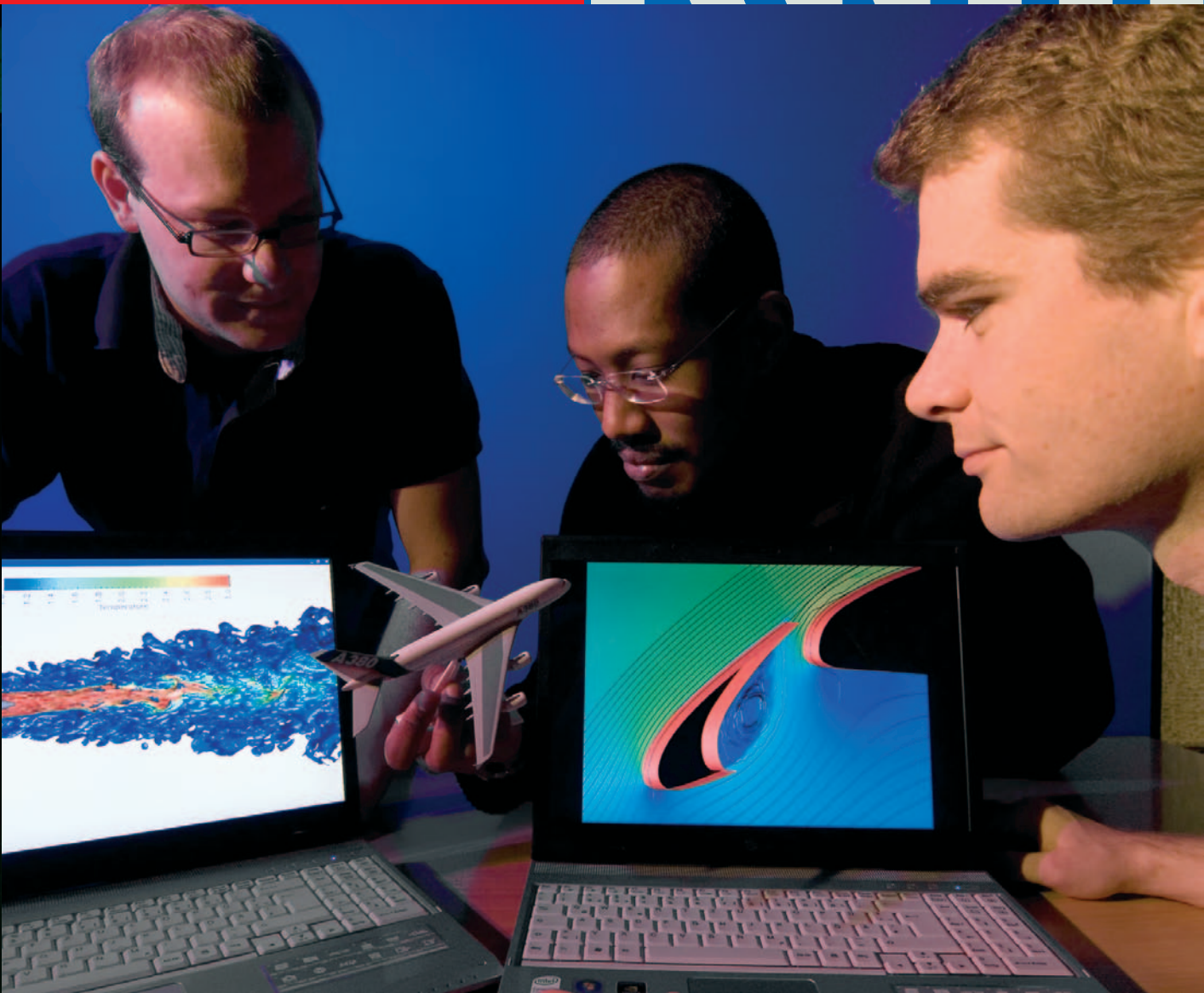


RWTH AACHEN UNIVERSITY



BERICHTE
AUS DER
RHEINISCH-
WESTFÄLISCHEN
TECHNISCHEN
HOCHSCHULE
AACHEN

AUSGABE 2/2007

ISSN-NR.
0179-079X

Computational Engineering Science – Ein neues Ingenieurprofil



Denken ist Handeln. Bei BCG.

