since the influence of this coupling increases with the fourth power of the atomic number, materials with heavy elements such as bismuth are optimally suited to show topological phases. Theoretical models for these systems are easy to handle and solve because the complete absence of electronic correlations allows for a single-particle description.

Correlated Topological Insulators

Transition metal oxides have entered the field of topological materials only recently. Several compounds which were synthesized and characterized many years ago have been proposed to show these special properties of surface conductance. Many of these materials are based on iridium-oxide compounds. Compared to the materials mentioned above, oxides have a big advantage in that they are very flexible and can be changed easily by chemi-

Abbildung 3:
Phasendiagramm von wechselwirkendem Graphen als
Funktion von Wechselwirkungsstärke U und Kristallfeld λ_V .

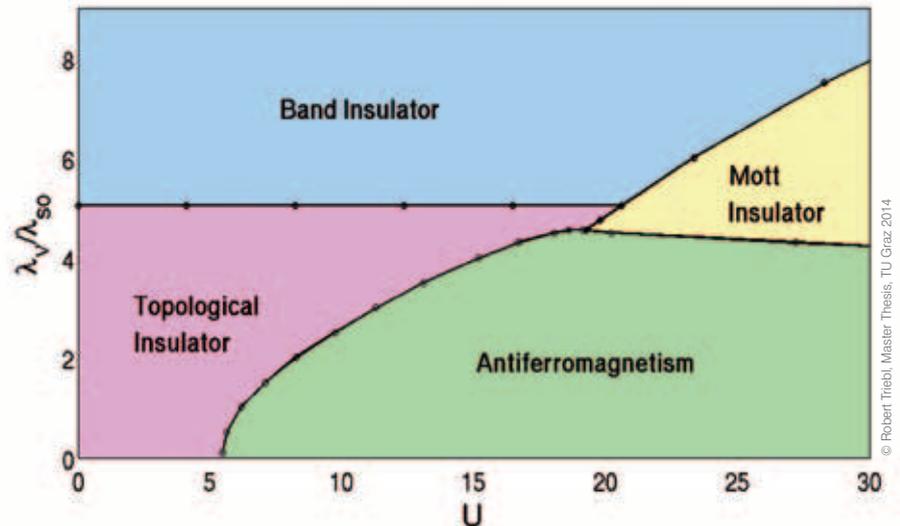
Figure 3:

Phase diagram of interacting graphene as function
of interaction strength U and crystal field λ_V .

zehnten zum ersten Mal synthetisiert und charakterisiert wurden, sind plötzlich in diesem Zusammenhang wieder von großem Interesse. Das Gros dieser Materialien basiert auf Iridium-Oxid-Verbindungen. Verglichen mit den oben beschriebenen Materialien haben Oxide als großen Vorteil ihre Flexibilität, weil sie durch chemische Substitution oder externe Parameter leicht verändert werden können. Allerdings ist bei diesen Oxiden die theoretische Beschreibung nicht so einfach wie in den zuvor genannten Fällen, weil es eine neue wichtige Einflussgröße gibt: die Coulombwechselwirkung. Elektronen in offenen d-Schalen wie in Iridium spüren diese Wechselwirkung verstärkt, weshalb verschiedenste Energieskalen wie Wechselwirkung, Spin-Orbit-Kopplung oder kinetische Energie in geeigneter Weise berücksichtigt werden müssen. Als Resultat können isolierende Zustände erreicht werden, die ohne dieses Zusammenspiel nicht möglich wären.²

Zur Diskussion eines Phasendiagramms mit elektronischen Wechselwirkungen dienen als Beispiel wiederum Graphen. In Abb. 3 sind unterschiedliche Phasen dargestellt, abhängig von zwei Parametern im System, der Coulombwechselwirkung und einem (fiktiven) Kristallfeld. Man kann leicht erkennen, dass jetzt zusätzliche Phasen auftreten können. Wird die Coulombwechselwirkung stark genug (großes U), so geht das System von einem topologischen Isolator in einen magnetischen Zustand über. Auf der anderen Seite wird der topologische Isolator zu einem normalen Bandisolator, wenn das Kristallfeld einen gewissen Schwellwert übersteigt.

Unsere aktuelle Forschung zielt darauf ab, das Zusammenspiel von topologischen Zuständen mit elektronischen Korrelationen besser zu verstehen und Phasendiagramme wie in Abb. 3 für konkrete Systeme zu untersuchen. Dafür ist es notwendig, von so wenigen Inputparametern wie möglich auszugehen. Das Ziel soll nämlich sein, mittels computerunterstützter Simulationen das Verhalten von korrelierten topologischen Isolatoren vorhersagen zu können. Durch dieses Materials-Design-Verfahren wird das Auffinden von neuen Materialien stark vereinfacht. ■



© Robert Tiedl, Master Thesis, TU Graz 2014

cal substitution or external driving parameters, such as pressure. The drawback is that the theoretical description of these materials is much more complicated and involved because we have to deal with a new player in the game: Coulomb interaction. Electrons in open d shells as in iridium are particularly susceptible to this interaction, which means that we have to include several different energy scales (Coulomb interaction, spin-orbit coupling, kinetic energy) on an equal footing. As a result, insulating states can be realized in these materials which would otherwise be impossible without the cooperation of all these effects.²

For an illustration of a phase diagram including electronic correlations, let's take the example of graphene again. In Fig. 3 we show the different phases that can occur as a function of two parameters in the system: the Coulomb interaction and a (fictitious) crystal field. As can be easily seen, we have additional phases due to interactions which are not present at $U=0$. For large enough interactions (large U) the topological phase is replaced by a magnetic one. On the other hand, the topological insulator is transformed into a normal band insulator as soon as the crystal field is larger than a certain threshold.

Our present research focuses on the question as to how the topological properties are modified by electronic correlations and vice versa, and we want to investigate phase diagrams like the one in Fig. 3 for real materials. For this purpose it is necessary to work basically without input parameters for the calculations. The final goal is to use computer-aided methods in order to predict the properties of correlated topological materials. This approach to materials design will substantially simplify the procedures to find new materials with new properties. ■

Literatur/References:

¹ Ein ausführlicher Review zu diesem Thema/ For an extensive review, see Colloquium: Colloquium: Topological insulators, M. Z. Hasan and C. L. Kane, Reviews of Modern Physics 82, 3045 (2010).

² Reduced Effective Spin-Orbital Degeneracy and Spin-Orbital Ordering in Paramagnetic Transition-Metal Oxides: Sr_2IrO_4 versus Sr_2RhO_4 , C. Martins, M. Aichhorn, L. Vaugier, and S. Biermann, Physical Review Letters 107, 266404 (2011).

Human & Biotechnology



Gernot Müller-Putz
ist stellvertretender Leiter des FoE
„Human & Biotechnology“.
*Gernot Müller-Putz is deputy head
of the FoE Human & Biotechnology.*

Mit zwei neuen Professoren im Field of Expertise „Human & Biotechnology“ wird die Bioinformatik komplett neu aufgestellt und wesentlich gestärkt. Sowohl an der Fakultät für Informatik und Biomedizinische Technik als auch an der Fakultät für Technische Chemie, Verfahrenstechnik und Biotechnologie wurde jeweils eine Professur, einmal für Bioinformatik (Mario Albrecht) und einmal für Computational Biotechnology (Christoph Wilhelm Sensen), bestellt.

Näheres zu den Forschungen der beiden neuen Professoren an unserer Universität können Sie auf der Seite 6 sowie auf der Seite 15 nachlesen.

Weitere Professuren des FoE „Human & Biotechnology“ im Bereich Biopharmazie, Technologie von Biomaterialien, Semantische Datenanalyse und Health Care Engineering werden auch in Zukunft zur Profilbildung beitragen und das FoE sowohl innerhalb der TU Graz als auch nach außen hin (NAWI Graz und BioTechMed) verstärkt darstellen. Zusätzlich stellt BioTechMed-Graz einen Postdoc-Pool mit dem Ziel zur Verfügung, junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler mit internationalem Hintergrund in BioTechMed-Graz zu integrieren und so innovative Forschung am Standort Graz zu unterstützen. Gerade unser Field of Expertise ist mit acht Postdoc-Stellen, die in Kooperation mit den Partneruniversitäten (Uni Graz und MedUni Graz) neu besetzt werden, sehr gut vertreten.

Mit der Anschubfinanzierung ist vonseiten der TU Graz ein Tool geschaffen worden, das von unserem FoE recht gut genutzt wird. Bisher wurden 17 Finanzierungsanträge eingereicht, wovon zwölf Anträge vom FoE unterstützt wurden. Von den daraus entstandenen Forschungsanträgen wurde einer bereits genehmigt, fünf weitere sind noch in Begutachtung. Einige der Anträge sind noch in der Vorbereitung und werden demnächst (meist beim FWF) eingereicht. Insgesamt wurden über die Anschubfinanzierung bereits 68 Projekte finanziert, die bereits mehr als eine Million Euro an Drittmitteln an die TU Graz eingespielt haben.

Two new professorships in our Field of Expertise, which will renew and strengthen the research field of bioinformatics, have been established at the Faculty of Computer Science and Biomedical Engineering and at the Faculty of Technical Chemistry, Chemical and Process Engineering and Biotechnology. One is in bioinformatics (Mario Albrecht), the other is in computational biotechnology (Christoph Wilhelm Sensen). You can read more about the research carried out by these two new colleagues at our university on page 6 and 15.

The profile of our FoE will be further consolidated and focused with further professorships in the areas of biopharmacy, bio-based materials technology, semantic data analysis and health care engineering. This will enhance the FoE both within the university and externally (NAWI Graz and BioTechMed). Additionally, BioTechMed-Graz has established a postdoc pool with the goal to integrate young scientists with international backgrounds in BioTechMed and thus to support innovative research at Graz. Our FoE is in the enviable position of being able to assign eight postdocs in collaboration with our partner universities Uni Graz and MedUni Graz.

Seed funding is a new tool created by our university. It offers mostly young scientists the opportunity to obtain funding to enable them to write proposals for applications to research funding agencies. Up to now, 17 applications have been submitted, and 12 of them have been funded by the FoE. From the resulting research grant applications, one has already been approved, and five more are still under consideration. Some of them are still in preparation and will be submitted, most of them to FWF, in the near future. Altogether, the FoEs have funded a total of 68 seed projects, which has resulted in third-party funding of more than 1 million euros.

Im Fokus: Computational Biotechnology

Focus on Computational Biotechnology

Christoph W. Sensen

Seit der kompletten Sequenzierung der ersten mikrobiellen Genome vor ca. 20 Jahren sowie zahlreicher weiterer kompletter Genome von Modellorganismen in den folgenden Jahren – einschließlich des menschlichen Genoms vor mehr als zehn Jahren – gewinnt die Bioinformatik im Bereich der Biotechnologie mehr und mehr an Bedeutung. Ergebnisse aus der Bioinformatikforschung werden heute in vielen Bereichen, von der Humanmedizin über die Kriminaltechnik bis zur Biotechnologie, angewandt.

Seit Beginn der 50er-Jahre des vergangenen Jahrhunderts ist es möglich, die Sequenz von Proteinen zu bestimmen. Etwa 25 Jahre später begann auch die Ära der DNA und RNA-Sequenzen. Im Zusammenhang mit den ersten Sequenzermittlungen entwickelte sich ein neues interdisziplinäres Forschungsfeld, das heute unter dem Begriff „Bioinformatik“ zusammengefasst wird. Obwohl viele bis heute die Aufgaben der Bioinformatik nur mit dem DNA-, RNA- oder Protein-Sequenzvergleich und der Zuweisung von Funktionen zu Sequenzen in Verbindung bringen, hat sich dieser Zweig der Wissenschaft stark entwickelt und diversifiziert. Seit im Jahre 1995 die ersten kompletten Genomsequenzen von zwei Mikroorganismen erstellt wurden, sind die kompletten Genome vieler Hundert Organismen – einschließlich des kompletten menschlichen Genoms – charakterisiert worden. Die Ergebnisse aus diesen Sequenzierungen bilden heute die Grundlage für Forschungsvorhaben in Biologie, Biotechnologie und Medizin.

Next Generation: die Metagenomforschung

Mittlerweile ist es sogar möglich, komplette Gemeinschaften von Organismen durch Next-Generation-DNA-Sequenzierung und nachfolgende bioinformatische Analysen zu charakterisieren (Metagenomforschung) und so den Beitrag der einzelnen Organismen zur Organismengemeinschaft zu untersuchen. Selbst das menschliche Leben ist ohne die Interaktion des menschlichen Körpers mit den Hunderten von mikrobiellen >

Since the complete sequencing of the first microbial genome approximately 20 years ago (and many additional complete genomes in the meantime, including the complete human genome), bioinformatics has been gaining more and more prominence in the area of biotechnology. Results from bioinformatics research are being applied in many different fields, including medicine, forensics and biotechnology.

In the 1950s, it became possible to determine the sequence of protein molecules. Approximately 25 years later, the era of DNA and RNA sequencing began. In parallel to sequence-determination techniques, a new interdisciplinary research field emerged, for which today the term “bioinformatics” is used. Even though many people only associate the term bioinformatics with the comparison of DNA, RNA or protein sequences and with functional descriptions of sequences, the field has developed in leaps and bounds and is now quite diversified. In the year 1995, the first two complete microbial genomes were published. Since then, hundreds, if not thousands of complete genomic sequences – including that of the human genome – have been characterized. The results of these sequencing exercises established the foundation for new research and development endeavors in biology, biotechnology and medicine.

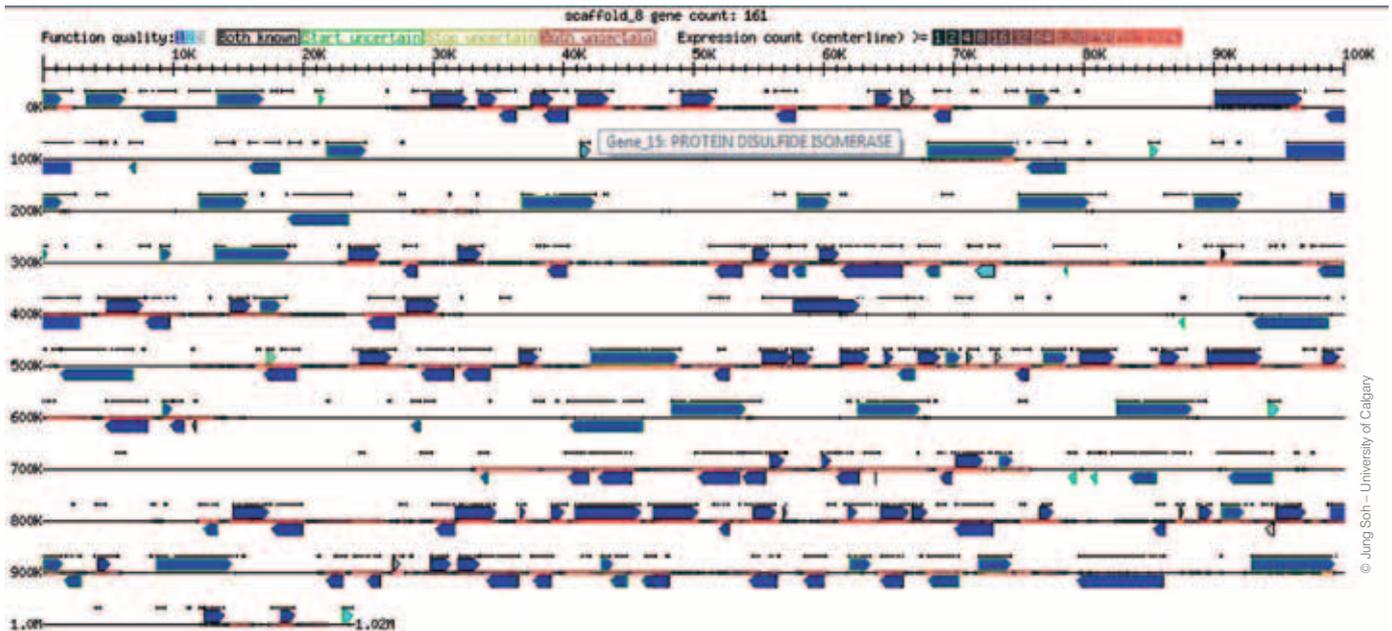
Next generation: metagenome research

In the meantime, it is possible to characterize entire communities of organisms through next-generation DNA sequencing methods and subsequent bioinformatics analyses (metagenomics). With these efforts, the contribution of each organism to the entire community can be determined. Even human life is not possible without interaction with hundreds of microbial species which live in the digestive system and facilitate the digestion process. At this point in time, a new initiative around metagenome research is coming together in the form of the new Computational Biotechnology working group, which will be playing an important role. >



Christoph W. Sensen arbeitet seit 1. September als Professor für Computational Biotechnology an der TU Graz und ist stellvertretender Institutsleiter des Institutes für Molekulare Biotechnologie. Zuvor war er 14 Jahre lang Tenured Full Professor for Bioinformatics an der University of Calgary in Kanada. Seine Forschungsschwerpunkte sind Genomforschung und Bioinformatik.

