



INSTITUT
FÜR CHEMIE UND BIOLOGIE
DES MEERES ICB

Ein Hauch von Chaos

Computersimulationen als Forschungsinstrument – oder: Wenn kleine Ereignisse große Wirkungen nach sich ziehen

Schritttempo war gestern. Heute reisen nicht nur Menschen in rasantem Tempo durch die Welt, sondern auch Pflanzen, Tiere und Krankheitserreger. Selbst die Einzelteile der meisten Konsumgüter sind Tausende Kilometer unterwegs, bis sie zu einem Ganzen gefügt werden. Wie der Dschungel der modernen Mobilität und seine Folgen berechenbar gemacht werden können, zeigen drei Projekte, die die Stiftung in ihrer Initiative „Neue konzeptionelle Ansätze zur Modellierung und Simulation komplexer Systeme“ unterstützt.

Nicht selten sieht Dirk Brockmann die Welt wie unter einem dichten, bunten Spinnennetz gefangen. Mit einem Mausklick kann der Physiker und Professor für komplexe Systeme an der Northwestern University in Evanston auf einer Weltkarte alle Flugverbindungen als farbige Linien darstellen. Rund 40.000 Verbindungen sind es weltweit. „Auf diesen Wegen sind jedes Jahr rund drei Milliarden Menschen unterwegs. Das entspricht fast der Hälfte der Weltbevölkerung“, sagt er. Und stets seien auch Viren und Bakterien an Bord und reisten im Körper der Passagiere mit. Viele der Krankheitserreger sind harmlos, doch einige können gefährliche Epidemien auslösen. Brockmann ist ein Experte auf diesem Gebiet. Er sorgte vor gut fünf Jahren weltweit für Aufsehen, als er – gemeinsam mit seinem Kollegen Lars Hufnagel und damals noch am Göttinger Max-Planck-Institut für Dynamik und Selbstorganisation – mithilfe ausgetüftelter Computersimulationen die Wege des Erregers der Lungenkrankheit SARS (*Severe Acute Respiratory Syndrome*) analysierte und die großen Flughäfen als Dreh- und Angelpunkte für die Ausbreitung der Krankheit ausmachen konnte.

In wenigen Tagen um die Welt: Krankheiten im Globalisierungsfieber

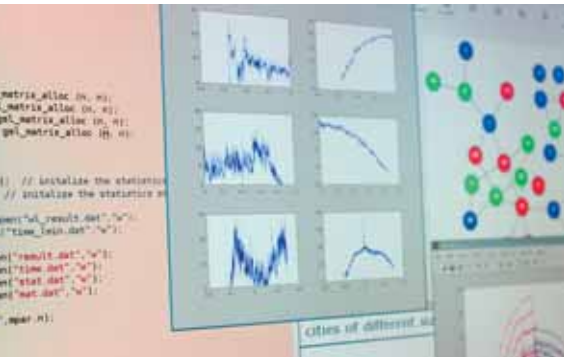
Im Rahmen eines von der VolkswagenStiftung mit rund 570.000 Euro geförderten Projekts untersucht er nun entsprechend den Bahn- und Autoverkehr. „Wir haben bereits mathematische Gemeinsamkeiten zwischen den Netzwerken entdeckt, aber es fehlt eine plausible Theorie dahinter; ein Modell, das die Mechanismen begreifbar macht“, umreißt er die Herausforderung.

In den nächsten zwei Jahren will Brockmann vor allem solche Dynamiken in seine Simulationen einbeziehen, die zwangsläufig entstehen, wenn Men-



Dirk Brockmann mit seiner Arbeitsgruppe auf dem Campus in Evanston, USA (von links): Daniel Grady, M. S., die Diplomphysiker Rafael Brune und Christian Thiemann, Professor Dr. Dirk Brockmann, Diplomphysiker Vincent David, Alejandro Morales Gallardo, M. Sc., und Olivia Woolley, M. S.