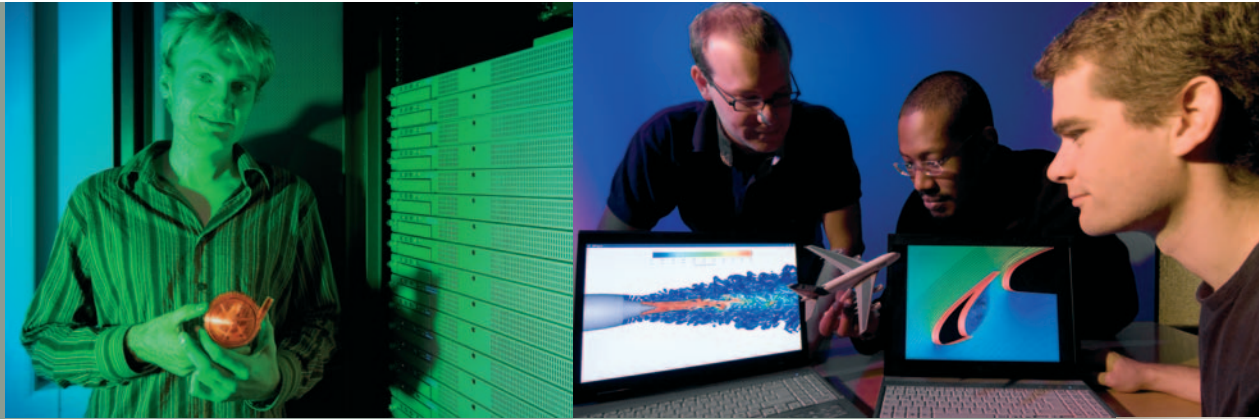
Theoretisch beherrschen Sie mehr als Wirtschaft. Praktisch auch?

BCG sucht Wirtschaftsingenieure, Wirtschaftsinformatiker und Wirtschaftsmathematiker.

Als Multitalent können Sie bei BCG vielfach mehr bewegen. Indem Sie Ihr interdisziplinäres Wissen nutzen, um an den Schnittstellen von Wirtschaft und Technik richtungsweisende Strategien zu entwickeln. Ideen, die Sie gemeinsam mit unseren Kunden umsetzen und in langfristige Wettbewerbsvorteile verwandeln. Wir suchen herausragende Universitätsstudierende und Professionals (w/m), die ihr Potenzial in einem Aufgabengebiet entfalten wollen, das genauso vielfältig ist wie sie selbst. Bewerben Sie sich bei der weltweit führenden Strategieberatung für den Einstieg als Associate oder Consultant, für das Junior-Associate-Programm (Bachelor) oder für ein studienbegleitendes Praktikum.

Ingrid Samuel (02 11) 30 11-32 00 oder Ortrud Wiegleb (0 89) 23 17-43 61, www.bcg.de/multitalent

THE BOSTON CONSULTING GROUP

**Impressum**

Herausgegeben
im Auftrag
des Rektors:
Dezernat Presse- und
Öffentlichkeitsarbeit
der RWTH Aachen
Templergraben 55
52056 Aachen
Telefon 0241/80-94327
Telefax 0241/80-92324
Pressestelle@zhv.rwth-aachen.de
www.rwth-aachen.de

Redaktion:

Sabine Busse
Angelika Hamacher

Verantwortlich:

Toni Wimmer

Titel:

Wissenschaftler des Aero-
dynamischen Instituts
diskutieren das Lärmreduktions-
potenzial für Tragfläche
und Triebwerk eines
Passagierflugzeugs.
Wichtigstes Werkzeug ist
hierbei die numerische
Strömungssimulation.
Foto: Peter Winandy

Rücktitel:

Computersimulationen und
neue Visualisierungstechniken
helfen die Ursachen von
Blutschädigungen in mechanischen
Assistenzsystemen für Herzen
zu untersuchen, insbesondere
für diese miniaturisierte
axiale Blutpumpe.
Foto: Peter Winandy

Fotos:

Martin Lux (Seite 4)
Peter Winandy

Anzeigen:

print'n'press, Aachen
jh@p-n-p.de

Art direction:

Klaus Endrikat

DTP:

ZAHREDesign,
Aachen

Druck:

PrintProduction GmbH,
Aachen

Gedruckt auf
chlorfrei gebleichtem
Papier

Das Wissenschaftsmagazin
„RWTH-Themen“ erscheint einmal
pro Semester. Nachdruck einzelner
Artikel, auch auszugsweise,
nur mit Genehmigung der
Redaktion. Für den Inhalt
der Beiträge sind die Autoren
verantwortlich.