Christoph W. Sensen has been working at Graz University of Technology since September 2001. He is professor of computational biotechnology and deputy head of the Institute of Molecular Biotechnology. He has spent the last 14 years at the University of Calgary in Canada, where he was a tenured full professor of bioinformatics. His research foci are genome research and bioinformatics.



© Jung Sooh - University of Calgary

Abbildung 1:
Übersicht der Genanordnung
auf einem kleinen Stück eines
Chromosoms.

Figure 1:
Overview of the gene
arrangement on a small region
of a chromosome.

Organismen, die im Verdauungstrakt leben und die Verdauung erst ermöglichen, vollkommen unmöglich. Zurzeit entsteht in Graz eine neue Initiative im Bereich der Metagenomforschung, bei der die Grazer Bioinformatikerinnen und -informatiker, einschließlich der neuen Arbeitsgruppe Computational Biotechnology am Institut für Molekulare Biotechnologie, eine wichtige Rolle spielen werden.

Um die molekularen Abläufe innerhalb von Organismen und die Interaktionen von Organismen mit ihrer Umwelt besser zu verstehen, sind Bioinformatikerinnen und Bioinformatiker mehr und mehr mit der Erstellung von Computermodellen, mit denen sich biologische Abläufe simulieren lassen, beschäftigt. Um diverse Daten in Modellen zu integrieren, ist es notwendig, die Daten vorher zu standardisieren. Insbesondere die Fachtermini, von der Bezeichnung von Genfunktionen über die Bezeichnung von Geweben und Organen bis hin zur Beschreibung von Verhaltensweisen, müssen strikten Standards folgen. Auch in diesem Feld sind Grazer Bioinformatikerinnen und -informatiker aktiv: Durch die Erstellung von Ontologien (d. h. fachspezifischen Wörterbüchern), die zur Integration von diversen Datensätzen benutzt werden können, wird die Erstellung von Computermodellen mit der automatischen Integration von neuen Daten erst möglich.

Computational Biotechnology an der TU Graz

Die neue Arbeitsgruppe „Computational Biotechnology“ unter der Leitung von Christoph Sensen wird die Bioinformatikforschung an der TU Graz verstärken. Schwerpunkte werden in der Mikrobiomforschung und der Entwicklung von Hochdurchsatzmethoden für DNA-basierte Diagnostik liegen.

In order to better understand the processes in organisms and their interaction with the environment, bioinformaticians are focusing more and more on the creation of computer models which can be used to simulate biological processes. Before the diverse data sets can be integrated into such models, it is necessary to standardize them. Technical terms, in particular, such as those describing gene functions or the names of tissues and organs as well as behavioral terms, have to follow very rigid standards. Bioinformaticians from Graz are also actively working on these standardization endeavors through the creation of ontologies (i.e. controlled vocabularies) which can be used to facilitate the integration of diverse data sets.

Computational biotechnology at Graz University of Technology

The new working group Computational Biotechnology, which is coming together under the leadership of Christoph Sensen, will strengthen bioinformatics research activities at Graz University of Technology. The focus of the new group will be on microbiome research and the development of high-throughput methodologies for DNA-based diagnostics. Rapid and more accurate diagnostic tests are needed in many application areas ranging from mining for oil resources, and crop and animal production to the early diagnosis of human diseases. While some DNA-based tests are already available today, they are not yet cost-efficient enough to apply in blanket testing, for instance in animal production (e.g. feed lots). With my move from the University of Calgary to Graz University of Technology, I have brought with me additional computational resources previously unavailable in Austria which should open up new

Schnellere und vor allem genauere diagnostische Tests sind in vielen Bereichen, von der Erdölgewinnung über die Tierproduktion und Pflanzenproduktion bis hin zur Früherkennung von menschlichen Krankheiten notwendig. Zwar kann man heute schon DNA-basierte Tests erwerben, diese sind aber noch nicht kostengünstig genug, um z. B. flächendeckende Tests in der Tierproduktion zu ermöglichen. Mit dem Umzug von der University of Calgary kommen auch Spezialcomputer für Bioinformatikanwendung nach Graz, die bisher so in Österreich noch nicht vorhanden waren und neue Forschungsmöglichkeiten, insbesondere in der Genomforschung, eröffnen. Zurzeit werden unter anderem Server für schnelle Datenbanksuchen und Computer mit einem Terabyte Speicherplatz (Hauptspeicher) für die Assemblierung von Genomen und Metagenomen installiert. Ein Schwerpunkt des neuen Labors liegt auf der Visualisierung von Ergebnissen, um diese gerade bei der interdisziplinären Forschung Forscherinnen und Forschern aus möglichst vielen verschiedenen Fachrichtungen zugänglich zu machen. Die von der neuen Arbeitsgruppe angebotenen Bioinformatiklehrveranstaltungen, insbesondere im Rahmen von NAWI Graz, werden die Studierenden in die Benutzung von Bioinformatiktools einführen und ihnen damit für Berufe im Bereich der Biotechnologie nützliche Fähigkeiten vermitteln. ■

possibilities for bioinformatics research. This includes for example computer servers for very fast database searches and computers with a terabyte of main memory, which can be used for the assembly of complete genomes and metagenomes. One of the foci of the new lab will be the visualization of results, which allows researchers in interdisciplinary teams to share their results with large and diverse communities of scientists. The teaching program of the new group, especially in the context of NAWI Graz, will allow students to gain new skills, especially in the application of bioinformatics tools in biotechnology research and development. These new skills will give the students an advantage when applying for high-quality jobs in the biotechnology sector. ■

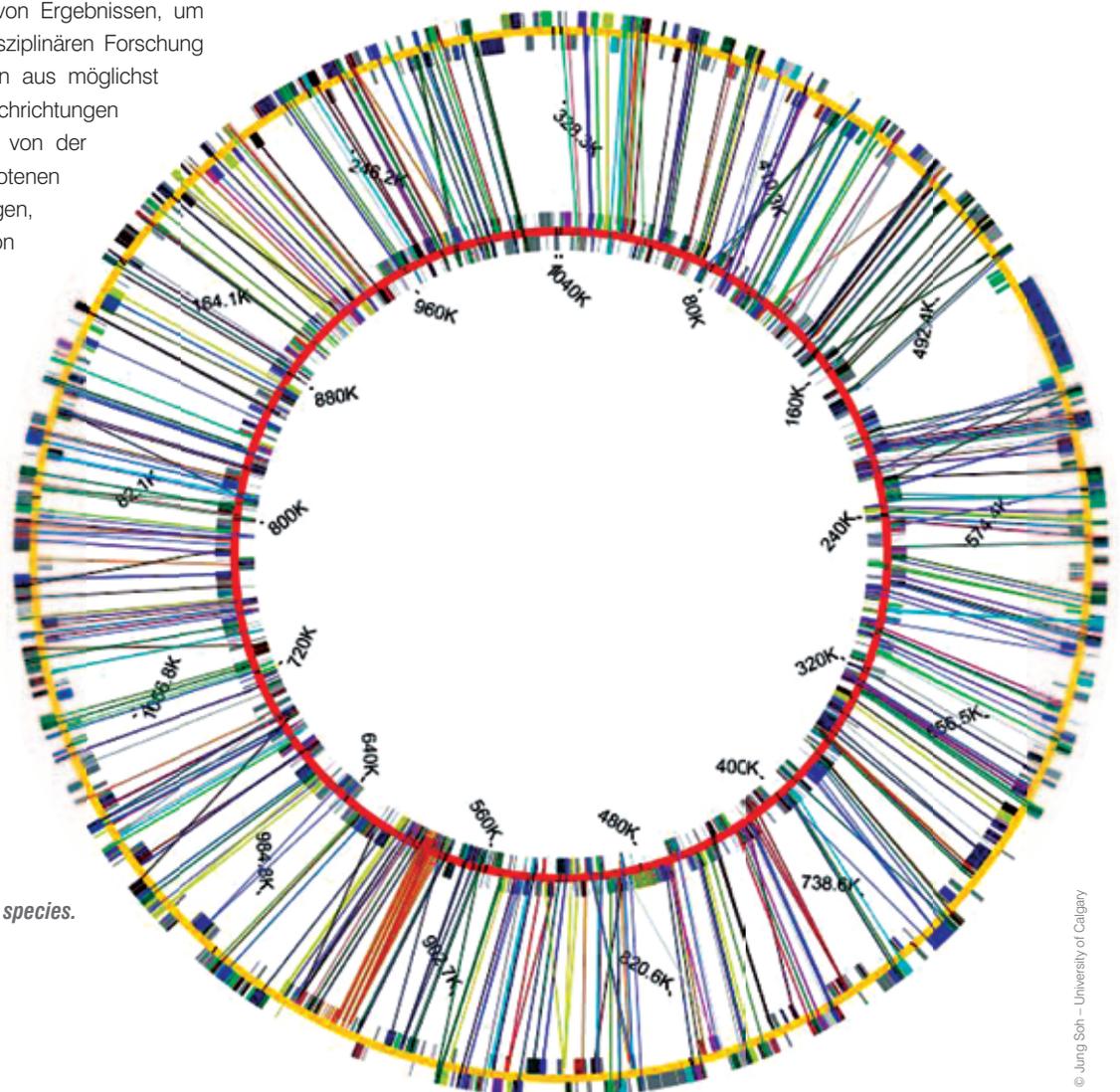


Abbildung 2:
Vergleich der Genanordnung
von zwei Chlamydien-Spezies.

Figure 2:
Comparison of the gene
arrangement of two Chlamydia species.

(s1) ● *Chlamydia_muridarum*
(m) ● *Chlamydia_trachomatis*

Scale: 800 units/pixel
|-----| 80.000

Information, Communication & Computing



Johannes Wallner ist Leiter des FoE „Information, Communication & Computing“. Johannes Wallner is head of the FoE Information, Communication & Computing.

Unter den Fields of Expertise der TU Graz ist „Information, Communication & Computing“ das weiteste Feld und gleichzeitig eines, dessen Thematik im täglichen Leben von uns allen eine immer größere Rolle spielt. In diesem Heft sind dazu zwei Artikel enthalten:

Peter Grabner und Robert Tichy vom Institut für Analysis und Computational Number Theory schreiben auf Seite 19 über Quasi-Monte-Carlo-Methoden unter dem Übertitel „Zufall auf Abruf“. Der Anlass für diesen Artikel ist die Einrichtung eines Spezialforschungsbereiches des Österreichischen Forschungsförderungsfonds zu diesem Thema, der eine Kooperation von TU Graz, TU Wien, der Universitäten Linz und Salzburg sowie des Johann-Radon-Instituts der Österreichischen Akademie der Wissenschaften darstellt. Die technischen Details dieses Forschungsgebietes sind in dem Artikel näher beschrieben, seine Relevanz wird auch durch die zwei Wikipedia-Seiten „Quasi-Monte Carlo method“ und „Quasi-Monte Carlo methods in finance“ illustriert.

In dem zweiten Artikel auf Seite 36 über Augmented Reality, also erweiterte Realität, und die Arbeit von Vincent Lepetit vom Institut für Maschinelles Sehen und Darstellen (ICG) geht es um die Erweiterung unserer Wahrnehmung durch technische Hilfsmittel wie zum Beispiel das Einblenden von Information in Brillengläser. Solche Geräte leisten bereits gute Dienste und haben das Potenzial, Produktionsprozesse sowie viele Lebensbereiche zu durchdringen. Es gibt hier noch einige ungelöste gesellschaftliche Fragen, wie die Privatsphäre der Nutzer und der Menschen rund um sie. Tätliche Angriffe auf Google-Glass-Trägerinnen oder Träger zeigen die Risiken der Augmented Reality auf, die sich nicht auf das Darstellen von Informationen beschränkt.

Among the Fields of Expertise of Graz University of Technology, Information, Communication & Computing is the one with the broadest scope, and at the same time surely one whose topics play an increasing role in the lives of all of us. This issue of TU Graz research contains two articles from this field:

On the occasion of establishing a joint project (SFB), Peter Grabner and Robert Tichy (Institute of Analysis and Computational Number Theory) write about quasi-Monte Carlo methods, under the heading of “Randomness on Demand”. This project is funded by the Austrian Science Fund and is a cooperation between Graz University of Technology, Vienna University of Technology, the universities of Linz and Salzburg, and the Johann Radon Institute of Applied and Computational Mathematics of the Austrian Academy of Sciences. For the technical details of this area of research the reader is referred to the article on page 19. Its relevance is demonstrated by the two Wikipedia articles on quasi-Monte Carlo methods and on quasi-Monte Carlo methods in finance.

The second article on page 36 is on augmented reality and the work of Vincent Lepetit (Institute of Computer Graphics and Vision), and deals with the augmentation of our perception of reality by auxiliary computer-generated input, e.g. displaying information in eyeglasses. Such devices already successfully serve in many areas and have the potential to pervade production processes as well as many aspects of our life. It will be interesting to see how issues such as the privacy of users of these devices and the people around them will be dealt with; attacks on Google Glass wearers have already demonstrated the hazards of augmented reality whose capabilities exceed the mere display of information.

Quasi-Zufall auf Abruf *Pseudo-Randomness on Demand*

Peter Grabner, Robert Tichy

Der Spezialforschungsbereich (SFB) „Quasi-Monte-Carlo-Methoden: Theorie und Anwendungen“ wurde mit 1. Februar 2014 mit Teilprojekten in Linz, Graz, Salzburg und Wien mit einer Laufzeit von vier Jahren und der Möglichkeit der Verlängerung um weitere vier Jahre eingerichtet.

Was sind Quasi-Monte-Carlo-Methoden?

Um zu erklären, was der Titel des SFB mit Monte Carlo und damit wohl mit dem dortigen Casino zu tun hat, muss etwas ausgeholt werden. Die Monte-Carlo-Methode wird schon seit Langem in der Physik, besonders der Kernphysik, für Simulationen verwendet. Der Name bezieht sich auf die Verwendung von zufällig erzeugten Punkten zur Lösung mathematischer Probleme. „Zufällig erzeugte Punkte“ beinhalten zwei Probleme, nämlich einerseits die Frage, wie man auf dem Computer wirklich „zufällig“ Zahlenwerte erzeugen kann, und andererseits die prinzipielle Einschränkung der Größenordnung des Fehlers aus der Wahrscheinlichkeitstheorie mit der Quadratwurzel aus der Anzahl der Punkte. Darüber hinaus erhält man Resultate, die immer „mit hoher Wahrscheinlichkeit“ korrekt sind.

Diese beiden Einschränkungen führten zur Prägung des neuen Begriffs „Quasi-Monte-Carlo (QMC)-Methode“, bei der man versucht, die Stützstellen für das jeweilige numerische Verfahren deterministisch, also ohne zufälligen Einfluss, zu wählen, aber nach Möglichkeit mit zumindest gleich guten Eigenschaften wie zufällige Punkte. Tatsächlich stellt sich bei den Konstruktionen solcher Punkte heraus, dass die Fehlerordnung $1/\sqrt{N}$ sogar auf $\log(N)^d/N$ verbessert werden kann; dabei steht d für die Dimension des zugrunde liegenden Bereichs. Durch den Übergang von Monte-Carlo-Methoden zu QMC-Methoden kann also nicht nur eine deutliche Verbesserung der Konvergenzordnung der Verfahren, sondern auch ein garantiert korrektes Ergebnis erreicht werden. Die Konstruktion von möglichst vielen, oft problemangepassten QMC-Punktfolgen besonders für hohe Dimensionen ist ein in Österreich schon seit Jahrzehnten besonders stark vertretenes >

The special research area (SFB) “Quasi-Monte Carlo Methods: Theory and Applications” was established with participating research projects in Linz, Graz, Salzburg, and Vienna on February 1, 2014. The special research area is funded for four years, with a possible extension for four additional years.

What are Quasi-Monte Carlo Methods?

In order to clarify what the title of the SFB has to do with Monte Carlo, and possibly with the casino there, we have to give some explanations. The “Monte Carlo Method” was used for a long time in nuclear physics for simulations. The name alludes to the fact that randomly generated points were used for the solution of complex mathematical problems. Randomly generated points have two intrinsic problems, namely first the question of how to generate them efficiently on a computer, and secondly the fact that probability theory predicts an error for the numerical error that decays like the square root of the number of points. Furthermore, the results obtained are only correct “with high probability”.