Von Oldenburg aus beobachtet Professor Dr. Bernd Blasius (großes Bild, links), wie sich fremde Arten in neuen Lebensräumen ansiedeln: Im Zentrum seiner Forschungen stehen derzeit Meeresbewohner, die sich entlang von Schifffahrtsrouten ausbreiten.



Professor Dr. Bernd Blasius und seine Kollegen Dr. Alexey Ryabov (Mitte) und Dr. Pablo Kaluza (links) wollen den Bioinvasoren unter Einsatz der Mathematik auf die Spur kommen: Ausbreitungswege und Verbreitungschancen werden rechnerisch modelliert, um möglichst früh eine negative Entwicklung vorhersagen, wenn nicht gar verhindern zu können.

schen von einer gefährlichen ansteckenden Krankheit erfahren. Dabei gilt es gleich mehrere, zum Teil gegenläufige Faktoren zu erschließen. „Wenn viele Menschen zum Beispiel in Panik ihren Wohnort verlassen, um vor einem Erreger wegzulaufen, können sie eine Ausbreitung der Krankheit beschleunigen“, erklärt der Forscher. Sie könnten den Virus in sich tragen, ohne es zu wissen, denn die meisten Krankheiten verlaufen in der ersten Zeit ohne Symptome. Andere Reaktionen der Menschen – etwa einen Mundschutz zu tragen – sind dagegen häufig gut geeignet, um den Krankheitserregern Einhalt zu gebieten. Um diese Einflussgrößen möglichst realistisch bewerten zu können, arbeiten die Wissenschaftler mit Medizinern und Epidemiologen zusammen.

Nicht minder komplex stellt sich der andere Teil dieses Kooperationsvorhabens dar. Am Institut für Chemie und Biologie des Meeres der Universität Oldenburg beschäftigt sich Professor Bernd Blasius mit der Einwanderung fremder Arten. „Bioinvasion ist wegen der zunehmenden Globalisierung längst zu einem heißen Forschungsthema geworden“, sagt der Physiker, der vor seiner Zeit in Niedersachsen eine ebenfalls von der Stiftung geförderte Nachwuchsforschergruppe an der Universität Potsdam leitete. Zwar seien längst nicht alle „Fremdlinge“ wirklich schädlich, doch manche Organismen könnten Seuchen verbreiten, bestehende Ökosysteme komplett verändern und auch direkt massiven Sachschaden anrichten. Zwei Beispiele: Jedes Jahr müssen in Deutschland über 40 Millionen Euro ausgegeben werden, um beispielsweise an Flussufern und Dämmen Schäden zu reparieren, die von aus Nordamerika stammenden Bismarratten verursacht werden, oder um stark wuchernde eingewanderte Pflanzen wie den natürlicherweise im Kaukasus beheimateten Riesen-Bärenklau in Schach zu halten. In der internationalen Datenbank der „Global Invasive Species“ findet man die Top 100 der schädlichsten bioinvasiven Arten: eine Liste, die laufend aktualisiert werden muss.

Die meisten Arten gelangen unabsichtlich in fremde Gefilde und werden erst gesichtet, wenn sie sich dort schon kräftig vermehrt haben. „Oft weiß man gar nicht, auf welchen Wegen die Pflanzen oder Tiere gekommen sind“, erzählt Blasius. Selbst über die Verbreitungswege der Vogelgrippe seien die Experten noch uneins. Deshalb wollen die Forscher die zugrunde liegenden Transportnetzwerke und Überlebenswahrscheinlichkeiten für verschiedene bioinvasive Arten mit mathematischen Methoden simulieren. Entscheidend sei dabei, die Knoten – also die für eine Ausbreitung relevanten Gebiete – zu finden, meint der Physiker und betont: „Sie zeigen uns, wo man eingreifen muss, um eine Einwanderung mit möglichst geringem Aufwand zu verhindern.“