Wintersemester 2007

AUS DEM INHALT

Vorwort des Rektors	4
Simulation – virtuelle Lösungen für reale Probleme	6
Handshake zwischen Methoden und Materialsystemen	8
Minireaktoren im Schlepptau aufsteigender Gasblasen	10
Mathematik für Tropfen ist alles andere als trocken	14
Welchen Einfluss besitzen Modellparameter?	18
Geometrieverarbeitung für die numerische Simulation	22
Numerische Strömungssimulation in Natur und Technik	26
Hochleistungsrechnen und Visualisierung	30
Lückenlose Qualitätskontrolle bei der Medikamentenherstellung	32
Produktivität versus Performanz in der Simulation	38
Neue Wege bei der Nutzung von Erdwärme und Speicherung von Kohlendioxid	40
Virtueller Test für Biowerkstoffe	44
Rechnen auf Zehntausenden von Prozessoren – wo muss ich klicken?	48
Simulation an der RWTH Aachen	52
Namen und Nachrichten	54

Computational Engineering Science – Ein neues Ingenieurprofil

Vorwort

Groß ist die Freude an der „**Exzellenzhochschule**“ RWTH Aachen: Der Bewilligungsausschuss für die Exzellenzinitiative von Bund und Ländern hat am 19. Oktober einstimmig die Finanzierung des Zukunftskonzepts der RWTH beschlossen. Zusätzlich wurden Mittel für einen weiteren Exzellenzcluster „**Maßgeschneiderte Kraftstoffe aus Biomasse**“ genehmigt.

Laut Deutscher Forschungsgemeinschaft werden fünf Jahre lang für die Förderung eines Zukunftskonzeptes durchschnittlich 13 Millionen Euro pro Jahr, für einen Exzellenzcluster rund 6,5 Millionen und für eine Graduiertenschule etwa eine Millionen Euro zur Verfügung gestellt. Neben dem jüngsten Ergebnis in der zweiten Antragsrunde wurden für die RWTH im Jahr 2006 bereits zwei Exzellenzcluster und eine Graduiertenschule bewilligt. Damit steht die Aachener Hochschule – gemessen am Fördervolumen von jährlich etwa 33,5 Millionen Euro – gemeinsam mit der LMU München auf dem vordersten Listenplatz der jetzt insgesamt neun „**Exzellenzhochschulen**“ in Deutschland. Nur diese beiden Hochschulen werden die Mittel zur Finanzierung für drei Exzellenzcluster erhalten.

Außerdem geht die RWTH als ein besonderer nationaler Spitzenreiter aus dem Wettbewerb hervor – alle Exzellenzcluster und die Graduiertenschule werden bei fakultätsübergreifender Beteiligung vieler Institute – in den Ingenieurwissenschaften koordiniert. Dieses Ergebnis wurde nicht nur in der Hochschule, sondern auch in ihrem Umfeld begeistert aufgenommen.

Wir freuen uns über die Fördergelder, wissen darüber hinaus, dass wir als „Exzellenzhochschule“ unser Ansehen im In- und im Ausland weiter steigern müssen.

Grundlage für die Förderung ist das in der so genannten dritten Linie beantragte Zukunftskonzept – überschrieben mit dem englischen Titel „**RWTH 2020: Meeting Global Challenges**“. Die RWTH Aachen wird die globalen Herausforderungen jetzt forciert in Angriff nehmen. Dabei wollen wir mit vier Maßnahmenbündeln existierende Defizite beheben und vorhandene Stärken ausbauen:

- An erster Stelle steht die Schärfung des wissenschaftlichen Profils: Die naturwissenschaftliche Grundlagenforschung soll gestärkt, die interdisziplinäre Zusammenarbeit – vor allem die aller Fakultäten mit den Ingenieur- und den Naturwissenschaften – ausgebaut werden.
- Eine zweite bedeutende Maßnahme wurde bereits im August 2007 mit der Unterzeichnung von JARA – der „**Jülich Aachen Research Alliance**“ – eingeleitet. Dieses Modell einer Partnerschaft zwischen universitärer und außeruniversitärer Forschung ist von hoher internationaler Ausstrahlung. Die Allianz ist bereits in den drei Sektionen JARA-BRAIN Translational Brain Medicine (Neurowissenschaften), JARA-FIT Fundamentals of Future Information Technology (Informationstechnologie) und JARA-SIM Simulation Sciences (Simulationswissenschaften) aktiv.