These restriction have led to the introduction of the new notion of the Quasi-Monte Carlo (QMC) Method, which replaces the random points by deterministically chosen points, preserving their good properties. >

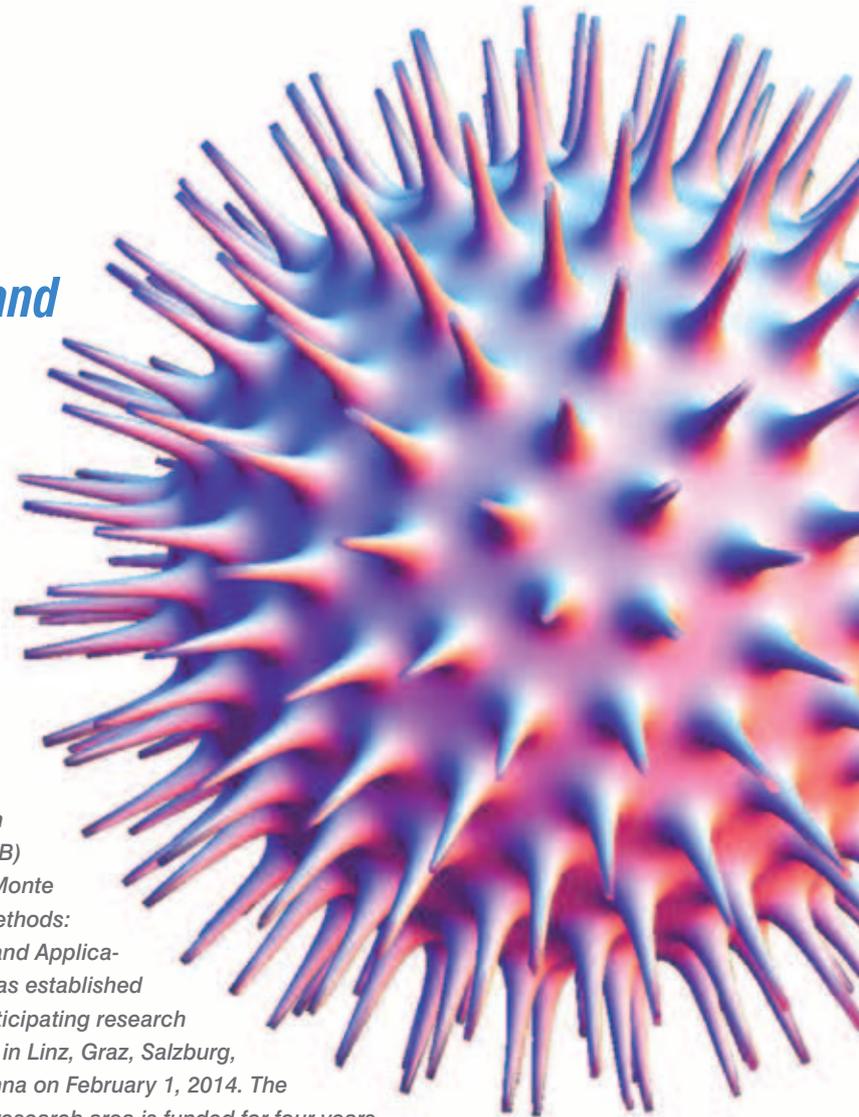


Abbildung 1:
Seeigel: Punktverteilung
minimaler Energie.
Figure 1:
Sea urchin: point
set of minimal energy.

© Institut für Analysis und Computational Number Theory

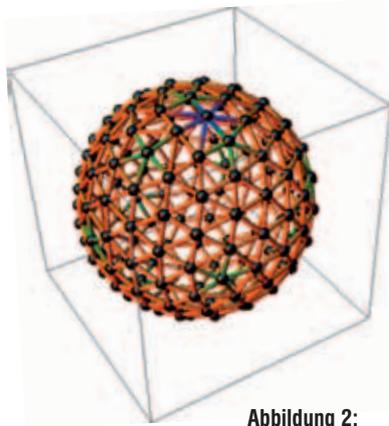


Abbildung 2:
Punktverteilung
minimaler Energie.

Figure 2:
Minimal energy point set.



Abbildung 3:
Potenzial einer Punktverteilung
minimaler Energie.

Figure 3:
Potential of a point set of
minimal energy.

Abbildungen/Figures © Institut für Analysis und Computational Number Theory

mathematisches Forschungsgebiet, das in dem erwähnten SFB gebündelt wird. Die beteiligten Forschungsgruppen haben weltweite Kontakte, etwa in die USA, nach Japan, Australien, Kanada, Deutschland, Frankreich und Italien.

Punktverteilungen auf Sphären und Mannigfaltigkeiten: minimale Energie und sphärische Designs

Dieses von Peter Grabner geleitete Teilprojekt beschäftigt sich mit der Konstruktion von gut verteilten Punktmengen auf Mannigfaltigkeiten besonders der d -dimensionalen Sphäre. Zwei Konstruktionsprinzipien sollen besonders untersucht werden:

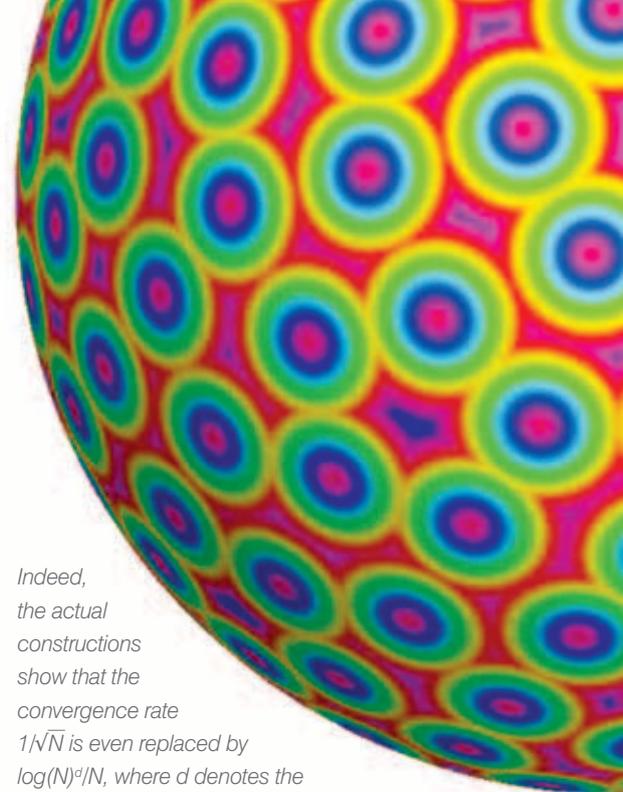
Minimale Energie: Für eine Menge von N Punkten auf einer Mannigfaltigkeit M und eine positive reelle Zahl s ist die s -Energie durch die Summe der negativen s -ten Potenzen der paarweisen Abstände der Punkte gegeben. Eine Konfiguration von N Punkten heißt Punktmenge minimaler Energie, wenn sie diesen Ausdruck minimiert. Die Motivation für die Untersuchung solcher Konfigurationen stammt aus Physik und Chemie, wo Selbstorganisation durch lokale Interaktion oft zu beobachten ist. Wenn N für festen Wert des Parameters s gegen unendlich geht, strebt die Verteilung gegen eine Grenzverteilung.

Sphärische Designs: Ein sphärisches t -Design ist eine endliche Punktmenge auf der Sphäre, für die die Quadraturformel mit gleichen Gewichten Polynome bis zum Grad t exakt integriert. Erst 2010 gelang es A. V. Bondarenko et al. zu zeigen, dass es sphärische t -Designs mit $O(t^d)$ Punkten gibt; dies ist dieselbe Größenordnung wie bekannte untere Schranken für diese Anzahl. Im Rahmen dieses Projektes sollen Diskrepanz, Integrationsfehler und Separationseigenschaften von Punktmengen minimaler Energie bzw. Designs untersucht werden. Darüber hinaus sollen auch zahlen-theoretische Konstruktionen für gut verteilte Punktmengen betrachtet werden.

Diophantische Gleichungen, Diskrepanz und Finanzmathematik

Dieses von Robert Tichy geleitete Teilprojekt beschäftigt sich mit der Qualitätsanalyse von QMC-Methoden und deren Anwendungen in der Finanz- und Versicherungsmathematik. Dabei spielen drei Konzepte eine zentrale Rolle:

1. Diskrepanz: Dabei geht es um quantitative Untersuchungen zur Güte der Verteilung von deterministisch erzeugten Punktfolgen. Insbesondere ist



Indeed, the actual constructions show that the convergence rate $1/\sqrt{N}$ is even replaced by $\log(N)^d/N$, where d denotes the dimension of the underlying domain. Replacing the Monte Carlo Method by the QMC method not only yields a considerable improvement in the convergence rate, but also guarantees correct results. The construction of QMC points, especially those designed for specific applications and large dimensions, is a research field with a long tradition in Austria and has been focused on in this SFB. The different research groups have widespread international contacts, for instance in the United States, Japan, Australia, Canada, Germany, France and Italy.

Distributing points on spheres and manifolds: minimal energy and designs

This project is directed by Peter Grabner and is concerned with the construction of well-distributed point sets on manifolds, especially the d -dimensional sphere. Mainly, two construction principles are investigated:

Minimal energy: *For a set of N points on a manifold M and a positive real number s , the sum of the negative s -th powers of the mutual distances of the points is denoted as the s -energy of the point set. A configuration is called minimal energy configuration if it minimises this quantity. The motivation for these constructions comes from physics and chemistry, where self-organisation by local interactions is a commonly observed phenomenon. If the number points N tend to infinity for a fixed value of the parameter s the distribution of the points tends to a limiting distribution.*

Spherical designs: *A spherical t -design is a finite point set on the sphere inducing an equal weight quadrature formula, which is exact for polynomials up to the degree t . In 2010 A. V. Bondarenko et al. could prove that spherical t -designs with $O(t^d)$ points exist; this is the same order of magnitude as the known lower bounds for this number.*

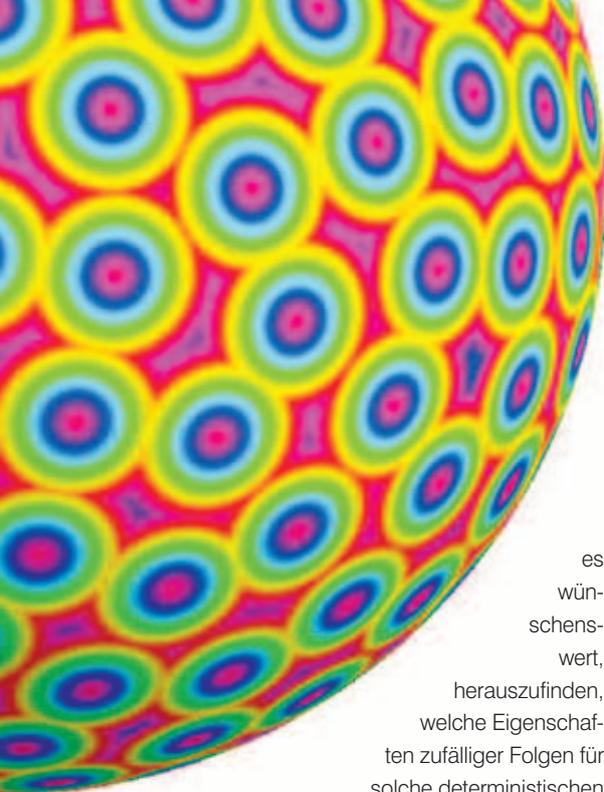


Abbildung 4:
Abstandsfunktion eines sphärischen Designs.

Figure 4:
Mesh function of a spherical design.

In the course of this project the discrepancy, integration error and separation properties of point sets of minimal energy and spherical designs shall be investigated. Furthermore, number-theoretic constructions for well distributed point sets shall also be considered.

Diophantine equations, discrepancy, and actuarial mathematics

This project is directed by Robert Tichy and investigates the quality of QMC methods as well as their application in financial and actuarial mathematics. Three concepts play a crucial role in this context:

1. Discrepancy: *This is used for the quantitative study of the distribution of deterministically generated point sequences. More precisely, it is desirable to find out which properties of random sequences are preserved for pseudo-random sequences of small discrepancy. For this purpose different notions of discrepancy, such as the classical discrepancy with respect to the supremum norm, the mean square discrepancy (with respect to axis parallel rectangles), or directional versions of discrepancy are used. There are interesting connections to harmonic analysis, fractal structures, and a number-theoretic problem of Zaremba.*

2. Diophantine Equations: *Estimates for the number of solutions of certain equations over the integers are used to prove probabilistic laws for the discrepancy. For instance, a law of the iterated logarithm and a central limit theorem for certain exponentially increasing sequences could be established. These laws turn out to be much more subtle than the "usual" analogous laws from probability theory: the occurring constants are no more universal, but they depend on the arithmetic structure of the sequence, and the laws are no more invariant under permutations of the sequence.*

3. Applications in financial and actuarial mathematics: *Important quantities in financial mathematics, such as the "fair" price of options or other financial derivatives, can be expressed as expectations with respect to certain probability laws. Evaluating these often leads to the computation of high-dimensional (dimension >1000) integrals, which can be treated numerically with QMC methods. Actuarial copula models are also considered in this project. Such models are needed for the implementation of the Basel III accord, and allow for the modelling of dependencies. ■*

es
wün-
schens-
wert,
herauszufinden,
welche Eigenschaf-
ten zufälliger Folgen für
solche deterministischen
Folgen kleiner Diskrepanz erhalten

bleiben. Dazu werden neben den klassischen Diskrepanzen bezüglich der Supremumsnorm und bezüglich des quadratischen Mittels (bezogen auf achsenparallele Testquader) auch richtungsunabhängige Diskrepanzen herangezogen. Dies führt zu interessanten Querverbindungen zur harmonischen Analysis, zu fraktalen Strukturen und zu einem zahlentheoretischen Problem von Zaremba.

2. Diophantische Gleichungen: Hier werden starke Abschätzungen für die Anzahl der Lösungen spezieller Klassen von Gleichungen in ganzen Zahlen dazu verwendet, wahrscheinlichkeitstheoretische Grundgesetze für Diskrepanzen zu beweisen. So gelingt es etwa, für exponentiell wachsende Folgen einer gewissen Bauart ein Gesetz vom iterierten Logarithmus und einen zentralen Grenzwertsatz herzuleiten. Diese Gesetze erweisen sich aber als viel subtiler als die aus der „gewöhnlichen“ Wahrscheinlichkeitsrechnung bekannten Analoga: Die dabei auftretenden Konstanten sind nicht universell (sie hängen von der arithmetischen Feinstruktur ab) und die Gesetze sind nicht mehr unabhängig von der Anordnung der Punktfolgen.

3. Anwendungen in der Finanz- und Versicherungsmathematik: Wesentliche Kenngrößen der Finanzmathematik (etwa der „faire“ Preis von Optionen oder anderen Finanzderivaten) können als Erwartungswerte bezüglich gewisser Verteilungen dargestellt werden. Dies führt im Allgemeinen auf hochdimensionale Integrale (Dimension > 1000), die mittels QMC-Methoden effizient numerisch behandelt werden können. Auch versicherungsmathematische Copula-Modelle werden im Projekt berücksichtigt. Damit gelingt es, wie von Basel III gefordert, auch Abhängigkeitsstrukturen zu modellieren und numerisch zu simulieren. ■



Peter Grabner arbeitet am Institut für Analysis und Computational Number Theory auf dem Gebiet der Zahlentheorie, Kombinatorik und Gleichverteilung, im Besonderen der Konstruktion von gut verteilten Punktmengen auf Mannigfaltigkeiten.

Peter Grabner works at the Institute for Analysis and Computational Number Theory. His research interests are in number theory, combinatorics, and uniform distribution, especially in the construction of well distributed point sets on manifolds.



Robert Tichy ist Leiter des Instituts für Analysis und Computational Number Theory. Forschungsschwerpunkte im Bereich der Analysis, der Zahlentheorie und der Versicherungsmathematik.

Robert Tichy is head of the Institute for Analysis and Computational Number Theory. His research interests are in analysis, number theory and actuarial and financial mathematics.

Mobility & Production



Helmut Eichseder ist Leiter des FoE „Mobility & Production“.
Helmut Eichseder is head of the FoE Mobility & Production.

Die Forschungsaktivitäten des FoE „Mobility & Production“ erstrecken sich auf die Gebiete Fahrzeug, deren Antriebe, aktive und passive Sicherheit, Wechselwirkung Verkehr und Umwelt sowie zukünftige Energieträger und Produktionstechnik. Mehr als 20 Institute und Forschungseinrichtungen der TU Graz sind in diese Themen involviert, sodass alleine die wechselseitige Information über Kompetenzen und die Vernetzung der Institutionen eine wesentliche Aufgabenstellung des FoE bildet.

Hilfreich dafür sind nicht nur die FoE-Sitzungen, sondern auch die im Anschluss stattfindenden Institutsbesichtigungen, die nicht nur eine wechselseitige Kenntnis der Forschungsschwerpunkte, sondern darüber hinaus den Gedankenaustausch über Möglichkeiten gemeinsamer Projektformulierung und -gestaltung fördern.