Zurzeit haben die Oldenburger vor allem die Schifffereihäfen im Visier und durchforsten dazu riesige Datenbanken. „Sie enthalten sämtliche Informationen darüber, wann welches Schiff welchen Hafen angelaufen hat, auf welcher Strecke es unterwegs war und ob es sich zum Beispiel um einen Öltanker oder ein Containerschiff handelt“, sagt Blasius. Dabei sei nicht nur die Schiffs-

ladung ein potenzieller Hort für Organismen aus der Fremde, sondern auch das Ballastwasser: Meerwasser, das hin und wieder in die stählernen Schiffsbüchse gefüllt werden muss, damit die Ozeanriesen auch bei ungleichmäßiger Beladung noch stabil im Wasser liegen. Mit Ballastwasser sind beispielsweise Algen aus dem Pazifik in norwegische Gewässer gelangt und haben dort tonnenweise Lachsbestände vergiftet.

Ob eine Art es tatsächlich schafft, sich in fremden Gewässern zu vermehren, hänge von vielen Faktoren ab, berichtet Blasius. „Wir berücksichtigen zum Beispiel den Salzgehalt und die Temperaturen des Hafenwassers, um die Überlebenswahrscheinlichkeit einzuschätzen.“ In einem nächsten Schritt wollen die Forscher auch Daten zu Fressfeinden und Konkurrenzorganismen in ihre Modelle einfließen lassen. Dazu arbeiten sie eng mit Biologen zusammen.

Gemeinsam mit seinem Fachkollegen in Evanston will Blasius auch herausfinden, ob Bioinvasion nach ähnlichen Prinzipien verläuft wie die Ausbreitung von Krankheiten. Die Wissenschaftler erhoffen sich von diesem Vergleich ein besseres Verständnis der zugrunde liegenden Prozesse. Dabei könnten sie künftig sogar von den Ergebnissen eines zweiten Projektes der gleichen Förderinitiative profitieren. Ein deutsch-schweizerisches Wissenschaftlerteam um Professor Dr. Kai Nagel von der Technischen Universität Berlin und Professor Dr.-Ing. Kay Axhausen von der Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich untersucht – von der VolkswagenStiftung mit rund 500.000 Euro gefördert – soziale Netzwerke. Ihr Ziel ist es, der Freizeit-Mobilität moderner Menschen auf die Spur zu kommen.



Interessante und reizvolle Neulinge in/aus der Nordsee: Doch solche „Invasoren“ wie Pazifische Auster, Amerikanische Schwertmuschel und Amerikanische Pantoffelschnecke können langfristig andere Arten verdrängen und das „eingespielte“ heimische Ökosystem komplett verändern.

Menschliche Beziehungen, Kommunikation und Verkehr

„Der Freizeitverkehr macht schon heute gut ein Drittel des gesamten Verkehrs aus, Tendenz steigend“, umreißt Nagel die Situation. Doch während der Pendlerverkehr bereits recht gut berechenbar sei, stecke die wissenschaftliche Beschreibung des Freizeitverkehrs noch in den Kinderschuhen. Die aktuell verfügbaren Modelle, die entsprechende Analysen ermöglichen sollen, sind nach Nagels Auffassung zu einfach gestrickt. Sie gehen beispielsweise davon aus, dass ein Ausflug mit dem Auto umso wahrscheinlicher ist, je dichter das Angebot an Kinos, Theatern oder Cafés ist – und je näher diese dem Wohnort sind. „Doch gerade der Verkehr über längere Distanzen wird immer mehr zunehmen, da die Leute öfter umziehen und ihre alten Kontakte zumindest über einen gewissen Zeitraum halten“, ist sich der Physiker sicher. Auch länderübergreifende Freundschaften nähmen vermutlich zu. Im Grunde müsse man mit Freundschaftsnetzwerken rechnen, die den gesamten Globus umspannen können.

