

A 3D medical visualization of a brain's arterial ring. The arteries are shown in a reddish-pink color, with a complex network of vessels. One vessel has a noticeable bulge, representing an aneurysm. Small red and white particles, likely representing blood cells, are visible within the vessels. The background is dark, making the vessels stand out.

Die Mauern

zwischen

Computertechnologie

und

Der Blutfluss im Arterienring des Gehirns eines Patienten, dargestellt mithilfe der HemeLB Software des University College London und visualisiert vom Leibniz-Rechenzentrum. Verletzungen der Gefäßwände, wie sie etwa infolge eines Aneurysmas entstehen, können zu einem Schlaganfall führen.

Wie Höchstleistungsrechner dabei helfen können, passgenaue, **individualisierte Therapien** für Patienten und ein besseres Verständnis des menschlichen Körpers zu entwickeln.

Von **Eric Gedenk**

Medizin

einreißen

Vor zwei Jahren nahm Peter Cove-ney, Professor am University College London und Experte für Hochleistungsrechnen, am Extreme Scaling Workshop des Leibniz-Rechenzentrums teil. Der Workshop sollte Nutzer von Hochleistungsrechnern dabei unterstützen, ihre Computercodes effektiver zu skalieren, um von den weltweit leistungsstärksten Supercomputern vollen Gebrauch zu machen, darunter auch SuperMUC.

Die gemeinsame Anstrengung war erfolgreich: Coveney's Code wurde so skaliert, dass alle 250.000 Prozessorkerne von SuperMUC Phase 1 und 2 gemeinsam genutzt wurden. Dadurch war es erstmals möglich, die Genom-Daten von Patientinnen und Patienten zu analysieren, um vorherzusagen, wie wirksam Arzneimittel, darunter Medikamente gegen Brustkrebs, bei ihnen sind. Coveney's Arbeiten haben aber auch geholfen, die Strömungsdynamiken unter der Erdoberfläche besser zu verstehen. Was haben personalisierte Medizin und Geophysik gemeinsam? In beiden Fällen müssen die Wissenschaftler komplexe Wechselwirkungen modellieren, deren experimentelle Erforschung nur schwer möglich ist. Sie ziehen daher großen Nutzen aus numerischen Simulationen. „Wissenschaftliches Rechnen bereitet deshalb ein solches Vergnügen, weil die Algorithmen von einem Gebiet auf ein anderes übertragen werden können“, sagt Cove-ney. „Man entdeckt, dass man einen Beitrag dazu leisten kann, wissenschaftliche Probleme in einem bestimmten Feld zu lösen, obwohl dies gar nicht die ursprüngliche Absicht war.“

Cove-ney ist Professor für Chemie am University College London, leitet dessen Centre for Computational Science und arbeitet seit langem mit dem LRZ zusammen. Sein Ziel ist es, Hochleistungsrechnen zu einem Werkzeug zu machen, mit dem man Fragestellungen quer durch das wissenschaftliche Spektrum lösen kann. „Wir interessieren uns für alles, von der Theorie und Entwicklung von Algorithmen über die Problemanwendung auf verschiedenen Geräten bis hin zu den Endnutzern dieser Technologien“, sagt Cove-ney.

IT-gestützte biomedizinische Forschung

Seit 2016 ist das LRZ assoziierter Partner bei CompBioMed, einem EU-Projekt unter der

Leitung von Cove-ney. Dort werden Algorithmen und rechnerische Methoden entwickelt, um den Graben zwischen hochmodernen Supercomputertechnologien und medizinischer Forschung zu überbrücken. Um eine Zusammenarbeit in der Größenordnung von CompBioMed erfolgreich durchzuführen, benötigen Forscher Zugang zu den führenden Einrichtungen im Hochleistungsrechnen. Gemeinsam mit dem Edinburgh Parallel Computing Centre bilden das LRZ, das Barcelona Supercomputing Center und das niederländische Nationale Zentrum für Supercomputer das Rückgrat von CompBioMed. Weitere Partner sind Forschungseinrichtungen, Pharmazieunternehmen, Gesundheitsdienstleister sowie Anbieter von Hard- und Software.

