

Inhalt

Editorial	2
Iterationsschleife	5
FAIRmat: Offene und transparente Datenpraktiken für die Materialwissenschaften	6
Ideen für den Verkehr der Zukunft	12
KONWIHR: Apply now!	18
Notiz*Notiz*Notiz	19

Quartl* - Impressum

Herausgeber:

Prof. Dr. A. Bode, Prof. Dr. H.-J. Bungartz, Prof. Dr. U. Rüde

Redaktion:

S. Herrmann, S. Reiz, Dr. S. Zimmer

Technische Universität München

School of Computation, Information and Technology

Boltzmannstr. 3, 85748 Garching b. München

Tel./Fax: ++49-89-289 18611/18607

e-mail: hermasa@in.tum.de,

<https://www.cs.cit.tum.de/sccs/startseite/>

Redaktionsschluss für die nächste Ausgabe: **01.12.2023**

* Quartl: früheres bayerisches Flüssigkeitsmaß,

→ das Quart: 1/4 Kanne = 0.27 l

(Brockhaus Enzyklopädie 1972)



Das Quartl erhalten Sie online unter <https://www.cs.cit.tum.de/sccs/weiterfuehrende-informationen/quartl/>

Das Quartl ist das offizielle Mitteilungsblatt des Kompetenznetzwerks für *Technisch-Wissenschaftliches Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Bayern* (KONWIHR) und der *Bavarian Graduate School of Computational Engineering* (BGCE)

Editorial

Im Editorial des Quartls waren wir ja schon öfter in jenem sympathischen, aber leider fiktiven Ort Schilda zu Gast. Und auch das heutige Thema führt uns in diese Stadt mit ihren nicht minder sympathischen Bürgern. Wir wollen uns nämlich mit Empfängern und Empfängerinnen (Empfangenden?) von Stipendien befassen, die zusätzlich im Rahmen eines Teilzeit-Arbeitsvertrags an der Uni beschäftigt werden sollen. Eigentlich eine Standardsituation, da bekanntermaßen Stipendien ja in aller Regel deutlich weniger Geld als etwa ein E13-Vertrag bedeuten, weshalb ein zusätzlicher Arbeitsvertrag oft zum Lebensunterhalt benötigt wird. Stipendien in Schilda? Aber sicher doch!

Seit einiger Zeit haben wir an der TUM folgende Situation: Das hier und andernorts den Ton angehende Wissenschaftszeitvertragsgesetz (eine herrlich deutsche Wortkonstruktion), kurz *WissZeitVG*, welches vor inzwischen schon geraumer Zeit Kettenverträgen und prekären Beschäftigungsverhältnissen im Wissenschaftskontext den Kampf angesagt hat (und dabei an verschiedenen Stellen weit über das Ziel hinaus schoss), schließt Teilzeitverträge unter 25% aus: Schließlich möchte man kein Wissenschaftsprekariat. Das Argument ist grundsätzlich nicht von der Hand zu weisen, liest man doch immer wieder von gruseligen Ausbeutungskonstrukten, typischerweise jedoch außerhalb der MINT-Fächer. Allerdings wird das Zuverdienst-Szenario (also eben Stipendium plus ein kleiner Vertrag) hier leider ignoriert.

Was bedeuten die 25% an konkreter Arbeitszeit für TV-L-Bedienstete? Nun, das ist natürlich – unserem Förderalismus sei Dank – Ländersache. Im Norden Deutschlands, wo (zumindest nach bayerischem Selbstverständnis) bekanntlich der gemeine Faulpelz heimisch ist, der nur durch die üppigen Care-Pakete des Länderfinanzausgleichs überhaupt überlebensfähig ist, beträgt die TV-L-Arbeitszeit z.B. 39:00 Stunden (Hamburg) oder gar nur 38:42 Stunden (Schleswig-Holstein). In Bayern, dem Paradies auf Erden mit einer ungläublich fleißigen Belegschaft im öffentlichen Dienst, arbeitet man dagegen 40:06

Termine 2023

- **Upcoming SIAM Conferences & Deadline**
<https://www.siam.org/conferences/calendar>
- **Supercomputing 2023:**
The International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC23) – SC 23 in Denver, CO, USA: 12.11.-17.11.2023 <https://sc23.supercomputing.org/>
- **KONWIHR Workshop**
October 11, 2023 (online) <https://www.konwihhr.de/>

Apply now!