Um solche Faktoren zu erfassen, hat das Schweizer Team um den Verkehrsplaner Axhausen eine besonders umfassende Befragung zu sozialen Netzwerken entwickelt. Per Zufallsstichprobe wählen sie in der Schweiz – in ländlichen Gebieten wie in Städten – Probanden aus. Diese sollen in einem persönlichen, etwa anderthalbstündigen Gespräch Fragen zu ihrer Biografie und ihrem Freundeskreis beantworten. Die Forscher interessiert zum Beispiel, wo die Freunde wohnen, wie eng der Kontakt ist und was man mit ihnen beredet. Ob man sich häufig persönlich trifft, lieber telefoniert oder über E-Mails kommuniziert. Und nicht zuletzt sollen die Probanden die Adressen ihrer Freunde nennen. „Das ist ganz wichtig, denn wir wollen auch diese zu den gleichen Punkten befragen, um potenzielle Querverbindungen aufzudecken“, erklärt Axhausen die Strategie. Diese Art der „Schneeballbefragung“ sei auch wegen ihres Umfangs zurzeit weltweit wohl einzigartig. Bisher

Fellowships für junge Forscherinnen und Forscher

Im Rahmen ihrer Förderinitiative „Neue konzeptionelle Ansätze zur Modellierung und Simulation komplexer Systeme“ hält die VolkswagenStiftung seit dem Jahr 2007 ein neues ergänzendes Förderangebot bereit für junge Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler, die sich mit der theoretischen Beschreibung, Modellbildung und Computersimulation komplexer Systeme befassen und die bereits herausragende Leistungen auf diesem

Gebiet nachweisen können. Die Fellowships „Computational Sciences“ ermöglichen solchen Nachwuchskräften die Realisierung selbst initiierten Forschungsprojekte an einem Institut ihrer Wahl. In erster Linie sind Postdoktoranden und Postdoktorandinnen kurz nach der Promotion angesprochen. Die aktuellen Stichtage zur Antragstellung sind auf der Website der VolkswagenStiftung zu finden.

beschränken sich die Untersuchungen zu sozialen Netzwerken in der Regel auf ein eng begrenztes Umfeld, zum Beispiel auf eine Firma oder eine Schule.

Im Frühjahr 2009 sollen die neuen Daten von insgesamt 500 Befragten vorliegen und anschließend von dem Forscherteam um den Berliner Kai Nagel ausgewertet werden. „Unser Ziel ist vor allem eine mikroskopische Simulation des Autoverkehrs“, betont Nagel. „Wir wollen wissen, wann ein Auto zu welcher Zeit an welchem Ort ist.“ Aus Sicht des Physikers wäre es dabei ideal, wenn sich bei der Datenanalyse bestimmte Bewegungsmuster ergäben, entlang derer sich letztlich mehrere Autos – und damit die Fahrer beziehungsweise Mitfahrer – „zusammenfassen“ ließen. Alles in allem sollen die Untersuchungen eine Prognose über den Verkehr der Zukunft ermöglichen; Wissenschaftler könnten darauf aufbauend wirksame Steuerungsinstrumente für die Verkehrs-, Städte- und Raumplanung entwickeln. Gleichermäßen wünschenswert ist für die beteiligten Forscher, dass die Erkenntnisse über soziale Netzwerke helfen, die heute noch häufig schwer vorhersagbare Verbreitung mancher Krankheiten oder Computerviren besser zu verstehen – bis hin zur Ausbreitung von Gerüchten.

Logistik auf den Punkt gebracht

Wer nun glaubt, nur Lebendiges sei schwer berechenbar, der irrt. Denn auch im Reich der Waren weht ein Hauch von Chaos. Das weiß kaum einer besser als Professor Bernd Scholz-Reiter von der Universität Bremen, der das dritte hier vorgestellte und mit rund 455.000 Euro von der Stiftung geförderte Kooperationsvorhaben koordiniert. „Hinter fast allen Produkten stecken heute komplexe und dynamische Netzwerke aus Kunden, Produktionsstätten, Lieferanten und Transportwegen, die zudem noch in gegenseitige Abhängigkeiten verstrickt sein können“, beschreibt er die aktuelle Situation. Wenn es da irgendwo Engpässe gebe, könne das zu langen Reaktionszeiten führen. Solche Engpässe entstünden zum Beispiel durch ein Erdbeben oder – ganz anders gelagert – einen Stromausfall an der Produktionsstätte eines Einzelteils. „Mitunter sind die Ursachen für Lieferprobleme aber überhaupt nicht mehr nachvollziehbar“, sagt der Logistikexperte.