● Beim dritten Maßnahmenpaket wird davon ausgegangen, dass eine erfolgreiche Universität Menschen für Ideen wie Projekte begeistern und in Bewegung setzen muss. Um herausragende Studierende, Lehrende und Forscherinnen wie Forscher in die Hochschule holen und halten zu können, wird eine nachhaltige Förderung des wissenschaftlichen Nachwuchses umgesetzt sowie langfristig die Auswahl der besten Studierenden angestrebt. Besondere Anstrengungen werden dabei zur Gewinnung von Frauen unternommen – von Studentinnen, Nachwuchsforscherinnen und Professorinnen.

● Der vierte Bereich umfasst die Schritte zur Stärkung der Managementqualitäten und der Etablierung neuer Führungsstrukturen. Es sollen Freiräume für unternehmerisches Handeln geschaffen und eine effiziente Ressourcenverteilung erleichtert werden. Der notwendige Transformationsprozess der universitären Organisation ist strategisch geplant. Zudem werden künftig die bestehenden Entscheidungsebenen wie Rektorat und Fakultätsleitungen um einen Strategierat erweitert.

Im Exzellenzcluster **„Maßgeschneiderte Kraftstoffe aus Biomasse“** wollen die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler einen interdisziplinären Ansatz unter Verwendung optimierter Syntheseprozesse zur Erforschung neuer, auf Biomasse basierender, synthetischer Kraftstoffe nutzen, um das Potenzial hinsichtlich moderner verbrennungsmotorischer Technologien zu bestimmen und gleichzeitig die Abhängigkeit von fossilen Energien zu verringern. Das langfristige Ziel ist die Bestimmung einer optimalen Kombination von Kraftstoffkomponenten und deren Herstellungsprozessen, die auf nachwachsenden Rohstoffen und neuen Verbrennungsprozessen basiert. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Stefan Pischinger vom Lehrstuhl für Verbrennungskraftmaschinen ist Koordinator des Exzellenzclusters.

Bereits 2006 bewilligt wurden der Exzellenzcluster **„Integrative Produktionstechnik in Hochlohnländern“**, der Exzellenzcluster **„Ultra High-Speed Mobile Information and Communication“** sowie die Graduiertenschule **„Aachen Institute for Advanced Studies in Computational Engineering Science“**.

Univ.-Prof. Dr. Burkhard Rauhut

www.rwth-aachen.de/exzellenz

*Staatssekretär Dr. Michael Stückradt und Andreas Pinkwart, Minister für Innovation, Wissenschaft, Forschung und Technologie des Landes Nordrhein-Westfalen, freuen sich gemeinsam mit Rektor Burkhard Rauhut und Aachens Oberbürgermeister Dr. Jürgen Linden (von links) über die Entscheidung des Bewilligungsausschusses für die Exzellenzinitiative von Bund und Ländern.
Foto: Martin Lux*

Simulation – virtuelle Lösungen für reale Probleme

Der Begriff „Simulation“ steht im Mittelpunkt dieser Ausgabe der „RWTH-Themen“. Was versteht man darunter und warum simuliert man etwas? Definitionen des Begriffs findet man viele, die man wie folgt auf den Punkt bringen kann: Simulation versucht die Realität beziehungsweise reale Abläufe mit Hilfe des Computers zu visualisieren, um Vorgänge zu analysieren und zu verstehen, Tendenzen vorherzusagen oder Eigenschaften zu verbessern. Natürlich sind Simulationen heute Standard in vielen Designprozessen. Wer kennt nicht die Luftströmungssimulationen bei Formel1-Wagen, die zur Verbesserung der Chassisstruktur herangezogen werden? Die meisten wissenschaftlichen Simulationen sind in einem Maße zum Standard geworden, dass uns nicht bewusst ist, in welchen Bereichen sie überall eingesetzt werden. Wenn ein Produkt Einzug in unseren Alltag hält, hat es zuvor viele Entwicklungsschritte durchlaufen, zu denen immer häufiger auch die Simulation gehört. Als Computer noch nicht mit der heutigen Leistungsstärke zur Verfügung standen, wurden in größerem Umfang Prototypen entwickelt und gebaut. Da diese teuer, relativ unflexibel und aufwändig sind, werden die Prototypen heute häufig durch Simulationsprogramme abgelöst. Nun hat man auf der einen Seite die realen Vorgänge oder Begebenheiten und auf der anderen einen Computer, der zur Simulation eingesetzt werden soll. Die große Herausforderung besteht somit in der Umsetzung der Realität in ein Computerprogramm, welches die Simulation so abbildet, dass die in der Realität vorhandenen Parameter