Do you want to optimize your code, but you need some help (and funding)? The competence network for scientific high-performance computing in Bavaria accepts applications for scientific HPC projects (up to 50 000 €), as well as for “basis” projects to establish contact points. **Tip:** Increase the success of your proposal and your project by contacting your local computing center before applying, to discover optimization potential in your code.

The main objective of KONWIHR is to provide technical support for the use of high-performance computers and to expand their deployment potential through research and development projects. Close cooperation between disciplines, users, and participating computer centers as well as efficient transfer and fast application of the results are important. Find already funded projects at

<https://www.konwihhr.de/konwihhr-projects/>

Read more on konwihhr.de and join the [konwihhr-announcements](mailto:konwihhr-announcements@konwihhr.de) mailing list.

Contact KONWIHR

For any KONWIHR inquiries, you only need one address:

info@konwihhr.de

Your email will be read carefully and answered by Katrin Nusser or Gerasimos Chourdakis, KONWIHR’s current contact people in the Bavarian North and South. Together with Prof. Gerhard Wellein and Prof. Hans-Joachim Bungartz (who you can also reach using the same address), we collect and process your proposals two times per year (1st of March and 1st of September). Learn more about how you can apply for funding at:

<https://www.konwihhr.de/how-to-apply/>

Gerasimos Chourdakis

Stunden pro Woche, also 40 Stunden und 6 Minuten. 25% entsprechen der vollen Arbeitszeit somit 10 Stunden und 90 Sekunden. Halten wir dieses nicht unwichtige Detail für einen Moment fest.

Denn neben dem *WissZeitVG* gibt es natürlich diverse andere Regelwerke mit Regelungen für Stipendien. Und an irgendeiner ebenfalls verbindlichen Stelle steht, dass Stipendiat:innen zwar mit einem TV-L-Vertrag etwas dazuverdienen dürfen, die wöchentliche Arbeitszeit jedoch bei 10 Stunden gedeckelt ist. Halten wir auch dieses nicht minder bedeutsame Detail fest.

Das Dilemma ist offensichtlich: Schließlich gibt es keine Wochenarbeitszeit, die zugleich maximal 10 Stunden und mindestens 10 Stunden und 90 Sekunden dauert. Dies steht allerdings in keiner Verordnung, es folgt schlicht den Gesetzen der Logik – die freilich im Rechtskontext weder verbindlich noch einklagbar sind. In der aktuell an der TUM gelebten Praxis (zumindest zu dem Zeitpunkt, als diese Zeilen entstanden) sind Zusatzverträge zu Stipendien somit unmöglich – wegen 90 Sekunden. Insofern ist die Praxis eigentlich nicht gelebt, sondern tot. Das ist völlig absurd und nimmt auch unter den bekannten Schildbürgerstreichen eine Top-Position ein. Eigentlich sollte das *WissZeitVG* ja Nachwuchswissenschaftler:innen vor Ausbeutung und Perspektivlosigkeit schützen – jetzt nimmt es ihnen die wichtige Möglichkeit des Zuverdienstes.

An einer Lösung werde gearbeitet, so die allgemeine Verlautbarung. Doch wie kann eine solche Lösung aussehen? Nun, man könnte z.B. bei der Novelle des *WissZeitVG* statt von 25% direkt von 10 Stunden reden. Das wäre einfach. Allerdings wird das die Förderalismus-Fanatiker erzürmen und nach Karlsruhe treiben: Warum soll einem Stipendiaten bzw. einer Stipendiatin in Schleswig-Holstein mehr als 25% eines Vollzeit-Arbeitsverhältnisses, in Bayern dagegen weniger als 25% davon erlaubt sein?

Umgekehrt könnte man bei den Stipendienregelungen einen Prozentsatz statt einer Stundenzahl anführen. Auch das ist von der Sache her einfach, aber auch das kann zu verfassungsrechtlichen Bedenken führen. Darf es sein,

dass man an der Waterkant nur weniger Zeit zwecks Zuverdienst arbeiten darf, wohingegen es in Bayern ein paar Minuten mehr sein dürfen? Äußerst komplex – da glühen die Roben!