Die Forscher wollen nun am Beispiel eines Pumpenherstellers Licht in den Logistikdschungel bringen. Aus Kunden- und Lieferantenstandorten, Produktions- sowie Lagerstätten haben sie dazu ein mathematisches Netzwerk mit mehreren tausend Knoten gestrickt. „Damit die Dinge überhaupt in vertretbaren Rechenzeiten simuliert werden können, berücksichtigen wir nur die Knotenpunkte, die für die Stabilität des Netzwerkes relevant sind“, erläutert Scholz-Reiter den nächsten Schritt. Die erforderlichen mathematischen Werkzeuge entwickeln Fabian Wirth, der jüngst als Mathematikprofessor an die Universität Würzburg berufen wurde, und der promovierte Mathematiker Sergej Dashkovskiy von der Universität Bremen.



Mit dem Auto oder besser mit dem Rad zum Kino? In einem Kooperationsvorhaben der Technischen Universität Berlin und der ETH Zürich zu sozialen Netzwerken erkunden Diplomingenieur Andreas Frei, Diplomsozialwissenschaftler Matthias Kowald und Bauingenieur Jeremy Hackney (Bild oben, von links) die Strukturen der Freizeit-Mobilität. Ergebnisse aus dem *Social-Network*-Projekt der beiden Universitäten werden auch für MATSim genutzt, ein *OpenSource*-Softwareprojekt für Verkehrsplanung. Zu einem Erfahrungsaustausch dieser Projektgruppe trafen sich (Bild unten, von links): Francesco Ciari, Professor Dr. Kai Nagel, David Charypar, Dr. Michael Balmer, Andreas Horni, Dr. Fabrice Marchal, Jeremy Hackney, Gregor Lämmel, Dominik Grether, David Strippgen, Professor Dr.-Ing. Kay W. Axhausen, Marcel Rieser und Konrad Meister.

Mithilfe der mathematischen Analysen und Simulationen wollen die Forscher anschließend herausfinden, welche Netzwerkstrukturen besonders störanfällig sind. Außerdem möchten sie wissen, welche Effekte durch die Dynamik der Kundennachfrage bestimmt werden. Lieferschwierigkeiten kann es schließlich auch dann geben, wenn die Nachfrage nach einem Produkt plötzlich und unerwartet steigt. Gründe dafür können eine gelungene Werbekampagne oder politische Entscheidungen sein, wenn zum Beispiel eine anstehende Erhöhung der Mehrwertsteuer die Bürger zu Hamsterkäufen animiert.

Die aktuellen Planungs- und Steuerungssysteme der Unternehmen berücksichtigen solche dynamische Entwicklungen nicht. Sie basieren ausschließlich auf linearen und statischen Annahmen. So sind jene schnell machtlos, wenn es Probleme gibt, weil etwa in einem Logistiknetzwerk Lieferanten oder Kunden ausscheiden oder neu hinzukommen. „Wir hingegen werden am Beispiel des Pumpenherstellers voraussichtlich viele solcher Strukturveränderungen des Netzwerks sowie die Folgen über einen längeren Zeitraum beobachten und können sie dann in unsere Modelle einfließen lassen“, betont Scholz-Reiter.

Selbst chaotische Tendenzen, die solchen Netzwerken immer anhaften, schrecken den Ingenieur nicht. Zwar könnten kleine Ereignisse große Wirkungen nach sich ziehen, eine ungünstige Wetterlage in Übersee etwa einen kapitalen wirtschaftlichen Schaden eines hiesigen Unternehmens auslösen. Doch Scholz-Reiter ist zuversichtlich: „Letztlich werden wir das Chaos bändigen.“ Und damit stimmt er mit seinen Forscherkollegen aus den anderen Projekten nahtlos überein.