„Wir tun
unser
Bestes,
die Strategie
des LRZ
dahin
auszu-
richten.“

auf die Blutströmung“, sagt Cove-ney. „Ich begann mich mit dem Blutfluss zu beschäftigen, nachdem ich mit ähnlichen Problemen bei der Bewegung von Öl und Gas durch poröse Materialien zu tun hatte.“

Alles zugleich: klein und groß, kurz und lang

Damit Computer die komplexen, dynamischen Prozesse im menschlichen Körper effektiv modellieren können, müssen Forscher die Balance zwischen Größe und Genauigkeit halten. Die meisten biomedizinischen Simulationen stellen Probleme auf ganz unterschiedlichen Skalen dar, von der molekularen Ebene bis zu ganzen Gewebeteilen oder Organen. Größe ist jedoch nicht die einzige Maßeinheit, die

eine Herausforderung darstellt: Die Forscher müssen sich zeitlich in Intervallen bewegen, die gerade kurz genug sind, um kleinste zelluläre Veränderungen zu bemerken, während die Simulation lange genug stattfinden muss, um die großmaßstäblichen Phänomene zu beobachten. Ein Beispiel: Um die Wirksamkeit eines Medikamentes im Modell zu erforschen, müssen Forscher die mikroskopischen, mikrosekundenlangen Wechselwirkungen eruieren, die bei der Anbindung eines Medikamentes an ein bestimmtes Protein im Körper stattfinden, während sie gleichzeitig ein ganzes Stück Gewebe über einen langen Zeitraum simulieren müssen.

Kürzlich hat das Team um Cove-ney seine Expertise eingesetzt, um den Einfluss des Blutflusses auf Aneurysmen im Kopf mithilfe der Software HemeLB zu untersuchen. Aneurysmen sind Erweiterungen der Blutgefäße, die zu lebensgefährlichen Gehirnblutungen führen können. Im Gegensatz zu Wasser, das einfach durch ein Rohr fließt, ist es kompliziert, den Blutfluss genau zu modellieren. Blut besteht aus einer Mischung von Blutzellen und flüssigem Blutplasma, und seine Viskosität kann sich verändern, je nach Größe und Form der Blutgefäße. Schon lange können Forscher den Blutfluss mit Daten aus der Magnetresonanztomographie (MRA) modellieren – eine Art bildgebendes Verfahren, das, ähnlich wie ein MRT-Scan, speziell auf die Erforschung der Blutgefäße ausgerichtet ist. Diese Daten bieten aber nicht die notwendige Genauigkeit, um die Bildung von Aneurysmen und das Risiko von Rissen in der Gefäßwand für individuelle Patienten zu erforschen. Um diesem Ziel näher zu kommen, hat das Team seine Simulationen mit Daten der transkraniellen Dopplersonographie (TCD) abgeglichen, die eine genauere zeitliche Auflösung bieten.

Hinzu kommt, dass Forschungen, die sich bislang mit Modellen zu strömungsdynamischen Eigenschaften des Blutflusses beschäftigt haben, auf Daten basierten, die von gesunden Menschen stammten und nicht von einem bestimmten Patienten. Für das Team von CompBioMed besteht das Ziel biomedizinischer Simulationen jedoch nicht darin, allgemeine Modelle zu verbessern – vielmehr möchte man bessere medizinische Ergebnisse für Patienten erreichen. „Wir führen diese Simulationen durch, um neue Erkenntnisse zu erlangen,

die wir wirklich in der Medizin einsetzen können“, betont Coveney. Das Team erstellte eine ganze Reihe von Simulationen, einschließlich des Blutflusses bei höchster und verminderter Geschwindigkeit, und erhielt eine zufriedenstellende Übereinstimmung zwischen ihrem Modell und den TCD-Daten.