berücksichtigt werden. Hierzu bilden mathematische Modelle die Grundlage, die mittlerweile für viele Problemstellungen existieren, aber teilweise auch erst noch entwickelt werden müssen. Je komplexer eine Simulation ist, um so mehr Rechenleistung wird benötigt, damit sie die Realität abbilden kann. Werden komplexe Vorgänge simuliert, benötigen diese unter Umständen viele zehntausend Prozessoren, da sonst zu lange Rechenzeiten die Folge wären. Häufig ersetzen Simulationen reale Experimente. Dabei gibt es zwei Möglichkeiten, Problemlösungen zu generieren: In der „direkten“ Vorgehensweise werden Simulationen unter Verwendung bestimmter Randbedingungen und anderer Parameter durchgeführt. Man versucht zunächst ein Experiment mit messtechnisch erfassten Ergebnissen zu reproduzieren, um die Genauigkeit der Simulation einschätzen zu können. Hierbei spricht man von Validierung. Anschließend kann man die Simulation auf Bereiche ausdehnen, in denen es keine Messdaten gibt. Die erzielten Ergebnisse werden dann genau wie experimentelle Messwerte benutzt. Die andere Möglichkeit beinhaltet, dass man Lösungswege rückwärts sucht, das heißt man forscht nach einzugebenen Daten, die ein bestimmtes gewünschtes Ergebnis produzieren würden, oder nach möglichen Modellen, die besonders realitätsnahe Resultate liefern könnten. Hierbei spricht man von „inversen“ Problemen.

Die vorgestellten Forschungsprojekte sollen die Bandbreite der Simulation an der RWTH Aachen zeigen. So werden nicht nur Funktionen von Herzpum-

pen oder anderen mechanischen Geräten simuliert, sondern auch Produktionsabläufe beispielsweise bei der Medikamentenherstellung zur Optimierung nachgebildet, mathematische Modelle weiter- und neuentwickelt und Materialbeziehungsweise Werkstoffentwicklungen simuliert. Die Zusammenstellung der Beiträge verdeutlicht, dass sich die wissenschaftliche Auseinandersetzung mit der Thematik der Simulation hauptsächlich aus drei Bereichen speist: der Mathematik, der Informatik und den Ingenieurwissenschaften. An der Schnittstelle zwischen diesen Fachdisziplinen ist das Forschungsgebiet Computational Engineering Science angesiedelt. Dieses zukunftsweisende Thema ist an der RWTH Aachen mit mehreren Schwerpunkten vertreten: dem Studiengang „Computational Engineering Science“, der im Rahmen der Exzellenzinitiative eingerichteten Graduiertenschule „Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science“, kurz AICES, sowie dem „Center for Computational Engineering Science“, kurz CCES. Diese Einrichtungen ergänzen die bereits seit Jahren bestehenden interdisziplinären Kooperationen im Bereich Computational Engineering Science durch die Ausbildung von Studierenden, die Förderung von Graduierten und die Bündelung bestehender Forschungsk Kooperationen. Die Autoren der Beiträge in diesen „RWTH-Themen“ sind Mitglieder der Graduiertenschule AICES.

www.aices.rwth-aachen.de

Autorin:

Nicole Faber M.A. ist Geschäftsführerin der Graduiertenschule „Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science“.



Wovon Sie als Kind auch träumten: Jetzt wird es Zeit, es wahr zu machen.

Sie wollten schon immer an wegweisenden Projekten mitwirken, Innovationen anstoßen, Verantwortung tragen? Bei uns können Sie das vom ersten Tag an. Einer guten Idee ist es schließlich egal, wer sie hat: der Junior oder der Abteilungsleiter. Und gute Ideen – die brauchen wir jeden Tag. Denn sie haben uns zu dem gemacht, was wir heute sind: einer der Schrittmacher bei vielen Zukunftstechnologien. Es sind Entwicklungen aus unserem Hause, die den Takt vorgeben im Mobilfunk, im Digital-Fernsehen, in der Funktechnik. Auch bei

Themen wie Rucksicherung, drahtloser Automobiltechnik oder EMV sind wir federführend – und praktisch in jedem unserer Geschäftsbereiche einer der drei wichtigsten Player auf dem Weltmarkt. Damit wir das auch bleiben, brauchen wir Leute wie Sie. So bald wie möglich. Deshalb können Sie bei uns nicht nur als frischgebackener Hochschulabsolvent (m/w), sondern auch schon während Ihres Studiums einsteigen. Als Praktikant, Werkstudent oder begleitend zu Ihrer Abschlussarbeit (Master, Bachelor, Diplom).