Andrea Hoferichter

Professor Dr.-Ing. Bernd Scholz-Reiter (linkes Bild, vorn Mitte) und sein Team an der Universität Bremen entwickeln anspruchsvolle theoretische Methoden zur Optimierung von Netzwerklösungen in der Logistik. Thomas Jagalski M. Sc. (Bild rechts) arbeitet mit daran, dass Kunden, Zulieferer und Produktionszentren logistisch so vernetzt sind, dass die komplexen Prozesse reibungslos verlaufen – und das weltweit.



Ausgezeichnete Entwicklung: Peptidchips aus dem Drucker

Ein Laserdrucker, der im Schnellverfahren und auf den Punkt genau Peptide drucken kann – das gab es bislang nirgends. Das neue Verfahren, das die Herstellung von Peptidarrays um einiges schneller und effizienter macht, wurde gemeinsam von Wissenschaftlern des Deutschen Krebsforschungszentrums (DKFZ) in Heidelberg und des Fraunhofer-Instituts für Produktionstechnik und Automatisierung (IPA) in Stuttgart entwickelt. Der Stifterverband für die Deutsche Wissenschaft erkannte das Potenzial des neuen Verfahrens und zeichnete die beiden Forscherteams – die Federführung im

DKFZ lag bei Dr. Frank Breitling, Dr. Volker Stadler und Dr. F. Ralf Bischoff, im IPA bei Dr. Stefan Güttler – mit dem mit 50.000 Euro dotierten Wissenschaftspreis aus. Das erfolgreiche Vorhaben

wurde von der VolkswagenStiftung in ihrer Förderinitiative „Komplexe Materialien“ unterstützt.

Peptidarrays sind ein wertvolles Werkzeug in der Medizin: Mit ihrer Hilfe werden Krankheitserreger erkannt und Arzneimittel erforscht. Hat man beispielsweise alle Proteine eines Bakteriums auf einem Biochip zur Verfügung, kann man mit einem Tropfen Blut feststellen, ob dieser Erreger Auslöser einer bestimmten Krankheit ist. Eine Reaktion mit vorhandenen Antikörpern kann sogar Informationen liefern über Art und Schwere der Erkrankung. Zur Herstellung der Peptidarrays wurden bisher die einzelnen Aminosäuren mit einem Pipettier-Roboter auf eine papierartige Membran aufgetupft.

Maximal 10.000 Peptide – Bruchstücke von Proteinen mit bis zu fünfzig Aminosäuren – bekam man auf diese Weise auf die Chips. Zu wenig beispielsweise für den Malaria-Erreger, der Biochips mit 500.000 Peptiden benötigt.

Mit dem neuen Druckverfahren ist das nun kein Problem mehr. Der Drucker enthält für jede der zwanzig Aminosäuren, die unsere Peptide ausmachen, einen eigenen Toner. Damit dieser Biotoner wie ein normaler Toner funktioniert, bedurfte es einiger ausgeklügelter Ideen. Nun sind die Amino-

säuren im Toner zunächst trocken und in Kügelchen verpackt. Nachdem sie der Drucker auf die Glasplatte aufgebracht hat, wird die Platte erhitzt, die Kugeln schmelzen, und die

Aminosäuren koppeln an den Träger. Schicht für Schicht wird auf diese Weise exakt gedruckt und verkettet. Die fertigen Peptidarrays sind mit über 155.000 Punkten auf einem Träger von 20 mal 20 Zentimetern nicht nur viel komplexer, sie lassen sich auch schneller produzieren. Damit verbunden ist eine enorme Preissenkung: Kostete ein Peptidspot im alten Verfahren rund fünf Euro, kann man ihn nun voraussichtlich für wenige Cent anbieten. Ganz neue Anwendungen rücken damit in den Bereich des Möglichen. Denkbar wäre beispielsweise die Entwicklung eines „Tropenchips“, auf dem alle gängigen tropischen Krankheitserreger in Form von Markerpeptiden vertreten sind.

Karola Neubert