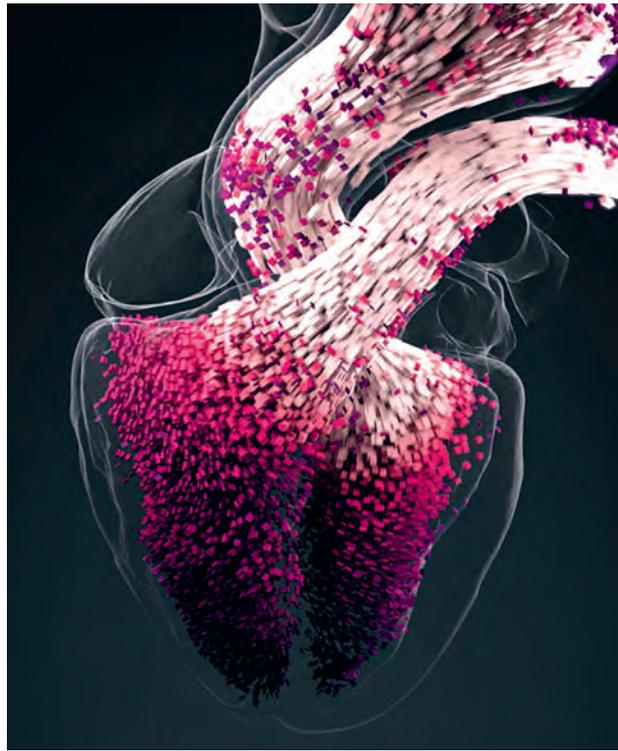
Personalisierte Gesundheitsversorgung

Simulationen wie die Studie über Aneurysmen bestätigen die Bedeutung von Hochleistungsrechnern im Gesundheitswesen. Dennoch bleibt es eine Herausforderung, den zeitnahen Zugang zu den passenden Ressourcen zu gewährleisten, um Computermodellierung auf breiter Basis in der Gesundheitsversorgung anwenden zu können. Während verbesserte Modelle dazu beitragen können, die Rechenzeit zu reduzieren, spielen möglicherweise neuartige Zugangsmöglichkeiten zu Rechnerressourcen am Ende eine gewichtigere Rolle. „Es wird häufig angenommen, dass man Hochleistungsrechnen nicht für kommerzielle und klinische Anwendungen einsetzen wird, aber die Ressourcen werden immer leichter zugänglich“, sagt Coveney. „Das trägt dazu bei, die Mauern zwischen hochmoderner Computertechnologie und Medizin einzureißen.“

Der Schutz von Patientendaten sowie Reglementierungen, die zu Recht von Regulierungsbehörden erlassen wurden, stellen nach wie vor eine Herausforderung dar, wenn es darum geht, das Prinzip Versuch und Irrtum durch numerische Simulationen zu ersetzen, stellt Coveney fest. Er ist dennoch zuversichtlich, was die Richtung angeht, die dieses Forschungsfeld eingeschlagen hat. „Wir erleben eine Phase, in der sich Technologie in eine positive Richtung entwickelt“, sagt er.

Zugleich prognostiziert er, dass die Supercomputer der nächsten Generation

Anders als bei Wasser ist es kompliziert, den Blutfluss zu modellieren.



Modell des Blutflusses und der elektromechanischen Prozesse im menschlichen Herz, visualisiert durch CompBioMed.

eine große Rolle spielen werden, wenn es darum geht, Hochleistungsrechnen und Gesundheitsfürsorge zu verbinden. SuperMUC-NG ist der achtschnellste Rechner der Welt. Dabei nimmt er jedoch eine relativ einzigartige Position unter seinen Kollegen ein: Er vollbringt seine Leistung ohne Zuhilfenahme von Graphikprozessoren oder anderen Beschleunigern.

SuperMUC-NG ist Teil der deutschen Höchstleistungsrechner-Strategie auf nationaler Ebene, bei der das Gauss Centre for Supercomputing hochmoderne Systeme finanziert, um eine weite Bandbreite an Anwendungen zu unterstützen. Die Finanzierung wird vom Bund durch das BMBF und von den beteiligten Ländern gestemmt, im Falle des SuperMUC-NG von Bayern. „Diese Art der biomedizinischen Forschung bildet einen unserer Schwerpunkte, und wir tun unser Bestes, die Strategie des LRZ dahingehend auszurichten“, erklärt LRZ-Leiter Dieter Kranzlmüller.

Innovationen durch internationale Zusammenarbeit

Für Projekte wie CompBioMed arbeiten Coveney und seine Mitarbeiter am University College London mit Forschern in der ganzen Welt zusammen, und er stellt diese internationale Zusammenarbeit

als Hauptgrund für ihren Erfolg heraus. „Die Tatsache, dass die Europäische Union Programme wie Horizon2020 auflegt, deckt sich sehr gut mit unseren Plänen“, sagt Coveney. „Und die Unterstützung, die uns das LRZ hat zukommen lassen, war außergewöhnlich – sie unterstützten alles auf eine Art, wie wir es bis dahin noch nicht erlebt hatten.“

So wie Rechnerarchitekturen weiter wachsen und sich verändern, so tritt auch die Notwendigkeit für den internationalen Austausch von Ideen in den Vordergrund, je mehr Forschungsfelder von Computermodellierung und Simulation profitieren wollen. SuperMUC-NG stellt einen wichtigen Schritt dar, um das Potential von Supercomputern in die Hand der Mediziner zu legen. „Die Rechner nur zur Verfügung zu stellen, ist allein aber nicht ausreichend“, sagt Dieter Kranzlmüller.

„Mit jeder neuen Maschine müssen wir das entsprechende Wissen und Training zur Verfügung stellen, wie auch die Talente, die für weitere Innovationen in der Computermodellierung und der Simulation nötig sind. Die Partnerschaft mit unseren Kollegen beim Gauss Centre for Supercomputing ermöglicht genau dies.“

Eric Gedenk

ist Wissenschaftsautor am Gauss Centre for Supercomputing, dem Zusammenschluss der drei nationalen Höchstleistungsrechenzentren in Deutschland (Jülich, Stuttgart, Garching). Zuvor war er unter anderem am Oak Ridge National Laboratory in Tennessee, USA tätig.