ROHDE & SCHWARZ

www.career.rohde-schwarz.com

Handshake zwischen Methoden

Der Weg zur Materialentwicklung von morgen

RWTHTHEMEN 2/2007

Wünschen Sie sich nicht auch, Ihr Kind könnte vor bruch sicheren Fensterscheiben Fußball spielen, Ihre wunderschönen neuen Keramiksteller würden einen Aufschlag auf den Boden unbeschadet überstehen oder Ihre gesamte Lieblingsmusik ließe sich auf einem kleinen Datenmedium speichern – und so abwechslungsreichen Musikgenuss auch bei vier Wochen Schlecht-Wetter-Urlaub ermöglichen?

Diese Wünsche liegen im Trend einer konkreten Herausforderung, der sich die Materialwissenschaftler bereits stellen: den maßgeschneiderten Materialien mit verbesserten funktionalen Eigenschaften. Die Aufgabenstellung ist auch von höchstem wirtschaftlichen Interesse, denn praktisch jedes neue Produkt basiert auf der Weiterentwicklung eines Werkstoffes. Daher bergen bereits moderate Fortschritte ein großes wirtschaftliches Potenzial. Die Werkstoffentwicklung wurde in den letzten Jahren begleitet durch breit gefächerte Anstrengungen, die Strukturierung relevanter Materialien auf immer kleineren Skalen kontrollieren zu können. Trotz intensiver Bemühungen gelten die anfänglichen Stadien dieser Strukturbildungsprozesse immer noch als weitestgehend unverstanden, so zum Beispiel die Keim- und Mikrostrukturbildung in einem heterogenen Medium. Dies gilt für die anfängliche Strukturierung an metallischen Oberflächen, die insbesondere in der Mikroelektronik und -systemtechnik wichtig ist, ebenso wie für die kleinskaligen Strukturentwicklungen im Volumen metallischer Legierungen, beispielsweise für die Entwicklung neuer Materialien in der Medizintechnik oder für die im Hinblick auf zukünftige photonische Kristalle bedeutenden Kolloide.

In einem Schwerpunktprogramm der Deutschen Forschungsgemeinschaft, dem Schwerpunktprogramm „Heterogene Keim- und Mikrostrukturbildung: Schritte zu einem system- und skalenübergreifenden Verständnis“ sollen daher grundlagenorientierte Anstrengungen geleistet werden, diese Lücke anhand einer interdisziplinären Erforschung der ein-

fachsten denkbaren Modellsysteme für heterogene kristalline Ordnung zu schließen.

Das Schwerpunktprogramm wurde vom Lehr- und Forschungsgebiet Modellbildung in der Werkstofftechnik initiiert und wird auch von diesem koordiniert. Der Inhalt des Programms zeigt zum einen, dass die fundamentalen Fragen funktionalen Materialdesigns heute angebar sind. Weiterhin macht er deutlich, dass sich diesen zu stellen ein Umdenken erfordert. Die klassische „Try-and-Error“-Methodik in der Materialtechnik ist für Hochtechnologienationen wie Deutschland schon lange zu zeit- und kostenintensiv geworden. Ein systematisches Vorgehen, das eine solche Herangehensweise überwindet, bedeutet aber auch, Grenzen zwischen den klassischen materialwissenschaftlichen und material-technischen Disziplinen überwinden zu lernen und die notwendige Expertise für das eine Ziel „Verstehen-Kontrollieren-Designen“ gemeinsam zusammenzubringen. Im Schwerpunktprogramm ist das wie folgt vorgesehen: Um zu einem system- und skalenübergreifenden detaillierten Ver-

ständnis der Energetik und Kinetik heterogener Keim- und Mikrostrukturbildung zu gelangen, werden einerseits drei für unterschiedliche Längen- und Zeitskalen entwickelte theoretische beziehungsweise Computersimulationsmethoden zum Einsatz kommen. Andererseits sollen zwei unterschiedliche experimentelle Modellsysteme, binäre Kolloide und binäre metallische Legierungen, untersucht werden. Dadurch verbinden sich die im Zentrum des Interesses stehenden physikalischen Phänomene je nach Modellsystem mit unterschiedlichen Längenskalen. Dies stellt einen wichtigen Ausgangspunkt für das angestrebte methodische Ziel auf theoretischer Seite dar, eine rigorose Verbindung zwischen den Methoden der Thermodynamischen Rechnung, der Dichtefunktionaltheorie, der Molekularen Simulation sowie der Phasenfeldmethode zu schaffen.