Dieses Ziel verfolgt auch das vom Rektorat geförderte Anschubfinanzierungsprogramm, über welches es bereits jetzt Erfreuliches zu berichten gibt: Von den in den drei bisherigen Runden eingebrachten 22 Anträgen zur Anschubfinanzierung wurden 14 bewilligt und die ersten Früchte in Form genehmigter Projekte können bereits geerntet werden. Weitere Entscheidungen, beispielsweise bezüglich eines EU-Antrags im „Horizon 2020“-Programm, werden mit Spannung erwartet. Als ein wünschenswertes Thema für die Beantragung einer §99-Professur wurde ursprünglich „Motor- und Fahrzeugakustik“ angedacht. Dies wird aber zunächst noch zurückgestellt, mögliche Synergieeffekte werden in einer fakultätsübergreifenden Arbeitsgruppe zum Thema Akustik untersucht. Dafür wird eine befristete §99-Professur vorgezogen, die im Rahmen der geplanten Forschungs- und Lernfabrik dem Themenkreis „Modernste Fertigungsmethoden“ (Stichwort Industrie 4.0) gewidmet ist. Eine Ausschreibung soll noch dieses Semester erfolgen.

Mithilfe eines Leadprojektantrages „Automotive Mechatronik“ werden eine weitere thematische Fokussierung des FoE und die Entwicklung eines Spitzenforschungsbereiches angestrebt. Im Zuge des Projekts soll ein Forschungs- und Demonstratorfahrzeug der TU Graz mit automatisierten Fahrfunktionen und CO₂-neutralem Antrieb entwickelt werden. In den Antrag sind 14 Arbeitsgruppen aus zwölf Instituten und fünf Fakultäten integriert. Diese forschen in ihren Spezialbereichen und bringen die Ergebnisse in den Demonstrator ein. Mit einer Anbindung an die Forschungs- und Lernfabrik sollen eine langfristige Basis für interdisziplinäres Arbeiten im FoE bzw. an der TU Graz und neue Möglichkeiten in der Lehre geschaffen werden.

The research activities of the FoE Mobility & Production extend across the field of vehicles, their propulsion, active and passive safety, the interaction between traffic and the environment, and future energy sources and production technology. More than 20 institutes and research establishments of Graz University of Technology are involved in these areas, which means that the mutual exchange of information about expertise and cross-linking the institutes alone represents a huge task for the FoE.

Not only are the FoE meetings helpful here, but also the tours round the institutes held after the meetings. They promote not only a reciprocal knowledge of research foci, but also an exchange of ideas about the possibilities of shared project formulations and designs.

This goal is also shared by the start-up funding programme promoted by the Rectorate about which there is good news: of the 22 applications submitted for start-up funding in the three earlier rounds, 14 were approved, and the first fruits in the form of approved projects can now be harvested. We are all eagerly awaiting additional decisions, for instance an EU application in the framework of the Horizon 2020 programme.

“Engine and vehicle acoustics” was originally considered as a desirable topic for the application for a §99 professorship, but this will be deferred. Possible synergy effects will be examined in a cross-faculty working group on the topic of acoustics. Priority has been given to a temporary §99 professorship dedicated to the subject of ultra-modern manufacturing methods (keyword Industry 4.0) in the framework of the planned research and training factory. The vacancy should be advertised later this semester.

The lead-project application “Automotive mechatronics” is meant to facilitate a further thematic focus of the FoE and the development of a leading research area. In the course of the project, a research and demonstrator vehicle will be developed by Graz University of Technology with automated driving operations and CO₂-neutral propulsion. 14 working groups from 12 institutes and five faculties have been brought together in the application. They will all conduct research in their specialist areas and the results will flow into the demonstrator vehicle. A connection to the research and training factory should create a long-term basis for interdisciplinary work in the FoE and indeed Graz University of Technology, as well as providing new opportunities in teaching.



Abbildung 2:
HiL-Prüfstandsgebung.
Figure 2:
HiL test bench environment.

Die optimale Aufteilung der Antriebsleistung auf Verbrennungsmotor und elektrische Maschine sowie die Regelung des Betriebsdrehzahlenniveaus in Abhängigkeit vom aktuellen Lastniveau erfolgt über ein zentrales Hybrid-Control-System (HCU), welches das Energiemanagement sowie die Betriebsstrategie beinhaltet. Die Entwicklung der dafür erforderlichen Funktions-Software erfolgte mithilfe einer virtuellen Entwicklungsumgebung in Form einer echtzeitfähigen Abbildung des Systemverhaltens des Hybridantriebs. Die Software-Funktionsentwicklung der HCU zur Steuerung, Regelung und Überwachung des Antriebs forderte, im Hinblick auf kurze Entwicklungszeiten und schnelle Erreichung der definierten Ziele, die Möglichkeit einer simulationsunterstützten vollständigen Überprüfung des Quellcodes. Durch eine CAE-gestützte Softwareentwicklung konnten Testmöglichkeiten in MiL, SiL und HiL (Model-, Software- und Hardware-in-the-Loop) eröffnet und genutzt werden. Der Zeitaufwand zur Erreichung eines hohen Reifegrades der Software konnte durch Nutzung dieser Entwicklungswerkzeuge und Methodik kurz gehalten werden. Auch der experimentelle Testaufwand in der anschließenden Validierungsphase am Motorprüfstand kann dadurch erheblich reduziert werden. Zeitaufwendige Entwicklungsschleifen durch Fehler in den Softwarefunktionen können bereits in frühen Entwicklungsstadien erkannt und behoben werden. Das Gesamtmodell des Antriebsstrangs

control of operating speed levels depending on the current load level is achieved via a central hybrid control unit (HCU), which includes the energy management and operating strategy. The development of the necessary functional software was carried out using a virtual development environment in the form of a real-time modeling of the system behavior of the hybrid drive. With regard to short development times and fast achievement of the objectives defined, the functional software development of the HCU for control, regulation and monitoring of the propulsion required the possibility of a simulation-assisted complete review of the source code. Through CAE-based software development, testing capabilities in MiL, SiL and HiL (Model, Software and Hardware-in-the-Loop) could be opened and used. The time required to achieve a high degree of maturity of the software could be kept short by using these development tools and methodology. Also, the experimental complexity in the subsequent validation phase on the engine test bench could be significantly reduced. Time-consuming development cycles caused by errors in the software functions can be detected and corrected in early stages of development. The overall model of the drivetrain as well as the hybrid controller and the energy management has been implemented in the program package MathWorks MATLAB/SIMULINK.

Experimental investigations

For the experimental investigations, the diesel-electric parallel hybrid drive was built up on a transient engine dynamometer within a specially developed HiL environment (hardware-in-the-loop environment) with RP-system (Rapid-Prototyping system) and bat-

wie auch der Hybrid-Regler sowie das Energiemanagement wurden im Programmpaket MathWorks MATLAB/SIMULINK umgesetzt.

Experimentelle Untersuchungen

Für die experimentellen Untersuchungen war der dieselektrische Parallelhybridantrieb auf einem transienten Motorprüfstand innerhalb einer dafür entwickelten HiL-Umgebung (Hardware-in-the-Loop-Umgebung) mit RP-System (Rapid-Prototyping-System) und Batteriesimulator (BattSim) am Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik aufgebaut. Als RP-Werkzeug war eine durchgängige Produktkette von ETAS in Verwendung. Mit einer Integrationssoftware erfolgte die Vernetzung der Software mit der vorhandenen Hardware. Die Kommunikation zwischen den Komponenten innerhalb der HiL-Umgebung wurde über CAN-Busse realisiert. Die Beschreibung dieser Schnittstellen sowie die Parametrierung des Echtzeit-Betriebssystems (RTOS) und das Kompilieren des Maschinencodes wurden ebenfalls mit der Integrationssoftware durchgeführt. Als RP-Hardware kam eine kompakte Echtzeitplattform mit entsprechendem Schnittstellenmodul zum Einsatz.

Bewertung

Zur Bewertung des dieselektrischen Parallelhybridantriebs wurden zunächst die Arbeitszyklen sowie der Gesetzgebungszyklus zur Ermittlung der Referenzniveaus mit dem Versuchsmotor im rein dieselmotorischen Betrieb am Prüfstand vermessen. Im Anschluss folgten die Untersuchungen mit dem Hybridantrieb und den unterschiedlichen Betriebsstrategien. Mit den im Rahmen dieses Forschungsprojekts entstandenen Ergebnissen konnte gezeigt werden, dass mit einem dieselektrischen Parallelhybridantrieb in mobilen Arbeitsgeräten Verbrauchseinsparungen unter Einhaltung der gesetzlichen Rahmenbedingungen von bis zu 10 Prozent möglich sind. Aus wirtschaftlicher Sicht werden auch im Bereich der mobilen Arbeitsmaschinen die Mehrkosten für den komplexeren Antrieb und die effektiv mögliche Einsparung an Betriebskosten darüber entscheiden, inwieweit hybride Antriebslösungen vonseiten der Kundinnen und Kunden Akzeptanz finden. ■

tery simulator (BattSim) at the Institute for Internal Combustion Engines and Thermodynamics. As RP-tool a continuous chain of ETAS products were used., The networking of the software with the existing hardware was achieved using an integration software. The communication between the components in the HiL environment was realized through a CAN bus. The description of these interfaces and the parameterization of the real-time operating system (RTOS) and the compiling of the machine code were also performed with the integration software. A compact real-time platform with the suitable interface module was used as RP hardware.

Evaluation

To evaluate the diesel-electric parallel hybrid drive, first of all, the real working cycles and the legislative cycle were measured on the test bench to determine the reference levels with the test engine in pure diesel-engine operating mode. Next, investigations using the hybrid drive and the different operating strategies were carried out. The results of this research project show that with a diesel-electric parallel hybrid drive in mobile machines, fuel savings of up to 10 % are possible in compliance with the legislative framework. From an economic perspective in the field of mobile machines, the additional cost of the more complex drive and the effective savings in operating costs will be a crucial factor with respect to whether or not hybrid drive solutions will find acceptance by customers. ■

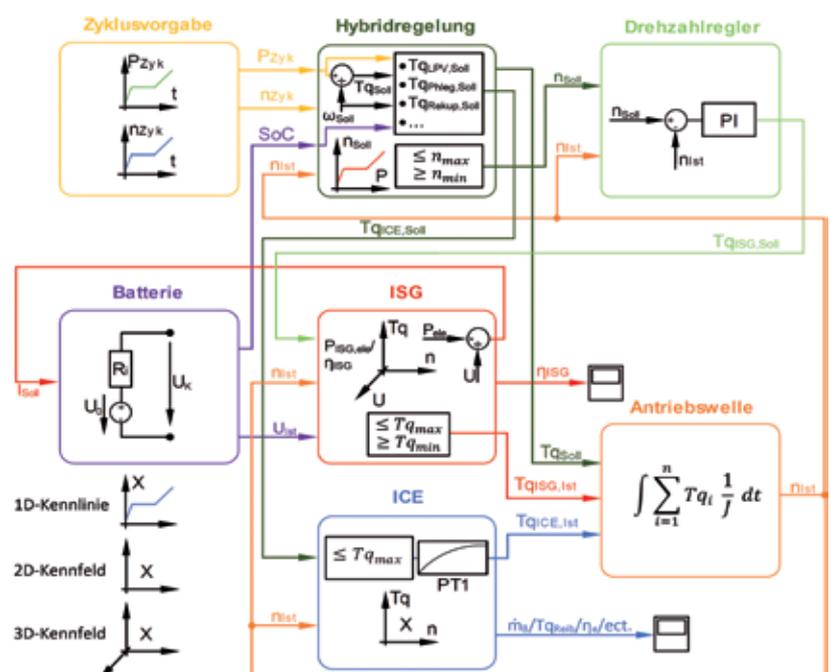


Abbildung 3:
 MiL-/SiL-Simulationsumgebung.
 Figure 3:
 MiL/SiL simulation environment.

Sustainable Systems



Urs Hirschberg ist Leiter des FoE „Sustainable Systems“.

Urs Hirschberg is head of the FoE Sustainable Systems.

Am 24. Oktober fand die fünfte Mitgliederversammlung des FoE „Sustainable Systems“ statt. Die wichtigste Neuigkeit war die Einrichtung einer §99-Forschungsprofessur, für die das Rektorat grünes Licht gegeben hat. An der Schnittstelle von Architektur, Bauingenieurwissenschaften, Elektrotechnik und Maschinenbau angesiedelt, wird die neue Professur über nachhaltige Gebäudetechnik forschen, eine Widmung, die von der Bau fakultät vorgeschlagen wurde. Den genau-

en Titel der Professur legt nun eine aus Mitgliedern der vier Fakultäten zusammengesetzte Kommission fest.

Interdisziplinarität ist in der Nachhaltigkeitsforschung unerlässlich. Dies gilt auch beim Forschungsthema Stadt, das international immer mehr Aufmerksamkeit erhält. In Harvard, wo ich derzeit als Visiting Scholar einen Teil meines Sabbaticals verbringe, wurde am 7. November das „Center for Green Buildings and Cities“ mit einem Festakt eröffnet. Im Oktober war ich auf einer Konferenz in New York, auf der unter anderem das „Center for Urban Science and Progress“ (CUSP) vorgestellt wurde, eine 2012 gegründete gemeinsame Initiative der New York University und der Stadt New York.

Ist derlei auch in Graz möglich? Eine Gruppe von Forscherinnen und Forschern aus dem FoE „Sustainable Systems“ ist dieser Meinung und hat ein Konzept für die Einrichtung eines Netzwerks für urbane Systeme eingereicht. Dass an der TU Graz schon sehr viel Forschung in diesem Bereich stattfindet, wurde auch am FoE-Mitgliedertreffen wieder deutlich. So berichtete das Institut für Architekturtechnologie von seiner Kooperation mit der Hong Kong Housing Authority und das Institut für Materialprüfung und Baustofftechnologie über Forschung im Bereich Nachhaltiges Bauen. Das Institut für Wärmetechnik gab Einblick in seine breite Projektpalette, darunter auch das Projekt über die Festoxidbrennstoffzelle, das auf S. 27 in einem eigenen Beitrag vorgestellt wird.

Statistiken der Weltbank zufolge verursachen Städte derzeit 67 Prozent der weltweiten Treibhausgasemissionen und 70 Prozent der Luftverschmutzung stammt von Straßenfahrzeugen in urbanen Gebieten. Möglichkeiten der Energieeffizienzsteigerung zu erforschen, ist höchst relevant, gerade auch für unsere Städte.

On October 24, the fifth general assembly of the Field of Expertise Sustainable Systems was held. The big news was that the Rectorate has given the green light to establish a special (§99) research professorship for the FoE Sustainable Systems. Situated at the intersection of architecture, civil engineering, electrical engineering and mechanical engineering, the new position will conduct research in the field of advanced building systems. This special professorship was proposed by the Faculty of Civil Engineering and its exact title remains to be determined by a commission of members from all the four faculties mentioned above.

Interdisciplinarity is key in research on sustainability. The same can be said in respect to research on the city, which is getting more and more attention internationally. At Harvard, where I'm spending a part of my current sabbatical as a visiting scholar, their Center for Green Buildings and Cities was launched at an inaugural conference on November 7. In October I attended a conference in New York, at which CUSP, the Center for Urban Science and Progress, a recent joint initiative of the city of New York and New York University, was presented.

Are such joint initiatives also possible in Graz? A group from the FoE Sustainable Systems think so and have proposed setting up a research network about Urban Systems. That Graz University of Technology already does plenty of research in this area also became clear at the FoE Sustainable Systems general assembly when different institutes presented their ongoing projects. The Institute of Architecture Technology reported about their cooperation with the Hong Kong Housing Authority. The Institute of Technology and Testing of Building Materials presented their research on sustainable construction. The Institute of Thermal Engineering gave an overview of their broad research activities, among them the project on solid-oxide fuel cells, which is featured on page 27.

According to World Bank statistics, cities currently contribute 67% of the world's energy-related greenhouse gases, and 70% of global air pollution comes from road vehicles in urban areas. Research on increased energy efficiency is highly relevant, particularly for our cities.

Festoxidbrennstoffzelle – eine vielversprechende Zukunftstechnologie

Solid Oxide Fuel Cells: A Promising Future Technology

Vanja Subotić, Christoph Schluckner, Christoph Hochenauer

Im Zuge des aktuellen FFG-Forschungsprojekts RESOX wird in Kooperation mit der AVL List GmbH am Institut für Wärmetechnik (IWT) der TU Graz die Ausdehnung der Lebensdauer einer Festoxidbrennstoffzelle (SOFC), die Bestandteil eines portablen Brennstoffzellen-Stromgenerators (APU) ist, erforscht. Diese APU („auxiliary power unit“) wird mit Dieselreformat betrieben und weist einen deutlich geringeren Kraftstoffverbrauch auf als vergleichbare konventionelle Aggregate. Die Lebensdauererweiterung einer SOFC wird durch das Rückgängigmachen der durch Ablagerungen verursachten Degradation möglich. Um dieses Ziel verwirklichen zu können, werden zellschonende Regenerationsverfahren am IWT entwickelt.