Oder man könnte mit gesundem Menschenverstand an die Sache rangehen, also den Geist der Gesetze und Verordnungen pragmatisch auslegen, anstatt sich in Griffelspitzeereien zu ergehen. Das wiederum strapaziert das Berufsethos von Verwaltungsjuristen nicht unerheblich – wahrscheinlich sogar zurecht. Solange es nicht gelingt, Schilda in dieser Sache zu verlassen, hält der Zustand der Unvereinbarkeit von Stipendien und Beschäftigungsverhältnissen leider weiter an – mit all den bekanntesten negativen Folgen für die Betroffenen.

Doch damit genug für heute. Die gesamte Quartl-Redaktion wünscht Ihnen einen goldenen Herbst und einen erfolgreichen Start ins Wintersemester, mit hoffentlich wenig weiteren Schildbürger-Streichen! Zunächst aber wünschen wir Ihnen natürlich viel Vergnügen mit der neuesten Ausgabe Ihres Quartls!

Hans-Joachim Bungartz.

laufend wiederkehrende Muster, etwa Staus im Pendel- oder Ferienverkehr. KI kann diese wiederkehrenden Effekte aufzeigen“, berichtet Bogenberger. „Aber neuronale Netze mit den Ergebnissen aus unseren Zukunftsszenarien oder den Simulationsdaten von großen Flotten zu trainieren, macht noch keinen Sinn. Dafür brauchen wir ein paar empirische Experimente sowie Datenanreicherungen mehr, heute würde die KI Quatsch lernen.“ Verkehrs-technik geht eben vom künftigen Ideal aus, um Fragen der Gegenwart zu klären und zu lösen. Und das soll laut Bogenberger auch so sein: „Aufgabe der Wissenschaft ist es doch, frühzeitig Lösungen zu entwickeln und anzubieten, die Politik oder Gesellschaft annehmen oder ablehnen können.“



Abbildung 7: Prof. Klaus Bogenberger, Lehrstuhl Verkehrstechnik, TUM. Foto: A. Heddergott/TUM

Susanne Vieser

zentrum und Unterschleißheim immer wieder autonome Autos von BMW und automatisierte Busse von Ebusco unterwegs. Wie Kameras, Drohnen und Kontaktschleifen im Testfeld Straßen und Verkehr kontrollieren, wurde auf der Internationalen Autoausstellung IAA Mobility 2023 gezeigt. Ausgewählte Autos und Fahrer:innen empfangen während des Feldversuchs über 4G- und 5G-Netze Echtzeitdaten zu Staus und Unfällen, Ampeln regeln damit den Verkehrsfluss: „Ein solches Testfeld aus allen Straßenkategorien ist weltweit bisher einzigartig, es geht nicht nur um automatisierten Verkehr in der Stadt, die Vorbereitung der Infrastruktur und neue Transportkonzepte“, so Bogenberger. „Weiteres Ziel ist die Standardisierung der Datenflüsse.“ Informationen von smarten Ampeln, Kameras, aus Testfahrzeugen und aus Service-Apps fließen zusammen, sollen automatisiert harmonisiert und damit nutzbar werden. Dann könnten aus diesen Informationen digitale Zwillinge von Mobilitätsdiensten oder von Straßenzügen konstruiert werden, mit denen Leitstellen wiederum das Geschehen auf Schiene und Straße intelligenter managen könnten.

Frei verfügbare Daten gefragt

Noch ist das eine Zukunftsvision – für die sowohl simulierte Szenarien wie auch reale Experimente Grundlagen liefern: „Jeder Gerätehersteller, Mobilfunkanbieter oder Fahrzeughersteller speichert Bewegungsdaten weltweit. Das große Dilemma der Forschung ist, dass sie zu diesen Daten keinerlei Zugang haben“, klagt Bogenberger. Daher setzen sie am Lehrstuhl auf Kooperationen mit Unternehmen, kaufen Daten zu – oder erheben sie selbst. Maßnahmen wie das 9-Euro- oder 49-Euro-Ticket werfen nicht nur spezielle Forschungsfragen auf, sie bringen meist noch technische Möglichkeiten, um Daten zu erheben, mit denen die Zukunftsszenarien detaillierter, realistischer, besser werden. So sammeln die Verkehrstechniker:innen mit einer App seit 2022 laufend die Bewegungsdaten von mehr als 1000 Teilnehmenden, die gelegentlich noch zu Tickets und Fahrverhalten befragt werden. „Daraus leiten wir sehr viele Erkenntnisse zum Mobilitätsverhalten der Münchner ab“, sagt Bogenberger.