Für das Erreichen des Gesamtzieles ist die Zusammenarbeit zwischen Theorie und Experiment essenziell. Einerseits basiert die Entwicklung physikalisch relevanter Modelle zur Beschreibung von Keimbildungs-

mechanismen auf der verlässlichen Kenntnis von Schlüsselparametern wie der Grenzflächenenergie zwischen Kristallkeim und Schmelze. Diese Grenzflächenenergie experimentell zu bestimmen war bisher nicht möglich und kann erstmalig auf Basis des aktuell in der Kolloidphysik erreichten Stands der Forschung in Angriff genommen werden. Angestrebt wird daher ein symbiotisches Vorgehen der experimentellen Metallphysik mit der experimentellen Kolloidphysik. Andererseits bedarf jede Modellweiterentwicklung der verlässlichen Verifikation von theoretischen Voraussagen durch geeignet ausgelegte Experimente. Darüber hinaus besitzen die entwickelten und verifizierten Modelle aber auch eine Kontrollfunktion für noch nicht voll etablierte und weiterzuentwickelnde Messverfahren und -techniken.

Die beabsichtigte theoretische Methodenweiterentwicklung profitiert maßgeblich von zwei Besonderheiten, die gerade das gemeinsame experimentelle Vorschreiten mit den beiden Modellsystemen „Kolloid“ und „Metall“ mit sich bringt. Zum