Steigender Energiebedarf und zunehmende Umweltbelastung durch Verwendung fossiler Energieträger erfordern neue Lösungen, die eine umweltfreundliche und hocheffiziente Energieerzeugung ermöglichen. Hochtemperatur-Brennstoffzellen, sogenannte Festoxidbrennstoffzellen (engl. „solid oxide fuel cells“, SOFCs), stellen eine vielversprechende Technologie zur Deckung der Grundlast in Form von Mikro-KWKs oder für die Verwendung als Hilfsantriebssystem in der Fahrzeugindustrie dar. Sie ermöglichen eine direkte Umwandlung der chemischen Energie des gasförmigen Brennstoffs in elektrische Energie ohne zusätzliche Verluste und zeichnen sich durch eine hohe Brennstoffflexibilität und einen hohen Gesamtwirkungsgrad aus. Einer erfolgreichen Kommerzialisierung dieser Systeme stehen unterschiedlichste Detailproblemstellungen gegenüber, wie die Bildung und Ablagerung von elementarem Kohlenstoff an der Anode der Zelle bei Betrieb mit kohlenstoffhaltigen Brenngasen. Der angelagerte Kohlenstoff führt mittelfristig zur Verschlechterung der Zelleistung und kann langfristig zur Schädigung bis hin zur Zerstörung der Brennstoffzelle führen.

Charakterisierung von Kohlenstoffablagerungsmechanismen

Ein großer Vorteil der SOFCs im Vergleich zu anderen Brennstoffzellenarten ist die hohe Brennstoffflexibilität. Bei Verwendung von kohlenstoffhaltigen Brennstoffen kann es unter bestimmten Bedingungen zur Bildung von Kohlenstoffablagerungen auf der Anodenseite kommen. Die Kohlenstoffablagerungen können auf unterschiedliche Weise >

At the Institute of Thermal Engineering at Graz University of Technology, the lifespan extension of solid oxide fuel cells (SOFCs) is being investigated. The current FFG-research project RESOX is being carried out in cooperation with AVL List GmbH. Solid oxide fuel cells are part of a portable fuel cell power generator (APU) which is operated using diesel reformat. Its fuel consumption is significantly lower than that of a comparable conventional unit. The lifespan of a SOFC can be extended by inverting the degradation caused by deposits. To achieve this goal, cell-friendly regeneration mechanisms are being developed at the Institute of Thermal Engineering.

Increasing energy demand and environmental pollution due to utilization of fossil fuels require new energy solutions to bring about an environment-friendly energy generation with high efficiency. Solid oxide fuel cells (SOFCs) are considered as a very promising technology for the combined generation of electrical and thermal energy for covering base load demand for single households or for usage in auxiliary power units (APUs). They enable direct conversion from chemical energy of gaseous fuels to electrical energy and offer high fuel flexibility and high overall efficiency. For the successful commercialization of these cells, a variety of detailed problems have to be solved. Carbon formation on the cell's anode, when operated on carbon-containing fuels, is one of them. Deposited carbon causes medium-term cell performance degradation and can lead to irreversible damage or eventually destruction of the cell.

Characterization of carbon formation mechanisms

A great advantage of SOFCs in comparison to other types of fuel cells is its great fuel flexibility. When using carbon-containing fuels under certain conditions, the formation of carbon depositions on the anode side is expected. The carbon depositions can occur in different ways, depending on the occurring reaction mechanisms and fuels used (CO, CH₄ or C_xH_y). Several forms of deposited carbon such as graphite, >



Vanja Subotić studierte Elektrotechnik an der TU Graz. Seit Oktober 2013 ist sie als wissenschaftliche Projektmitarbeiterin und Doktorandin am Institut für Wärmetechnik tätig. Ihre Forschungsschwerpunkte umfassen experimentelle Untersuchungen von Degradationsmechanismen von Festoxidbrennstoffzellen und Entwicklung von zellschonenden Regenerationsstrategien.

Vanja Subotić studied electrical engineering at Graz University of Technology. She has been a research associate and PhD candidate at the Institute of Thermal Engineering since October 2013. Her research points include experimental investigation of solid oxide fuel cell degradation mechanisms and development of cell-friendly regeneration strategies.

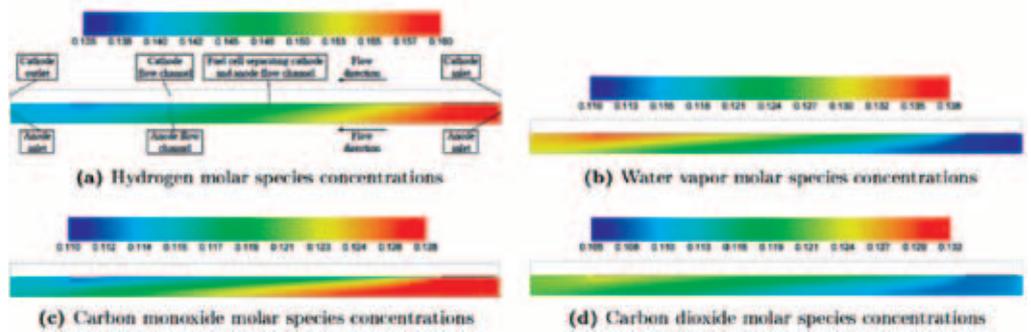


Christoph Schluckner ist seit Oktober 2013 wissenschaftlicher Projektmitarbeiter am Institut für Wärmetechnik und beschäftigt sich im Zuge seiner Dissertation mit der CFD-Simulation von Festoxidbrennstoffzellen.

Christoph Schluckner has been a project assistant at the Institute of Thermal Engineering since October 2013. He is a PhD candidate in the field of CFD-simulations of solid oxide fuel cells.

Abbildung 1:
Konturplot der elektrochemisch
aktiven Spezies, Speziesmolen-
bruch in mol/mol_{Fuel}.

Figure 1:
Contour plots of electrochemically
reacting species, species volume
fraction in mol/mol_{Fuel}.



Christoph Hochenauer ist Leiter des Instituts für Wärmetechnik und stellvertretender Leiter des FoE „Sustainable Systems“.

Christoph Hochenauer is head of the Institute of Thermal Engineering and deputy head of the FoE Sustainable Systems.

entstehen, die abhängig von den auftretenden Reaktionsmechanismen und verwendeten Brennstoffen (CO, CH₄ oder C_xH_y) sind. Man unterscheidet zwischen mehreren Formen von abgelagertem Kohlenstoff wie beispielsweise Graphit, polymerem Kohlenstoff oder Whisker-Kohlenstoff. Die Kohlenstoffablagerungen belegen die aktiven Flächen des Katalysators, verstopfen die Poren und Gaswege der Anode und können so eine Abnahme der Zelleistung verursachen und folglich die Lebensdauer der Zelle wesentlich verkürzen. Die Bildung von Kohlenstoffablagerungen ist von vielen Faktoren abhängig, wie unter anderem von der Temperatur, der Gaszusammensetzung, der Stromdichte, der Partikelgröße des eingesetzten Anodenmaterials oder von den verwendeten Materialien selbst. Um dieses Grundlagenproblem zu lösen, müssen die auftretenden Ablagerungsmechanismen gut verstanden und, wenn möglich, verhindert werden. Ist die Entstehung von Ablagerungen am Katalysator unvermeidlich, besteht die Möglichkeit der Regeneration. Unter Regeneration versteht man die zellschonende Entfernung von Ablagerungen, die keine Beschädigungen der Zellstruktur und Verschlechterung der Zellperformance verursacht. Der Regenerationsvorgang ist auch durch eine Reihe von unterschiedlichen Parametern wie Temperatur, Stromdichte oder Gaszusammensetzung beeinflusst. Dabei können einige Regenerationsmechanismen durch ungeeignete Regenerationsdauer zur Gefügeumwandlung des Katalysators führen und dadurch eine mechanische Zerstörung der Anode verursachen. Im Bereich der SOFCs befindet sich die Regeneration noch immer im Forschungsstadium und um die SOFCs für den kommerziellen Markt konkurrenzfähig zu machen, sind Untersuchungen in diese Richtung äußerst wichtig.

polymeric carbon or whisker-carbon can be distinguished. The carbon deposits occupy the active catalyst surface, block the pores and gas channels of the anode thus causing a possible decrease in cell performance and hence significantly shortening the lifespan of the cell. The formation of carbon deposits is dependent on many factors, such as operating temperature, gas composition, current density, particle size or the materials used. To solve this basic problem, the occurring carbon-deposition mechanisms must be well understood and should be prevented, if possible. If the formation of deposits on the catalyst and thus the performance deterioration is inevitable, the cell has to be regenerated to reach an initial state. Cell regeneration is understood as a cell-friendly process for removing deposits which does not cause damage to or further degradation of the cell structure and the cell performances. The regeneration process is influenced by a number of different parameters, such as temperature, current density, and gas composition. Unsuitable regeneration mechanisms can lead to structural transformation of the catalyst and thus cause mechanical destruction of the anode. In the field of SOFCs, regeneration is still in the research stage and to make SOFCs competitive for commercial usage, further investigations are of great importance.

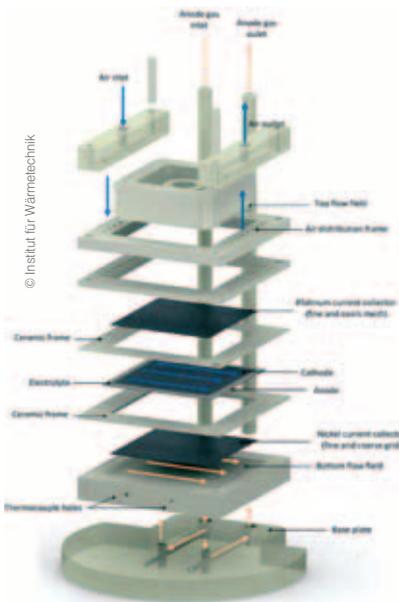
Im SOFC-Labor am Institut für Wärmetechnik werden die Kenntnisse über die ablaufenden Kohlenstoffablagerungs- und Regenerationsmechanismen sowie über die Einflussparameter vertieft. Die Versuche werden an unterschiedlichen SOFC-Typen (elektrolytgestützt, anodengestützt) durchgeführt. Um die reproduzierbare Bildung von Kohlenstoffablagerungen auf der Anode der SOFC zu sichern, wird Dieselreformat aus einzelnen Gaskomponenten (H₂, CO, CO₂, CH₄, N₂) synthetisch produziert. Zur Untersuchung von Ablagerungen wird sowohl die Messung der Polarisationskurve und des Gesamtwiderstandes der Zelle durch die elektrochemische Impedanzspektroskopie als auch die Messung der Gaskonzentration am Anodeneinlass und -auslass herangezogen. In Abbildung 2 ist das für die Untersuchungen eingesetzte keramische Einzelzellgehäuse dargestellt.

In the SOFC laboratory at the Institute of Thermal Engineering, carbon deposition and regeneration mechanisms as well as influencing factors are being studied. Different SOFC types (electrolyte-supported, anode-supported) are also being investigated. To ensure reproducible formation of carbon deposits on the anode of the SOFC, synthetic diesel reformat produced from single gas components (H₂, CO, CO₂, CH₄, N₂) is used as a fuel. The cell characterization is performed by measuring the polarization curve and the total cell resistance using impedance spectroscopy, as well as the gas concentration in the anode inlet and outlet. Figure 2 shows the ceramic cell housing used for experimental research at the Institute of Thermal Engineering.

CFD as a tool for calculating complex, heterogeneous reactions

Solid oxide fuel cells are operated at 700 – 1000°C and are classified as high-temperature fuel cells.

Abbildung 2:
Keramisches Zellgehäuse.
Figure 2:
Ceramic cell housing.



Numerische Strömungssimulation zur Beschreibung komplexer heterogener Reaktionen

Die Festoxidbrennstoffzelle oder „solid oxide fuel cell“ (SOFC) wird bei 700 bis 1000 °C betrieben und zählt zu den Hochtemperatur-Brennstoffzellen. Die hohen Temperaturen begünstigen die Reaktionskinetik und eine interne Reformierung von kohlenstoffhaltigen Brenngasen wird ermöglicht. Ein wertvolles Werkzeug für das Verständnis der chemischen sowie elektrochemischen Vorgänge innerhalb einer Zelle bietet die CFD-Simulation. Mithilfe eines dreidimensionalen Modells einer Brennstoffzelle können die auftretenden Reaktionen in den Gaskanälen und der porösen Elektrodenstruktur numerisch detailliert abgebildet und anschaulich visualisiert werden.

Zellgrößen mit Verwertungspotenzial

Die in diesem Projekt eingesetzten Brennstoffzellen weisen industriell verwertbare Abmessungen (10 x 10 cm²) auf. Unterschiedliche Reformatzusammensetzungen und deren Auswirkung auf die Zellperformance werden experimentell und numerisch untersucht. Für die numerischen Untersuchungen wurde in einem ersten Schritt ein CFD-Grundmodell zur Simulation der chemischen und elektrochemischen Vorgänge erstellt, das mit den am Hochtemperatur-Brennstoffzellen-Prüfstand gewonnenen Messdaten validiert wurde, der sich am Institut für Wärmetechnik befindet. Dieses Modell wird mit fortlaufendem Projektfortschritt um heterogene Kohlenstoffbildungsmechanismen erweitert. Dadurch wird eine numerische Vorhersage von für Kohlenstoffablagerungen gefährdeten bzw. betroffenen Bereichen der Zelle ermöglicht. Abschließend werden numerisch unterstützte Strategien entwickelt, um den an der Anode angelagerten elementaren Kohlenstoff zu regenerieren. Das erstellte CFD-Grundmodell der planaren Einzelzelle wurde für drei verschiedene Reformatzusammensetzungen bei jeweils drei unterschiedlichen Temperaturniveaus (750 °C, 800 °C, 850 °C) validiert. Eine anschauliche Darstellung der modellierten elektrochemischen Prozesse ist in Abb. 1 zu sehen. Wasserstoff wird elektrochemisch zu Wasserdampf oxidiert (Abb. 1(a) und 1(b)). SOFCs bieten die Möglichkeit, neben H₂ auch CO elektrochemisch zu CO₂ umzusetzen. Dies ist in Abb. 1(c) und 1(d) dargestellt. Das erstellte Grundmodell bildet die chemischen und elektrochemischen Vorgänge über den gesamten untersuchten Temperaturbereich mit hervorragender Genauigkeit ab, welche durch die Polarisationskurven in Abb. 3 belegt werden. Aufbauend auf dieses über einen weiten Temperatur- und Gaszusammensetzungsbe reich validierte Grundmodell wird in weiterer Folge ein detaillierter Kohlenstoffbildungsmechanismus entwickelt, der es ermöglicht, die Ablagerung von elementarem Kohlenstoff an der Brennstoffzellenanode numerisch abzubilden. ■

High operating temperatures promote reaction kinetics and thus facilitate internal reforming of gaseous hydrocarbon or biogenous fuels. Computational fluid dynamics (CFD) is a powerful tool to simulate and evaluate the occurring chemical and electrochemical processes within a spatially resolved fuel cell. The processes within the porous electrodes as well as within the thin gas channels can be visualized highly efficiently.

Industrial-sized cells for commercial usage

The fuel cells utilized in this project are of industrial size. Different fuel compositions are investigated in order to determine the impact on the cell performance. A reliable, validated numerical base model was created to scrutinize the occurring chemical and electrochemical processes within the high-temperature cell. Experimental data was gathered on the Institute of Thermal Engineering's high-temperature fuel-cell test rig. Numerical prediction of possible carbon deposition will be implemented in the created CFD-base model by means of detailed heterogeneous chemical reaction mechanisms. Thus, vulnerable regions can be visualized for carbon deposition. As a conclusion of this project, different numerically aided regeneration strategies will be developed to regenerate the carbon deposited on the cell's anode efficiently and in a cell-friendly way. The created CFD-base model of the planar SOFC single cell was validated for three different fuel compositions at low (750 °C), medium (800 °C) and high (850 °C) temperatures, respectively. Figure 1 depicts the modeled electrochemical processes by means of contour plots. Hydrogen is electrochemically oxidized to water (Fig. 1(a) and 1(b)). Besides H₂ carbon monoxide can be electrochemically oxidized by SOFCs (see Fig. 1(c) – 1(d)). The created CFD-base model represents the chemical and electrochemical processes for the entire temperature range with excellent accuracy, which is constrained by the polarization curves in Fig. 3.