Natürlich werden diese und andere Datensätze längst auch mit den Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) ausgewertet. „Der Verkehr produziert

Iterationsschleife

N=48

19.09.2023 (Bay Area, USA, 23:30)

$$2+2=4^a$$

M. Resch

„Sich einer neuen beruflichen Herausforderung zu stellen klingt zunächst wie eine leere Formel. Der Leser fragt: was steckt dahinter? Man kann das natürlich als eine Floskel nehmen und als Baustein einer kommunikativen Situation. Solche Bausteine sind das Grundgerüst unseres Austausches. Sie sind etwas an dem sich unsere Kommunikation festhalten und orientieren kann. „Wie geht’s?“ „Danke gut, und Ihnen“. Nimmt man solche Bausteine wörtlich so entstehen neue Situationen. Sprecherin und Hörerin werden überrascht – etwa durch ein „Heute nicht so gut.“ Als Antwort auf das übliche „Wie geht’s?“ Shannon und Weaver konstatieren, dass genau dann Information vorliegt. In der Überraschung – so sagen die beiden – steckt das Neue, das Unvorhersehbare und damit die Information. Was also ist die „neue berufliche Herausforderung“? Im Kopf dessen der das liest entstehen Bilder. War die bisherige Aufgabe zu langweilig? War sie zu stressig? Hat das Arbeitsklima die Veränderung provoziert? Ein neuer Chef? Oder gibt es persönliche Gründe? Eine neue Beziehung? Ein familiäres Problem? Ist der Vater dement geworden? Muss er betreut werden? Oder gibt es einen Neuanfang? Möchte jemand etwas Neues ausprobieren, weil das alte Leben in den ewig gleichen Gleisen eingefahren ist? Eine ganze Geschichte beginnt sich zu entwickeln – nein eigentlich eine ganze Reihe von Geschichten. Man wünscht sich, dass nur die positiven und guten davon in die Vorauswahl der zukünftigen Realität aufgenommen werden. Eine neue berufliche Herausforderung? Und was ist mit der alten Herausforderung? Ist die abgearbeitet? Ist sie still im Alltag von der Herausforderung zur Langeweile mutiert? Hat der Alltag das Besondere der Herausforderung langsam erstickt? Manchmal laufen Kinder durchs Bild und fordern ihre Rechte ein. Manchmal zieht ein Flugzeug seine Bahn über den abendlichen Himmel und blitzt in der untergehenden Sonne auf. Manchmal verflöscht der Lärm des Alltags und in der Stille hört man seine eigenen Gedanken. Manchmal will man dem Leben seine Herausforderung hinwerfen wie einen Fehdehandschuh. Die Waffen darf das Leben als Herausgefordertes wählen. Manchmal wirft uns das Leben die Herausforderung hin und nach allen Regeln der Fairness müssten wir die Wahl der Waffen haben. Aber das Leben ist schlecht erzogen. Es wählt die Waffen immer selber – und man weiss erst nach der Herausforderung welche es waren. Wie Kierkegaard (dänischer Philosoph 1813 – 1855, Franz Kafka soll ihn begeistert gelesen haben) so schön bemerkt, könne man das Leben oft nur rückwärts verstehen, müsse es aber vorwärts leben. Spannend eigentlich. Aber eigentlich, ist es eben so: eine neue berufliche Herausforderung. Man muss nicht in alles etwas hineininterpretieren. Wir halten uns also an Wahrheiten fest und sagen: $2+2=4$. Langweilig? Ja. Aber wer hindert uns daran uns zu fragen, was jenseits von $2+2=4$ passiert?

FAIRmat: Offene und transparente Datenpraktiken für die Materialwissenschaften



Daten sind das Öl des 21. Jahrhunderts – so liest man es immer wieder. Die Metapher trägt meist einen kommerziellen Gedanken, lässt sich aber auch uminterpretieren. Daten müssen großflächig veredelt werden – analog wie Rohöl zu Benzin raffiniert wird – um das Potential der datengetriebenen Methoden voll ausschöpfen zu können. An dieser Stelle werden unter „veredelten Daten“ solche verstanden, welche die **FAIR** Kriterien erfüllen. Das Akronym ist hierbei doppeldeutig, das wohl bekanntere **F**indable, **A**ccessible, **I**nteroperable und **R**eusable (auch **R**epurposable) wird durch das **F**indable and **A**rtificial-Intelligence **R**eady ergänzt.

FAIRmat ist ein Konsortium welches gewissermaßen die digitalen mit den handfesten Rohstoffen verbindet. Bestehend aus mehreren nationalen Universitäten und Instituten, fördert FAIRmat jene Datenpraktiken in den Materialwissenschaften (“mat”) [1]. Gerade in diesem Bereich versprechen reproduzierbare Forschung in Verbindung mit KI-Methoden neue Möglichkeiten zur Entdeckung besser geeigneter oder sogar neuartiger Materialien. Eine gelebte FAIR-Datenkultur in der Forschung ist hierfür eine elementare Grundlage.

Seit 2021 wird FAIRmat durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) für einen Zeitraum von fünf Jahren gefördert. Das Konsortium befindet sich neben weiteren Initiativen - etwa zur Mathematik, Kulturgütern oder Medizin - unter dem Dach der Nationalen Forschungsdateninfrastruktur e. V. (NFDI) [2].

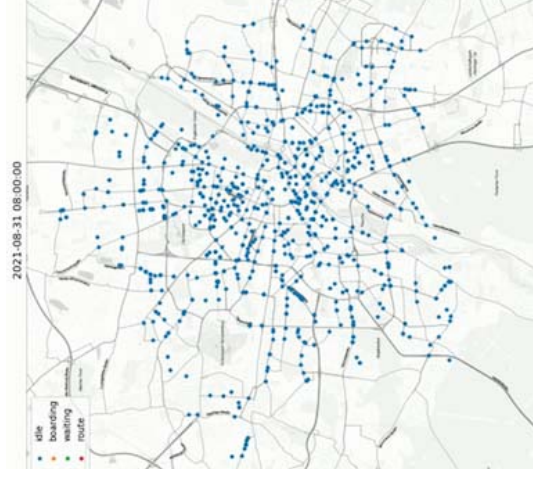


Abbildung 6: Mit der eigenen Open Source Software FleetPy wird die Nutzung von autonomen Shuttles in München simuliert. Grafik: TUM/Lehrstuhl Verkehrstechnik

Einzigartiges Testfeld im Norden Münchens

Neue Mobilitätsangebote wie etwa das Ridepooling, sind Inhalt der Projekte Minga (Münchens automatisierter Nahverkehr mit Ridepooling, Solobus und Bus-Platoons) und TEMPUS sowie des MCube-Clusters für die Zukunft der Mobilität in München, an denen unter anderem die MVG sowie die Stadtwerke München, außerdem auch Unternehmen beteiligt sind und die jeweils vom Bundesministerium für Digitales und Verkehr (BMDV) gefördert werden. Getestet werden dabei auch Busse, die autonom fahren oder automatisiert einem von Menschenhand gesteuerten folgen. Für TEMPUS, das Testfeld für automatisierte und vernetzte Mobilität in München und Umgebung, sind im Norden Münchens zwischen den Autobahnen 9 und 99 sowie dem Olympia-

lationen zeigten auf, wie so ein Service mit mehreren tausend Fahrzeugen organisiert werden kann, welche Strecken in München stark frequentiert sind, wann die Shuttles Strom tanken sollten: „Wir rechnen sehr große Szenarien, mit vier oder sechs Personen pro Fahrzeug, mit Flotten von 3000, 5000 und mehr Autos, wenn 10, 20 oder gar 30 Prozent der Bevölkerung mitmachen“, so Bogenberger. Eine Erkenntnis: „Um genutzt zu werden, muss Ridepooling in hoher Qualität und rund um die Uhr angeboten werden, das aber ist ein komplexes Optimierungsproblem, das in Echtzeit gelöst werden muss, weil Kund:innen sofort einen Transport haben wollen.“ Noch eine Lehre: Sollen selbstfahrende und gesteuerte Fahrzeuge einmal neben einander auf einer Straße rollen, müsste der Verkehr durch ein Tempolimit von 30 Stundenkilometern beruhigt werden. Andernfalls wären die autonomen Shuttles überfordert. Inzwischen werden diese Ergebnisse noch durch Umfragen oder Tests abgesichert: „Wir unterstellen, dass jede:r auf Ridepooling rational reagiert“, begründet Bogenberger den Realitätscheck. „Aber was, wenn das Vertrauen in ein Auto ohne Fahrer:in fehlt?“



Abbildung 5: EDGAR ist ein autonom fahrendes Shuttle und Forschungsprojekt, für das der Lehrstuhl Fahrzeugtechnik einen Kleinbus umgebaut hat.
Foto: A. Heddergott/TUM.