This validated CFD-base model will be used for simulations of carbon formations on and within the porous anode structure of the cell. This will be conducted by a detailed carbon formation mechanism which will be implemented in the base model. ■

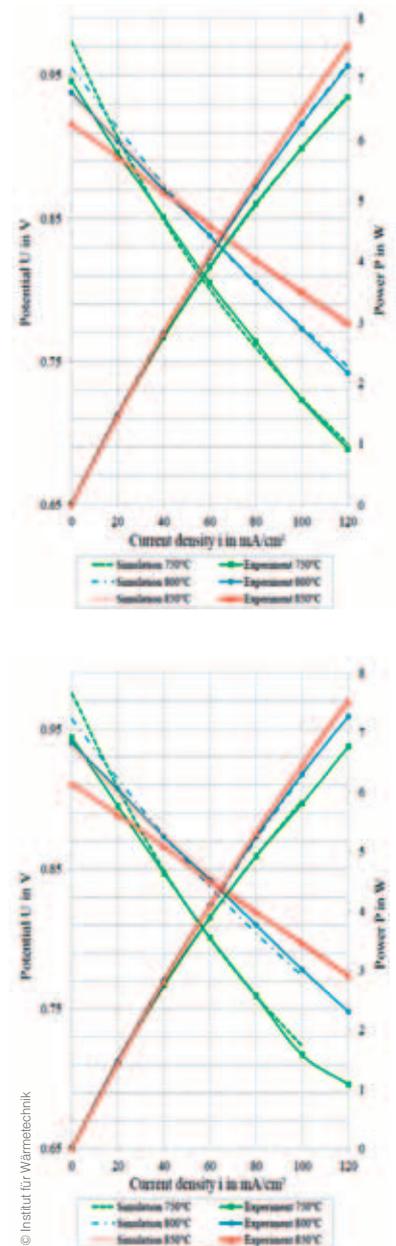


Abbildung 3:
Polarisationskurven zweier unterschiedlicher Gaszusammensetzungen über den gesamten Temperaturbereich.

Figure 3:
Polarization curves for two different fuel compositions and the entire temperature range.



Life

> MOBILITY &
PRODUCTION

Das IBL LeanLab – die erste Lernfabrik der TU Graz *The IBL LeanLab: The First Training Factory at Graz University of Technology*

Doris Griesser

Mit dem neuen LeanLab am Institut für Industriebetriebslehre und Innovationsforschung (IBL) von Christian Ramsauer steht seit Kurzem eine Einrichtung zur Verfügung, mit der anwendungsorientierte Forschung und Lehre im Bereich von Industrie 4.0 in eine neue Phase eingetreten sind. Kooperationen mit der Oxford University und Google California zeigen, dass sich die innovative Lernfabrik auch international bereits einen guten Ruf erworben hat.

Effizientes Arbeiten hat vor allem mit dem Einsatz der richtigen Methoden zu tun – im kleinen wie im großen Stil. Lean Production lautet das Zauberwort – und die Philosophie dahinter lässt sich erlernen und in allen nur denkbaren Arbeitsbereichen anwenden. „Learning and Doing“ ist deshalb das Motto des IBL LeanLab, in dem nicht nur Studierende, sondern auch Unternehmen jeder Größe und Ausrichtung erleben können, wie mithilfe der Lean-Methoden aus einem ineffizienten Produktionsprozess ein „schlanker“ Ablauf wird. Das IBL LeanLab ist ein miniaturisierter Industriebetrieb auf etwa 55 Quadratmetern, in dem an mehreren Arbeitsplätzen einzelne Scooterteile zum fertigen Produkt zusammengefügt werden sollen. „Hier können Studierende und interessierte Firmen Lean-Methoden praktisch anwenden und deren Wirkung auf den Fertigungsprozess hautnah erfahren“, erklärt Mario Kleindienst, der für Konzept und Umsetzung dieses besonderen Labors verantwortlich zeichnet.

Die mobile Fabrik

Effizienz-Trainings im IBL LeanLab können auch bei Firmen vor Ort durchgeführt werden, indem man die schlanke Lernfabrik bei Bedarf kurzerhand im Transporter zum Unternehmen verfrach-

In the form of the new LeanLab at the Institute of Industrial Management and Innovation Research (IBL) headed by Christian Ramsauer, there is now an institute in which application-oriented research and teaching in the field of Industry 4.0 have entered a new phase. Cooperation projects with Oxford University and Google California show that the innovative training factory has already built up a sound international reputation.

Efficient work involves, more than anything, employing the right methods – either on a small scale or on a large one. “Lean production” is the magic word, and the philosophy behind it can be learnt and applied in almost any conceivable field of activity. For this reason “learning and doing” has become the slogan of the IBL LeanLab, where not only students but also companies of every size and direction can learn to turn an inefficient production process into a “leaner” process with the help of lean methods. The IBL LeanLab is an industrial enterprise in miniature situated on some 55 square meters in which individual scooter parts are assembled into finished products at several workplaces. “Here, students and interested companies apply lean methods in practice and experience their effect on the manufacturing process at close quarters,” explains Mario Kleindienst, who is responsible for the concept and implementation of this special laboratory.

The mobile factory

Efficiency training sessions in the IBL LeanLab can also be carried out on-site at companies by transporting the lean training factory at short notice to the company if necessary. In the framework of a training course over several days, participants are confronted with a set of inefficient initial conditions. Through short theo-



tet. Im Rahmen einer mehrtägigen Schulung werden die Teilnehmerinnen und Teilnehmer zunächst mit einem ineffizienten Ausgangszustand konfrontiert. Durch kurze Theorieinputs sollen sie parallel dazu eine Vorstellung von der Lean-Theorie bekommen: „Dabei werden unter anderem die sieben Verschwendungsarten skizziert, die in einem Unternehmen in den unterschiedlichsten Bereichen zu finden sind“, so Mario Kleindienst. „Haben die Teilnehmenden die Lean-Philosophie einmal verstanden und mit ihr im LeanLab aus dem ineffizienten Ist-Zustand einen schlanken Montageprozess entwickelt, können sie diese Erfahrung auch in der eigenen Firma nutzen – und zwar in sämtlichen Unternehmensbereichen“, ist der Jungforscher überzeugt. Von dieser neuen Sicht auf brachliegende Einsparungs- und Verbesserungsmöglichkeiten profitieren selbstverständlich auch nicht produzierende Unternehmen. So ist etwa die erste Firmenschulung im IBL LeanLab für 30 Spitzenführungskräfte des Logistikdienstleisters Rail Cargo Austria geplant. Damit in diesem international agierenden Unternehmen sämtliche Arbeitsbereiche optimal aufeinander abgestimmt werden können, braucht man wie in der Industrie ein stringentes Managementkonzept.

Steigerung der Produktivität

Bei der Scootermontage im IBL LeanLab können die Teilnehmerinnen und Teilnehmer praxisnah erleben, welche Auswirkungen beispielsweise zu lange Wege zwischen den einzelnen Montageplätzen, nicht bereitgestellte Werkzeuge oder eine schleppende Materialversorgung auf die Unternehmensleistung haben. Selbst die ergonomische Gestaltung der einzelnen Arbeitsplätze wird einer kritischen Begutachtung unterzogen, da sie die Leistung der Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter maßgeblich beeinflusst. >

retical inputs, they're also meant to get an idea of what lean theory means. "This includes, among other things, outlining the seven types of waste, which can be found in various areas of a company," continues Mario Kleindienst. "When the participants have understood the lean philosophy and created a lean assembly process from the inefficient actual situation, they can use this experience in their own companies – in all areas of the company," adds the young scientist with conviction. Non-manufacturing companies also benefit from this new view of uncultivated savings and improvement potentials. To illustrate this, the first company training programme at the IBL LeanLab is planned for 30 top managers from the logistics provider Rail Cargo Austria. In order to be able to optimally coordinate all the working areas together in this internationally operating company, you need a strict management concept – just as in industry.

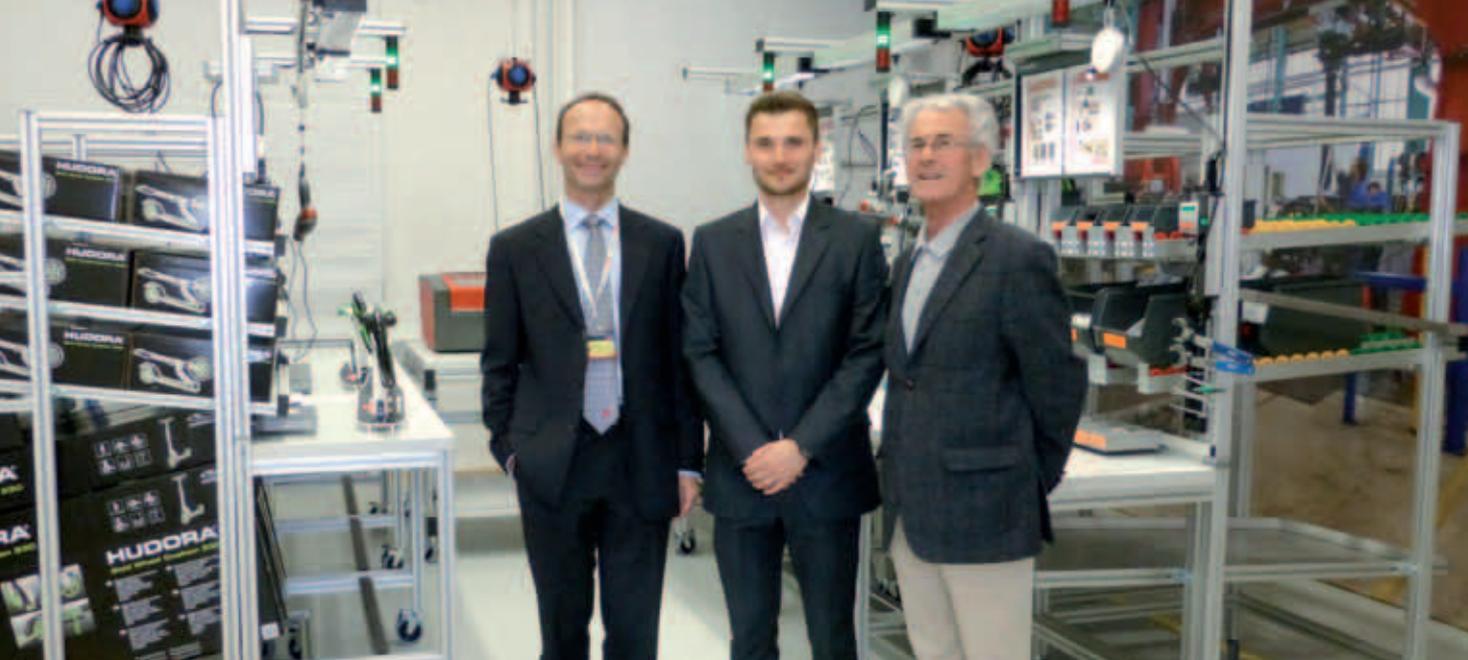
Increasing productivity

In assembling the scooter at the IBL LeanLab, participants can get hands-on experience about the effects on business performance of, for instance, excessively long paths between the individual assembly stations, tools which have not been put into position, or a sluggish supply of materials. Even the ergonomic design of individual workplaces are subjected to critical scrutiny – since they considerably influence the performance of the workforce.

The Graz LeanLab is not just meant to steer companies and students towards efficiency, but also to advance appropriate research in the field of Industry 4.0. For instance, in a cooperation with Viktor Mayer-Schönberger of Oxford University, where scientists are searching for appropriate sensors to optimize company processes. "With the right sensors, for example, product quality or even the physical and >

Abbildung 1:
Voller Betrieb im IBL LeanLab im Rahmen der ersten Lehrveranstaltung im Juni 2014.

Figure 1:
The IBL LeanLab running at full capacity during the first course in June 2014.



© Institut für Industriebetriebslehre und Innovationsforschung

Abbildung 2:
Institutsleiter Christian Ramsauer, Projektleiter des LeanLab Mario Kleindienst und der ehemalige Institutsleiter Josef Wohinz im IBL LeanLab (v. l. n. r.).

Figure 2:
Institute head Christian Ramsauer, LeanLab project leader Mario Kleindienst, and former institute head Josef Wohinz in the IBL LeanLab.

Mit dem Grazer LeanLab sollen aber nicht nur Betriebe und Studierende auf Effizienzkurs gebracht werden; es soll auch die entsprechende Forschung im Bereich Industrie 4.0 vorangetrieben werden. So etwa durch eine Kooperation mit Viktor Mayer-Schönberger von der Oxford University, bei der die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler nach passenden Sensoren für die Optimierung von Unternehmensabläufen fahnden. „Mit den entsprechenden Sensoren können zum Beispiel die physische und psychische Belastung der Mitarbeitenden oder auch die Produktqualität laufend erfasst werden“, erklärt Mario Kleindienst. „Bis Mitte des nächsten Jahres soll ein Konzept entwickelt werden, wie mithilfe modernster Sensorik die Produktivität von Industriebetrieben gesteigert werden kann.“

Google-Brillen für die Industrie

Eine spannende Forschungskoooperation gibt es auch mit dem Megakonzern Google direkt in Kalifornien: „Hier geht es darum, die bekannte Google-Brille – ein Minicomputer im Brillenrahmen – für die industrielle Anwendung weiterzuentwickeln“, verrät Kleindienst. Auf diese Weise könnten etwa die erforderlichen Montageschritte kontinuierlich in die Digitalbrille der Mitarbeitenden eingeblendet werden, um Irrtümer und Verzögerungen zu vermeiden und Arbeitsabläufe zu beschleunigen. Der geistige Grundstein des LeanLab wurde von Institutsleiter Christian Ramsauer gelegt. „Unterschiedliche Faktoren wie der demografische Wandel oder der zunehmende Fachkräftemangel zwingen zu einem Umdenken im Bereich der Aus- und Weiterbildung“, so Ramsauer. „Praxisorientierte Trainingskonzepte wie unser IBL LeanLab stellen dabei eine nachhaltige Plattform zur Wissensvermittlung dar.“ Die Effizienz der Produktion durch Lean Production sei eine zwingende Voraussetzung für Industrie 4.0 und dadurch unverzichtbar für den Erhalt von Wohlstand und Lebensstandard in Europa. „Die Forschung im Rahmen des IBL LeanLab geht in diese Richtung, wobei die neuen Erkenntnisse umgehend an Betriebe und Studierende weitergegeben werden.“ ■



© Oliver Wolf

Abbildung 3:
Anhand des Montageprozesses des IBL-Scooters sammeln Auszubildende erste Praxis-Erfahrungen mit Lean Production.

Figure 3:
Using the assembly process of the IBL scooter as an example, trainees gain their first experience of lean production.

psychological stress of workers could be recorded,” explains Mario Kleindienst. “A concept of how it would be possible to raise company productivity using modern sensor systems should be developed by the middle of next year.”

Google glasses for industry

There is also an exciting research cooperation with Google in California. “This deals with further developing the well-known Google glasses – a mini-computer built into an optical head-mounted display – for industrial use,” reveals Kleindienst. In this way, the required assembly steps can be continually faded into the digital glasses of the employees to prevent errors and delays and accelerate working processes. The intellectual foundation stone of the LeanLab was laid by Institute-head Christian Ramsauer. “Various factors, such as the change in demographics or the increasing shortfall in skilled workers, are compelling us to rethink education and training,” says Ramsauer. “Practice-oriented training concepts, such as our IBL LeanLab, represent a sustainable platform for knowledge transfer.” Production efficiency through Lean Production is a necessary condition for Industry 4.0 and thus indispensable for the preservation of prosperity and the standard of living in Europe. “Research at IBL LeanLab is going in this direction and new findings are passed on to companies and students without delay.” ■

Forschungsverbund für atomare Auflösung *Research Association for Atomic Resolution*

Annemarie Happe

Wer die Eigenschaften neuer Materialien steuern kann, hat einen Schlüssel zum technologischen Fortschritt in der Hand. Zum Verständnis der Strukturen sind komplexe Untersuchungen auf Nanometerskala, wie sie der Forschungsverbund FELMI-ZFE anbietet, unerlässlich. Möglich wird das in Graz u. a. mit einem der weltweit leistungsfähigsten Transmissionselektronenmikroskope – und exzellenten Expertinnen und Experten.

Die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des Grazer FELMI-ZFE dringen täglich in weitgehend unbekannte Welten vor: die des Mikro- und Nanokosmos. Während die Auflösungsgrenze des menschlichen Auges rund 0,1 mm beträgt, gehört für die Grazer Expertinnen und Experten der Blick auf Strukturen von wenigen Nanometern (1nm entspricht einem Millionstel Millimeter) zum Alltag.