Als Status-Quo und gleichzeitige Notwendigkeit solcher FAIR-Initiativen, muss erst mal festgestellt werden, dass viele – wenn nicht die meisten – Daten nur innerhalb von Forschungsgruppen verfügbar sind. Erst mit den richtigen Kontakten oder etwas Glück bei einer netten Emailanfrage werden diese geteilt. Und selbst bei verfügbaren Daten sind die weiteren Eigenschaften wie “interoperable” und “reusable” durch unterschiedlichste und proprietäre Dateiformate gefährdet, ebenso wie eine unzureichende Spezifikation wie die Daten zustande gekommen sind. Die Gründe warum Daten in der Tendenz unter Verschluss gehalten und nicht optimal aufbereitet sind, sind mannigfaltig und werden hier nicht weiter erörtert. Die Konsequenz daraus ist jedoch, dass reproduzierbare und datengetriebene Forschung gehemmt bis unmöglich ist. Vor diesem Hintergrund wirbt FAIRmat mittels positiver Beispiele für die Vorteile eines FAIR-Datenmanagements, um so die Hindernisse im gelebten Forschungsalltag abzubauen.

Grundsätzlich ist das Problem auch an anderen Stellen erkannt. So verlangen einige Journale eine gleichzeitige Veröffentlichung der Daten oder Geldgeber fordern eine Klärung wie mit den Forschungsdaten umgegangen wird (siehe etwa Checkliste der DFG [3]). Allerdings führen solche publikations- und projektbezogenen Anforderungen schnell zu Insellösungen, in welchen die Daten weder interoperabel noch einheitlich auffindbar sind. Weitere wichtige Fragen von optimalen Datenpraktiken bleiben unberührt: Wie lässt sich eine langfristige Verfügbarkeit sicherstellen? Wie werden Daten mit fachspezifischen Vokabular und Kontext auffindbar, beispielsweise durch Materialeigenschaften (siehe Fig. 1)? Wie können Experimentaldaten mit unterschiedlichem Equipment oder Methodik verglichen werden? Und wie lässt sich ein effizienter Datenaustausch sowie wissenschaftliche Zusammenarbeit sicherstellen?

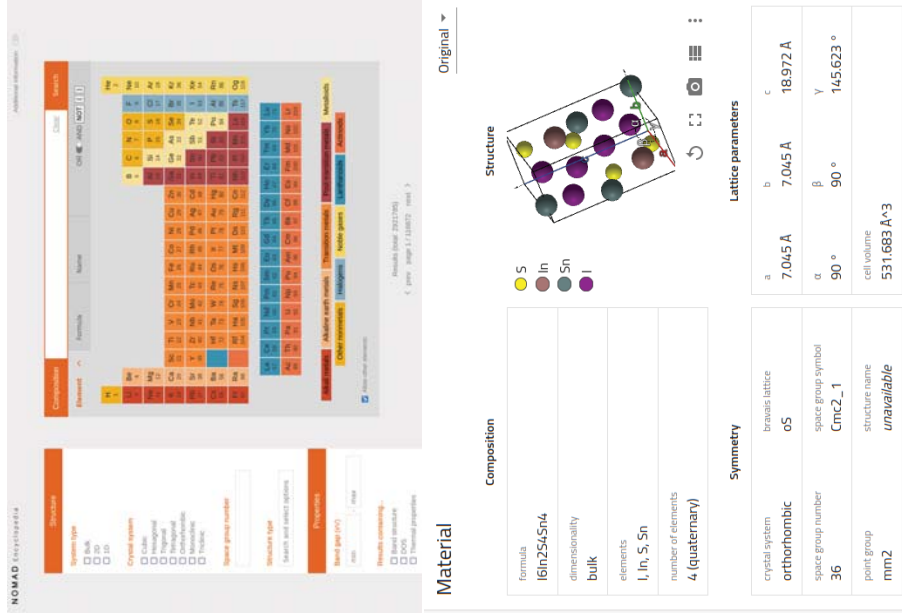


Abbildung 1: Fig. 1: Beispiel einer fachspezifischen Suche bzw. Darstellung für die Materialwissenschaften (Quelle: [4])

Um eine FAIR-Datenkultur zu etablieren braucht es daher weit mehr als große Überzeugungsarbeit oder externen Druck. Das Datenmanagement muss gesamtheitlich über die jeweilige Disziplin ausgestaltet werden. Im besten

Mit Zukunftsszenarien die Gegenwart verbessern

Mit Hilfe der Supercomputer des Leibniz-Rechenzentrums (LRZ) bereiten Bogenberger und sein Team diese Zukunft vor: Sie simulieren Szenarien, etwa mit Robo-Shuttles in München, auch wie sich Fußgänger:innen, Radler:innen und autonome Fahrzeuge auf der Straße begegnen, zudem wie potenzielle Passagiere selbstfahrende Shuttles annehmen und nutzen könnten. Ebenfalls spannend für die Theorie des Verkehrsablaufs – also Bogenbergers Fachgebiet – ist die Frage, wie der Verkehr flüssiger und sicherer wird: „Wir lösen Optimierungsprobleme – und dazu braucht es schnelle Algorithmen und Rechenverfahren, außerdem die Rechenpower von Supercomputern“, erläutert Bogenberger. „Man kann Verkehr und ganze Ballungsräume simulieren, doch ein wesentlicher Punkt ist, die dafür notwendigen Simulatoren immer realistischer und besser zu machen.“

Entwickeln Forschungsdisziplinen Modelle und Simulationen gewöhnlich dazu, um Systeme oder Prozesse zu verstehen und Prognosen abzuschätzen, verfahren sie am Lehrstuhl für Verkehrstechnik umgekehrt: Sie modellieren Zukunftsszenarien, überprüfen diese mit Hilfe von Experimenten im Straßenalltag. Und verbessern mit den Realitätsdaten wiederum die Modelle und Simulationen. Dass dabei noch aktuelle Probleme gelöst werden, ist praktisch: „Wie Robo-Autos genutzt werden, können wir nicht wissen, weil es bis auf wenige Testfahrzeuge noch keine gibt. Wir können nicht alles real ausprobieren, also brauchen wir Simulation und viele unterschiedliche Modelle“, sagt der Forscher. „Der Verkehrssektor fasziniert die Wissenschaft, weil er die ganze Gesellschaft betrifft, jeder von uns ist täglich irgendwie mobil. Verkehr ist ein reales System, auf das Politik und Verwaltung Einfluss nehmen wollen.“

Zuletzt simulierte Bogenbergers Team das Ridepooling, den Transporter vice auf Zuruf, bei dem sich mehrere Personen mit unterschiedlichen Zielen einen autonom fahrenden Kleinbus teilen. Die Szenarien variierten nach Flotten- und Fahrzeuggrößen, Passagierzahlen und gewünschten Strecken. Sie enthielten Fragen, die dem Traveling Salesman Problem ähneln, also einer Rechnung, die mit jeder Modifikation komplexer und größer wird. Die Simu-

Ideen für den Verkehr der Zukunft



Leibniz-Rechenzentrum
der Bayerischen Akademie der Wissenschaften

Wie wir morgen unterwegs sein werden, wird am Lehrstuhl für Verkehrstechnik der TUM mit Hilfe von Supercomputern simuliert und berechnet.



Abbildung 4: Im Münchner Norden wird der digitalisierte Verkehr der Zukunft erforscht. Die daraus gewonnenen Resultate verbessern Simulationen und Modelle. Grafik: M. Markreiter, Lehrstuhl Verkehrstechnik/TUM

Wer in München auf den öffentlichen Personennahverkehr setzt, muss mit Enttäuschungen leben: Die App der Münchner Verkehrsgesellschaft (MVG) informiert jetzt häufiger, dass Busse ausfallen. Dem Unternehmen fehlen im Spätsommer 2023 wenigstens 50 Fahrer:innen. Auf zehn Buslinien ist das Angebot bereits ausgedünnt. Und wie in München sind Fahrer:innen in Berlin, Frankfurt, Hamburg gefragt: „Wir verzeichnen einen extremen Fachkräftemangel im Verkehrsbereich“, stellt Dr. Klaus Bogenberger, Professor für Verkehrstechnik an der Technischen Universität München (TUM), fest. „An der Automatisierung von Verkehrsträgern führt kein Weg vorbei.“ Autonome Fahrzeuge können den Mangel beseitigen helfen und die Mobilität in den Städten moderner, ruhiger, sicherer machen.