Ultrascharfe Untersuchungen

Ermöglicht werden die hochauflösenden Blicke mit bildgebenden und spektroskopischen Verfahren und Instrumenten. Kaum ein Industriezweig kommt mehr ohne diese ultrascharfen Untersuchungen aus, denn sie geben auf atomarer Ebene entscheidende Hinweise für die gezielte Verbesserung von Werkstoffeigenschaften. So sollen etwa Materialien für die Automobil- und Luftfahrtindustrie leichter und dennoch widerstandsfähiger und Computerchips noch kleiner und effektiver werden. Medikamente sollen gezielter freisetzbar und Werkstoffe von morgen sozusagen hart wie Diamant und zugleich verformbar wie Wachs sein. Die Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter des FELMI-ZFE untersuchen u. a. Legierungen, Stähle, Keramiken, Verbundwerkstoffe, Mineralien, Polymere und Biomaterialien, um Ansatzpunkte einer Optimierung zu finden. Parallel dazu entwickeln sie Methoden, um die Substanzen >

Whoever can control the properties of new materials, holds the key to technological progress in their hands. Complex investigations at the nanometre scale, as carried out by the Austrian Centre for Electron Microscopy and Nanoanalysis (FELMI-ZFE) research association, are indispensable for understanding structures. This is possible at Graz by virtue of one of the world's most powerful transmission electron microscopes and its excellent specialists.

Staff of the Austrian Centre for Electron Microscopy and Nanoanalysis at Graz enter largely unknown territory on a daily basis: that of the micro and nano-cosmos. Whereas the resolution limit of the human eye is about 0.1 mm, looking at structures in the nanometre range (1nm is a millionth of a millimetre) is part of everyday life for the Graz experts.

Ultra sharp investigations

This high-resolution view is made possible using imaging and spectroscopic methods and instruments. There is hardly any branch of industry that can do without these ultra sharp investigations since they reveal secrets which are essential in the targeted improvement of material properties at the atomic level. Due to them, materials for the automotive and aerospace industries are becoming lighter yet more durable, and computer chips smaller but more effective; medicines can be more easily released, and tomorrow's materials can be made as hard as diamond, yet as malleable as wax. Staff at the Austrian Centre for Electron Microscopy and Nanoanalysis investigate alloys, steels, ceramics, composites, minerals, polymers and biomaterials, among other things, to discover optimisation starting points. Parallel to this, they develop methods to analyse and characterise substances even better. >



© ACR/WAPA – Fotoservices/Jämning

Abbildung 1:
Mihaela Albu am
Elektronenmikroskop.

Figure 1:
Mihaela Albu at the
electron microscope.

noch besser analysieren und charakterisieren zu können. „Ohne Elektronenmikroskopie wäre die Entwicklung modernster Materialien nicht denkbar“, betont Ferdinand Hofer, Leiter des Instituts für Elektronenmikroskopie und Nanoanalytik (FELMI) an der TU Graz. Und ohne die Kooperation mit dem ZFE könnte die Elektronenmikroskopie in Graz nicht auf jenem Niveau betrieben werden, das den Standort in der Steyregasse 17 zu einer führenden Einrichtung für Mikro- und Nanostrukturanalysen in Europa macht: Das ZFE wurde 1959 zur Stärkung der Interaktion zwischen der heimischen Industrie und der Wissenschaft gegründet. Zu den rund 30 Mitgliedern der Organisation (die auch Teil der „Austrian Cooperative Research, ACR, ist) zählen u. a. AT&S, austriamicrosystems, AVL List, Böhler Edelstahl, Borealis und die Treibacher Industrie AG.

International sichtbar durch Zusammenarbeit

„Das ZFE unterstützt FELMI beim Ausbau der Infrastruktur, was bei den begrenzten Ressourcen der Unis immer wichtig ist. Andererseits hält es eine hoch qualifizierte Stammebelegschaft bereit“, schildert Hofer. Gemeinsam verfügt man über aktuell 47 Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter (davon 22 vom ZFE) für industriennahe Projekte und die wissenschaftliche Grundlagenforschung. Gemeinsam wird im Forschungsverbund mit rund 30 Uni-Instituten und Zentren in Österreich und im Ausland – wie etwa in Jülich, Lausanne, Sevilla und Oxford – sowie mit rund 100 Unternehmen kooperiert. „Die Zusammenarbeit vor Ort macht uns international sichtbar“, so Hofer.

Durch die Kombination der Methoden der Materialcharakterisierung mit dem „Gerätepark“ am FELMI-ZFE wird eine immense Datenfülle erreicht: „Wir können Information zur lokalen Morphologie, Kristallstruktur, chemischen Zusammensetzung und zum Bindungsverhalten und zu physikalischen Eigenschaften erhalten. Und wir können Phänomene wie z. B. Defekte, innere Grenzflächen, die Sekundärphasen in Festkörpern und deren Wechselwirkungen mit der Festkörpermatrix erfassen“, zählt Hofer auf. Das Highlight unter den Grazer Instrumenten ist das Großgerät ASTEM (Austrian Scanning Transmission Electron Microscope) – eines der weltweit leistungsfähigsten Raster-Transmissionselektronenmikroskope. Das ASTEM liefert Vergrößerungen im Maßstab 1:1.000.000. Dazu rastert ein mit 0,07 nm enorm feiner und zugleich sehr starker Elektronenstrahl die nur 10 bis 100 nm „dicken“ Proben ab, schildert Mihaela Albu von der Abteilung Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) des

“The development of cutting-edge materials would be inconceivable without electron microscopy,” stresses Ferdinand Hofer, head of the Institute of Electron Microscopy and Nanoanalysis (FELMI) at Graz University of Technology. And without the cooperation of the Austrian Centre for Electron Microscopy (ZFE), electron microscopy in Graz could not be carried out at the level necessary for the Institute at Steyregasse 17 to have become a leading European establishment for structural micro and nano-analysis. The Austrian Centre for Electron Microscopy (ZFE) was founded in 1959 to strengthen collaboration between domestic industry and science. Among the approximately 30 members of the organisation (which is also part of Austrian Cooperative Research, ACR) are AT&S, austriamicrosystems, AVL List, Böhler Edelstahl, Borealis and Treibacher Industrie AG.

International visibility through co-operation

“The Austrian Centre for Electron Microscopy supports the Institute of Electron Microscopy and Nanoanalysis in expanding infrastructure, something which is always crucial when dealing with the limited resources of universities. On top of this, it also keeps a highly qualified core workforce operational,” explains Hofer. Together, they have an available workforce of 47 staff (22 work for the Austrian Centre for Electron Microscopy) for industry-oriented projects and basic scientific research. Together, the research association co-operates with some 30 universities and centres in Austria and, among others, in Jülich, Lausanne, Seville and Oxford, as well as with about 100 companies. “Co-operation on the ground makes us internationally visible,” adds Hofer.

Through the combination of methods of material characterisation using the “equipment pool” at the Austrian Centre for Electron Microscopy and Nanoanalysis (FELMI-ZFE), a huge amount of data is being captured. “We can keep information on local morphology, crystalline structure, chemical composition and bonding behaviour and physical properties. And we can record phenomena such as defects, inner boundary surfaces, the secondary phases in solids and their interactions with the solid body matrix,” lists Hofer. The highlight among the instruments at Graz is the ASTEM – Austrian Scanning Transmission Electron Microscope: one of the world’s most powerful scanning transmission electron microscopes. “The ASTEM provides enlargements to a scale of 1:1,000,000. To do this, an amazingly fine and extremely powerful electron beam of 0.07 nm scans samples with a “thickness” of only 10 to 100 nm,” explains Mihaela Albu of



ZFE. Detektoren fangen die durch Wechselwirkung mit den Atomen gestreuten Elektronen auf. Daraus können Rückschlüsse auf Details in atomarer Größenordnung gezogen und in Bilder übersetzt werden. „Atompositionen und Abstände zwischen den Atomen werden direkt erkennbar“, so Albu.

Beste Forscherin der ACR

Durch den in Graz mitentwickelten zusätzlichen Energiefilter (GIF) und ein neues Röntgenspektrometer können die spektroskopischen Methoden bis zur atomaren Auflösung ausgereizt werden, wie Albu erläutert. So können nunmehr Röntgenspektren und Energieverlustspektren simultan und mit bisher unerreichter Geschwindigkeit von 1.000 Spektren pro Sekunde gemessen werden. Die aus Rumänien gebürtige Kernphysikerin, die in Graz als Expertin für analytische Elektronenmikroskopie von Werkstoffen tätig ist, benötigt das ASTEM u. a. für Untersuchungen von Hightech-Stählen: Der Einsatz der zusätzlichen Methoden erlaube u. a. in Chromstählen die Charakterisierung von bis zu Nanometern kleinen Karbiden und Nitriden, die für die hohe Festigkeit im Hochtemperaturbereich ausschlaggebend sind (Zusammenarbeit mit dem Institut für Werkstoffkunde und Schweißtechnik der TU Graz). In einem anderen Projekt hat sich Albu gemeinsam mit dem Gießerei-Institut Leoben erfolgreich um Verbesserungen der mechanischen Eigenschaften von Magnesium- bzw. Aluminium-Siliziumlegierungen für den Autobau bemüht. „Die Spitzengeräte sind die Arbeitsgrundlage – die Basis für den Erfolg sind jedoch hochmotivierte Spitzenforscherinnen und -forscher, die mit ihnen arbeiten, die Auswertungsmethoden ständig verbessern, die Anwendungsmöglichkeiten ständig vorantreiben und neue Ideen entwickeln – zum Wohl der Forschung und der Industrie“, betonte Hofer mit Seitenblick auf Albu. Die 43-jährige Forscherin wurde jüngst für die Entwicklung neuer Analyse- und Auswertungsmethoden als beste Forscherin der ACR mit dem ACR Woman Award 2014 ausgezeichnet. ■

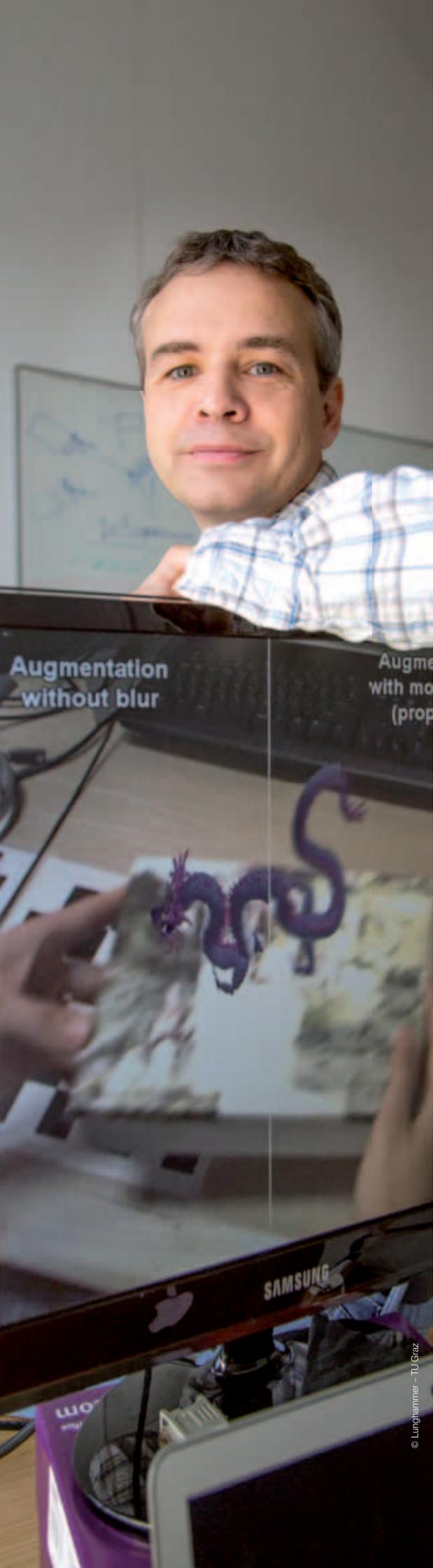
the Department of Transmission Electron Microscopy (TEM) at the Austrian Centre for Electron Microscopy. Detectors catch electrons which have been scattered due to the interaction with the atoms. From this, inferences regarding details can be drawn at the atomic scale and translated into images. "Positions of atoms and gaps between the atoms are directly recognisable," adds Albu.

Best ACR researcher

"The energy filter (GIF), which was co-developed at Graz, and a new X-ray spectrometer allow spectroscopic methods to be run through down to the atomic level," explains Albu. This means that X-ray spectra and energy loss spectra can now be simultaneously measured with previously unreachable speeds of 1,000 spectra per second. The Romanian-born nuclear physicist, who works at Graz as an expert in the analytic electron microscopy of materials, needs the ASTEM for investigations of high-tech steels, among other things. The use of these additional methods allows the characterisation down to the nanometre scale of small carbides and nitrides, which are important for high strength in the high temperature range, in chrome steels and other materials (collaboration with the Institute of Materials Science and Welding at Graz University of Technology). In another project, together with the Austrian Foundry Research Institute, Leoben, Albu has successfully contributed to improving the mechanical properties of magnesium and/ or aluminium-silicon alloys for use in automobile construction. "The top instruments form the working basis. The foundation for success, however, is provided by the highly motivated top researchers working with them who are constantly improving methods of analysis, advancing application possibilities and developing new ideas for the benefit of research and industry," emphasises Hofer with a sideways glance at Albu. The 43-year-old researcher was recently awarded the ACR Woman Award 2014 as best ACR researcher for the development of new analysis and evaluation methods. ■

Abbildung 2:
Mihaela Albu wurde für ihre Forschungen mit dem ACR Woman Award 2014 ausgezeichnet. Im Bild (v. l. n. r.) Vizekanzler und Wissenschaftsminister Reinhold Mitterlehner, Mihaela Albu sowie ACR-Präsident Martin Leitl.

Figure 2:
Mihaela Albu was awarded the ACR Women Award for her research. In the photo (from left to right) Vice-Chancellor and Federal Minister of Science Reinhold Mitterlehner, Mihaela Albu and ACR President Martin Leitl.



Internationalisation

> INFORMATION,
COMMUNICATION &
COMPUTING

Die bessere Wirklichkeit *A Better Reality*

Verena Ahne

Vincent Lepetit widmet sich am Institut für Maschinelles Sehen und Darstellen an der TU Graz dem Fachbereich Augmented Reality and Computer Vision. Ein Spezialgebiet des Franzosen ist die Verbesserung der Bilderkennung in besonders schwierigen Umgebungen wie bei spiegelnden Oberflächen oder schlechten Lichtverhältnissen. Damit sollen Augmented-Reality-Anwendungen unter anderem für Industrie und Großanlagen entwickelt werden.

Die digitale Revolution stellt die Computerwissenschaften vor ständig neue Herausforderungen. Am Institut für Maschinelles Sehen und Darstellen der Technischen Universität Graz beschäftigen sich seit 2014 bereits vier Professuren mit computerbasierter Bildverarbeitung und Programmen zu deren Anwendung. Einer der vier Männer – Frauen sind in dem Feld nach wie vor stark unterrepräsentiert – ist Vincent Lepetit. Der Experte für Computer Vision, auch maschinelles Sehen genannt, und Augmented Reality wurde im Februar nach Graz berufen, vorerst einmal auf sechs Jahre. In einem kleinen Ort in Nordfrankreich geboren, studierte Lepetit Informatik in Nancy, bevor er im Jahr 2001 ans Computer Vision Lab der Eidgenössischen Technischen Hochschule Lausanne (EPFL) wechselte, eine der Top-Universitäten Europas; als Gastprofessor ist er der EPFL nach wie vor verbunden.

Computer Vision und Augmented Reality – eine gute Kombination

„Für Menschen ist es ganz natürlich, auf Bildern Strukturen, Objekte oder Leute zu erkennen und zu sehen, in welche Richtung sie orientiert sind“, erklärt der

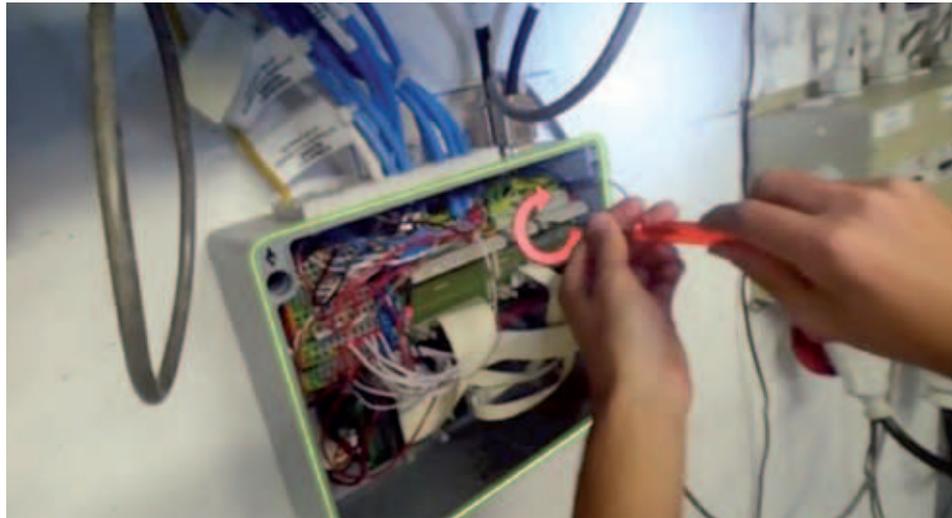
Vincent Lepetit of the Institute of Computer Graphics and Vision at Graz University of Technology is dedicated to the field of augmented reality and computer vision. The improvement of image recognition in particularly difficult environments, such as on reflecting surfaces or in poor light conditions, is a special field of the French scientist. To this end augmented reality (AR) applications are being developed for industry and large-scale plants.

The digital revolution is constantly providing computer science with new challenges. At Graz University of Technology's Institute of Computer Graphics and Vision, four professorships have been focusing on computer-based image processing and software for its application since 2014. One of these four men – women are under-represented in the field as before – is Vincent Lepetit. The expert for computer vision and augmented reality was appointed in February provisionally for six years. Born in a small town in the north of France, Lepetit studied informatics at Nancy before he moved to the Computer Vision Lab at the École Polytechnique Fédérale de Lausanne (EPFL) in 2001 – one of the best universities in Europe. He still has ties to the EPFL as a visiting professor.

Computer vision und augmented reality: a winning combination

“It’s quite natural for humans to see or recognize in which direction images, structures, objects or people are facing,” explains the 42-year-old, pointing out the biggest obstacle in computer vision. “But for a computer it’s extremely difficult.”

© TU Graz – EPFL



42-Jährige die größte Schwierigkeit beim maschinellen Sehen. „Aber für Computer ist das sehr schwierig.“

Recht gut funktioniert die Analyse bereits bei statischen Bildern, wie Gesichtserkennungsprogramme zeigen, die Gesichter mit hoher Treffsicherheit einzelnen Personen zuordnen können. Doch für Augmented Reality (AR) muss die Objekterkennung in Echtzeit bei bewegten Bildern erfolgen. Denn die namentgebenden computergenerierten „Realitätsverbesserer“ werden Videoaufnahmen live hinzugefügt, also in 20 bis 25 Bildern pro Sekunde hineingerechnet. Die AR reicht dabei von einer einfachen Beschriftungen, wie bei der App, die Berggipfel erkennt und deren Namen einblendet, bis hin zu aufwendigen Grafiken, Figuren oder Filmen. Ebenfalls möglich ist es, Objekte aus dem Video herauszurechnen. Sie verschwinden dann buchstäblich vom Bildschirm.

Von magischen Büchern und Spielen ...

„Eine unserer Feuerproben war das ‚Magische Buch‘“, erzählt Lepetit von einer Arbeit an der EPFL. Dabei wird in die Leselampe neben einem Fotoband eine Kamera montiert, die das Buch und alle, die es in die Hand nehmen, filmt. Das Video wird in Echtzeit auf einen Bildschirm übertragen. Dort wird das Buch lebendig: Scherenschnitte von Waldtieren, Fischen und Pflanzen beginnen über die Fotos zu huschen. Besonders herausfordernd war es, diese Animationen „mitwandern“ zu lassen, wenn das Buch bewegt wird, wie beim Umlblättern. „Es hat gut funktioniert“, sagt Lepetit. „Wir waren damit in einigen Museen und die Menschen mochten es sehr.“

Als zweites Beispiel für AR zeigt er ein Monopoly-Brett mit den typischen kleinen Spielfiguren und Häusern. Auf dem Bildschirm werden daraus große, bunte Figuren und Grafiken von Häusern. „Man kann also weiterhin mit dem normalen Spielbrett und den kleinen Figuren spielen, bekommt jedoch etwas Neues dazu – ein nettes Anwendungsgebiet.“ >

The analysis already works very well with static images, as shown by face recognition programmes, which can allocate faces to individual persons with a high degree of accuracy. But with augmented reality (AR), the recognition of objects has to take place in real time in moving images. After all, video recordings are fed to the computer-generated AR unit live at about 20 to 25 images per second. AR ranges from a simple caption, such as with the app which recognises mountain summits and superimposes the relevant name, to complex graphics, figures or films. It is also possible to subtract objects from the video: they literally disappear from the screen.

From magic books and games...

“One of our most important tests was the magic book,” Lepetit says, indicating one of the EPFL tasks. A camera was attached to the reading lamp next to a book of photographs with the intention of filming the book and everyone who picked it up. At the same time, the video was transmitted to a screen in real time. On screen the book became alive: silhouettes of forest animals, fish and plants began to scurry over the photos. It was especially challenging to allow these animations to wander around by themselves when the book was moved, as when the pages were turned. “It worked really well,” says Lepetit. “We were in a few museums and people liked it very much.”

As a second example of AR, he showed us a Monopoly board with its typical figures and houses. On the screen they became large, colourful figures and graphics of houses. “You can carry on playing with the normal board and small figures, but you get something new with it. This is a nice field of application.” >

Abbildung 1:
Die Anwendung von Augmented Reality in der Schulung von Technikerinnen und Technikern am ATLAS-Teilchendetektor der Europäischen Organisation für Kernforschung (CERN).

Figure 1:
Augmented reality application for training technicians in the ATLAS particle detector at the European Organization for Nuclear Research (CERN).

Abbildung 2:
Auf Basis eines partiellen 3D-Modells der Umgebung, wie in (a) abgebildet, werden die Eingangsbilder durch Abgleich mit einer Referenzansicht der Umgebung registriert. Die korrekte Überlagerung der virtuellen Teekanne und des grünen Modells der Kiste im Bildzentrum zeigt, dass das Eingangsbild mit dem neuen Ansatz richtig registriert wurde (d), obwohl die starke Lichtquelle zu einer veränderten Beleuchtung und teilweisen Verdeckung der Szene führt. Im Gegensatz dazu schlägt der Bildabgleich mittels Pixelintensität fehl, wie in (c) ersichtlich.

Figure 2:
Given a partial 3D model of the environment such as the one shown in (a), we register the input images by aligning them with one reference view of the environment. The virtual teapot and the green model for the box in the middle of the image correctly overlaid in the input image show that our approach registered image (d) correctly, despite the strong lamp changing the illumination and partially occluding the scene. By contrast, aligning the images based on the pixel intensities as it is usually done completely fails, as shown in (c).

... bis zur Wartung von Großanlagen

Lepetit, den Apps und Spiele weniger interessieren, tüftelt mittlerweile an kniffligeren Aufgaben: AR für Fabriken und Großanlagen. Die Idee dahinter klingt bestechend: Arbeitsschritte, die hohe Präzision erfordern oder besonders schnell ablaufen müssen, etwa in einer gesundheitsgefährdenden Umgebung, könnten durch die Zusatzinformationen der AR schneller und sicherer werden. „Wir arbeiten beispielsweise an einem Programm für die Wartung des Teilchenbeschleunigers im CERN“, so Lepetit, „in dem sich die Leute wegen der leicht radioaktiven Strahlung nicht allzu lange aufhalten sollen.“ AR könnte das langwierige Nachschlagen in Handbüchern ersetzen und stattdessen virtuell zeigen, welche Arbeitsschritte wie und wo zu tun sind. Ebenso könnte der Bau von Präzisionsgeräten, bei dem keine Fehler passieren dürfen, AR-gestützt präziser und rascher ablaufen. Lepetit arbeitet hier unter anderem für einen Flugzeughersteller, der AR künftig für die Fertigung wichtiger Bauteile nutzen möchte.

„Für solche komplexen, hoch spezialisierten Aufgaben ist AR ein hervorragendes Anwendungsgebiet“, ist Lepetit überzeugt. „Manche finden das ein bisschen erschreckend, aber ich kann mir vorstellen, dass es bald zu einem der wichtigsten Felder für Augmented Reality werden könnte.“

Hürden erkennen, Hürden nehmen

Voraussetzung dafür ist freilich, dass die maschinelle Objekterkennung in 3D einwandfrei funktioniert. Doch hier kämpfen die Entwickler noch mit so manchem Problem.

Als besonders schwierig erweisen sich Reflexionen und Lichtveränderungen. „In fast allen Fabriken und Anlagen gibt es metallische, glänzende Oberflächen“, weiß Lepetit etwa vom CERN. Ein Albraum für Computer Vision: Bereits ein etwas hellerer Schimmer auf einer Plastikfolie, den das menschliche Auge kaum wahrnimmt, kann beim maschinellen Sehen zu Fehlern oder Versagen führen. „Wir konnten nun aber eine Technik entwickeln, die deutlich besser abschneidet als der Standardalgorithmus“, gibt es eine Erfolgsmeldung. Selbst wenn in der alufolienglänzenden Umgebung eine Lampe angeschaltet wird, erkennt das neue Programm das Objekt. Ein Meilenstein auf dem langen Weg, die Wirklichkeit tatsächlich besser zu machen. ■

... to the maintenance of large-scale plants

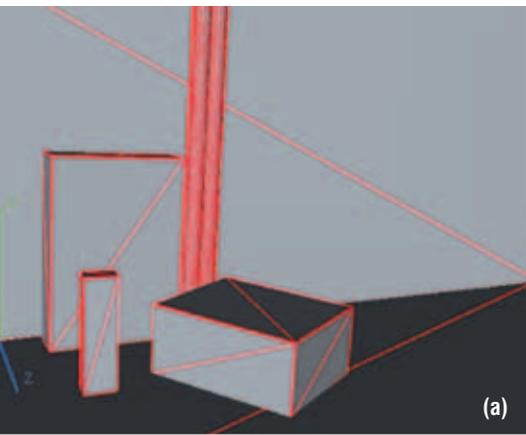
Being less interested in apps and games, Lepetit is meanwhile working on more ingenious problems: AR for factories and large-scale plants. The idea behind it sounds captivating. Working steps which require high precision or which have to be carried out very quickly, perhaps in an environment hazardous to health, could become faster and safer through additional information via AR. “For example, we’re working on a programme to carry out maintenance on the particle accelerator at CERN, where people shouldn’t hang around for too long due to the slight radioactivity,” explains Lepetit. AR could replace tediously looking things up in manuals and instead show which working steps are to be carried out how and where. Also, in the construction of high-precision devices, where errors are inadmissible, AR could help to carry out the procedures faster and more accurately. Lepetit also works for an aircraft manufacturer which wants to use AR in the future to produce important parts.

“AR is an excellent field of application for such complex, highly specialised tasks,” Lepetit is convinced. “Some people find it a bit alarming, but I can imagine that it could become one of the most important fields for augmented reality.”

How to recognise hurdles and overcome them

This is only possible, of course, if the machine object recognition in 3D works flawlessly. But developers are still working on this and similar problems.

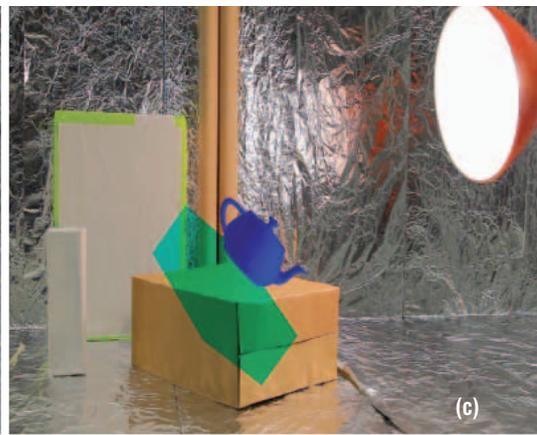
Reflections and changes in light intensity have proved to be particularly difficult. “There are metallic, shiny surfaces in nearly all factories and plants,” adds Lepetit, referring to CERN. This can present a nightmare for computer vision. Just the bright sheen of a piece of plastic foil hardly perceptible to the human eye can lead to errors or failure in computer vision. “We’ve been able to develop a technique which is definitely better than the standard algorithm,” he says. Even if a lamp is switched on in a shiny aluminium-foil environment, the new programme recognises the object. A milestone in the long journey towards a better reality. ■



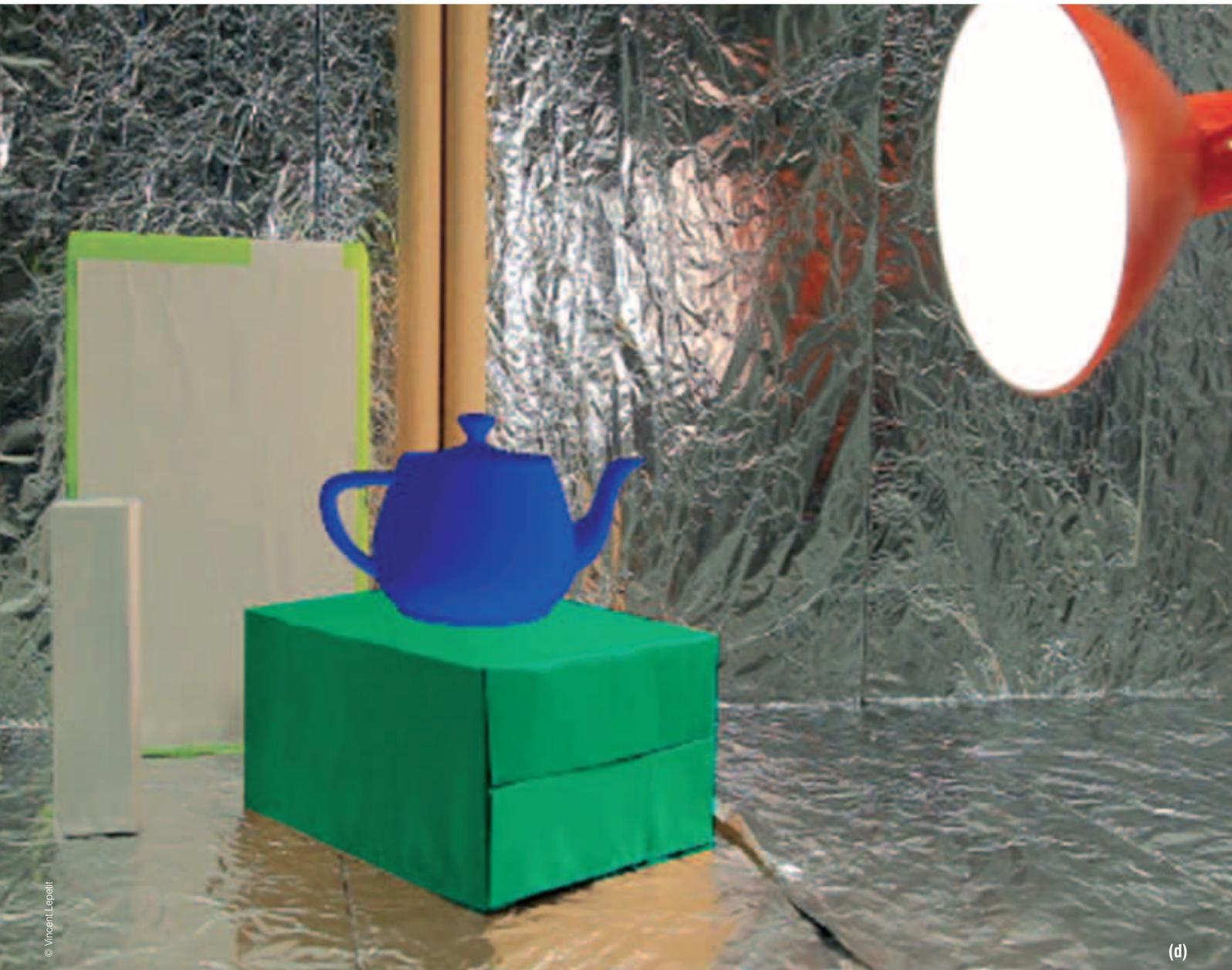
(a)



(b)



(c)

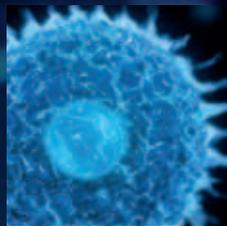


(d)

TU research

ISSN 2074-9643

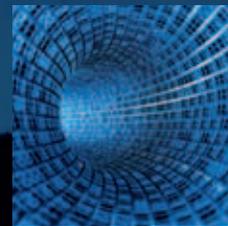
© Verlag der Technischen Universität Graz 2014, www.ub.tugraz.at/Verlag



Advanced
Materials Science



Human &
Biotechnology



Information,
Communication &
Computing

FOE

Fields of
Expertise

Mobility & Production



Sustainable Systems



Bilder: © istockphoto.com

Fünf zukunftsträchtige Bereiche in Forschung und Lehre bilden den unverwechselbaren Fingerabdruck der TU Graz auf dem Weg zur Exzellenz. Diese 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 the future in research and teaching go to form the unmistakable fingerprint of Graz University of Technology on its path to excellence. These 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. Co-operations with scientific partner institutes represent a further dynamo to success.

WISSEN ■ TECHNIK ■ LEIDENSCHAFT



TU GRZ research