Fall lässt sich ein FAIR-Workflow direkt in den Alltag integrieren und bietet so einen echten Mehrwert. Konkret für die Materialwissenschaften bedeutet das zum Beispiel, dass ein elektronisches Laborbuch mit den Daten gekoppelt wird, um so den Entstehungsprozess der finalen Daten besser nachvollziehen zu können. Mit einer solchen Vision im Blick, ist es erklärtes Kernziel von FAIRmat eine Dateninfrastruktur aufzubauen.

Die Entwicklung der Dateninfrastruktur erfolgt hier nach dem Bottom-up-Prinzip und inklusiv. Das bedeutet, mit den Bedürfnissen der Forschenden im Blick und dem Ansatz “Niemand wird zurück gelassen” [5]. Da die Forschungslandschaft - auch innerhalb einer Disziplin - bunt ist, ist diese Aufgabe alles andere als einfach. In FAIRmat werden zahlreiche und nicht selten widersprüchliche Anforderungen gesammelt, geordnet und miteinander abgestimmt. Das Konsortium unterteilt sich hierbei in sogenannte Areas, von A (Synthesis) bis G (Coordination). In letzterer wird das Konsortium von Prof. Dr. Claudia Draxl (Humboldt-Universität zu Berlin) geleitet. Jeder Area stehen jeweils weitere Leiter und Koordinatoren vor.



Abbildung 2: Fig. 2 Übersicht der Areas in FAIRmat (Quelle: [1]).

Hervorzuheben ist hier die Software NOMAD (Novel Materials Discovery) als Lösung einer digitalen Dateninfrastruktur, welche viele der Anforderungen umsetzt. Diese wird innerhalb Area D (Infrastructure) unter Leitung von

Prof. Dr. Hans-Joachim Bungartz entwickelt. Obwohl es einen Webauftritt der Software gibt [5], welcher als Hauptinstanz verstanden werden kann, gibt es keinen zentralisierenden Anspruch. Jede Institution kann sich einfach und frei eine sogenannte NOMAD Oasis aufsetzen und selbst verwalten. Die gesamte Dateninfrastruktur ist daher als eine Föderation zu sehen, in welcher die Instanzen Daten verwalten und im Verbund austauschen können (siehe Fig. 3).

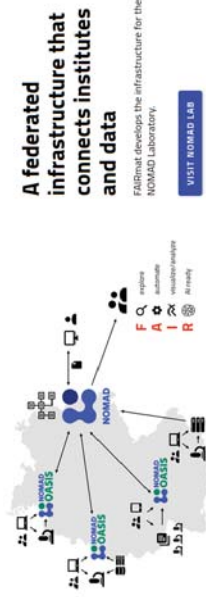


Abbildung 3: Fig. 3: Föderation der NOMAD Dateninfrastruktur (Quelle [1]).

Um den speziellen Anforderungen der Materialwissenschaften gerecht zu werden, ist es etwa möglich alle Daten nach bestimmten Elementen des Periodensystems zu durchsuchen oder sich Materialstrukturen interaktiv anzeigen zu lassen (siehe Fig. 2 und [4]). Um der KI-Deutung von FAIR gerecht zu werden, wird neben dem Datenmanagement etwa auch ein AI Toolkit angeboten [7].

FAIRmat hat bereits beträchtliche Fortschritte bei der Bewältigung der Herkulesaufgabe einer FAIR-Infrastruktur erzielt. Letztendlich hängt der Erfolg aber maßgeblich von der Bereitschaft der Forschungsgemeinschaft ab, die Datenpraktiken umzusetzen und insgesamt davon zu profitieren. Selbst wenn das bedeutet, dass mühsam erzeugte Daten auch von anderen verwendet werden.

Daniel Lehmborg

Referenzen:

- 1 [<https://www.fairmat-nfdi.eu/fairmat/>]
- 2 NFDI Konsortien www.nfdi.de/
- 3 DFG Checkliste zu Forschungsdaten https://www.dfg.de/download/pdf/foerderung/grundlagen_dfg_foerderung/forschungsdaten/forschungsdaten_checkliste_de.pdf
- 4 Suchmaske in NOMAD <https://nomad-lab.eu/prod/rae/encyclopedia/#/search>
- 5 FAIRmat Newsletter vol 1 https://www.fairmat-nfdi.eu/uploads/documents/Newsletter/FAIRmat_Newsletter_Volume1.pdf
- 6 NOMAD Webauftritt <https://nomad-lab.eu>
- 7 NOMAD AI Toolkit <https://nomad-lab.eu/aitoolkit>