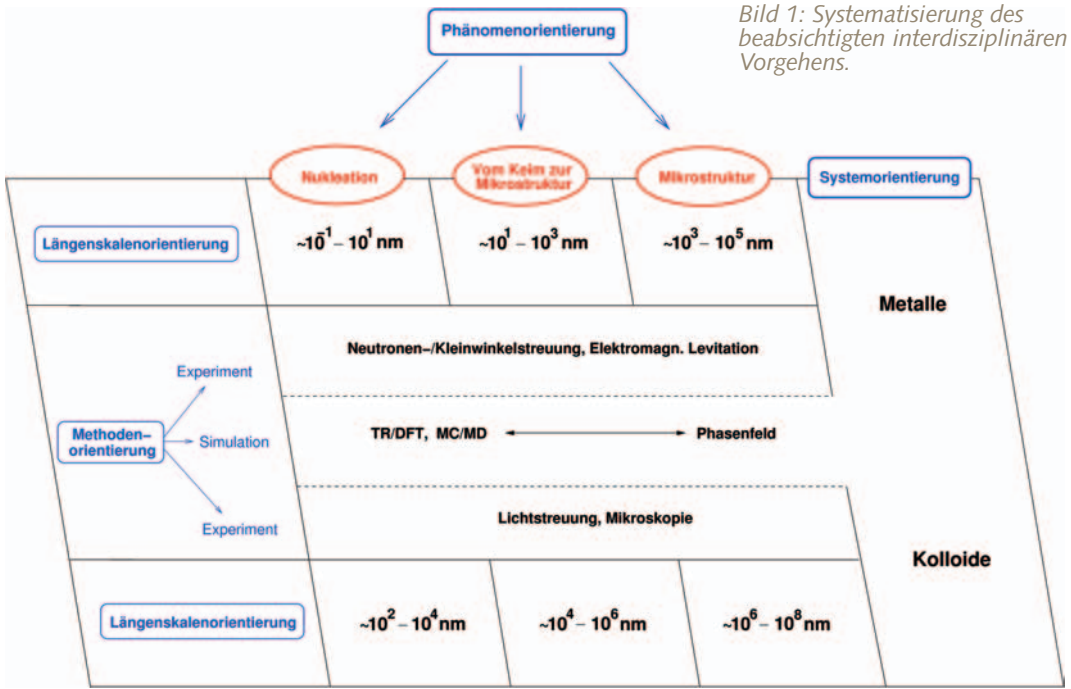
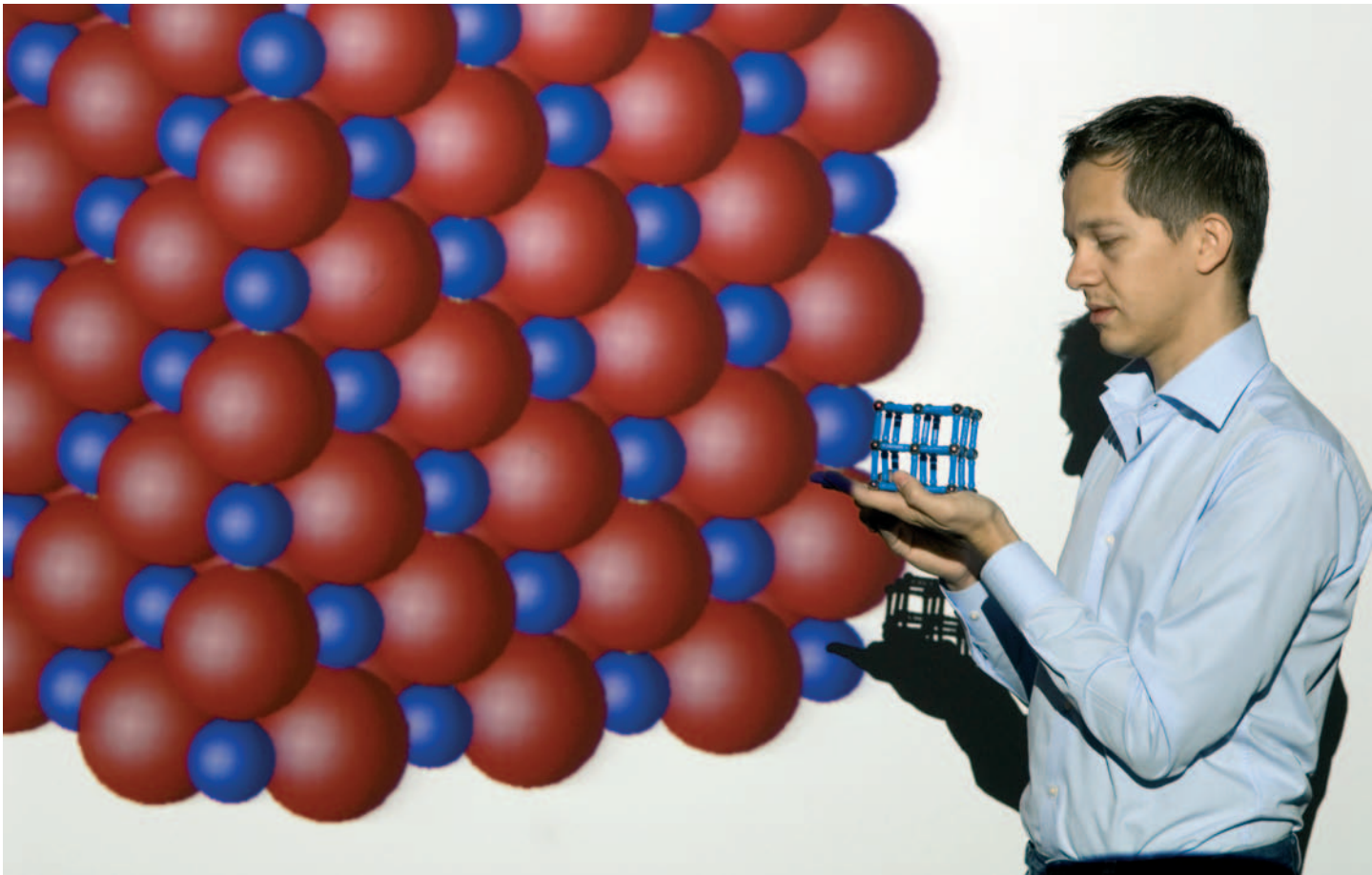


Bild 1: Systematisierung des beabsichtigten interdisziplinären Vorgehens.

und Materialsystemen



einen rückt gerade das Aufheben einer strikten Längenskalenbezogenheit je Phänomen durch Betrachten beider Modellsysteme, Kolloide wie Metalle, ein aus theoretischer Sicht bedeutendes „Handshaking“ der Dichtefunktionaltheorie-, Molekularsimulations- und Phasenfeldmethode in den Bereich des Erreichbaren, siehe Bild 1. Andererseits wird die Chance, diesen Mehrskalensimulationszugang zu entwickeln, zusätzlich durch die Möglichkeit unterstützt, in Kolloiden strikt zweidimensionale Systeme zu präparieren und damit gezielt von zweidimensionalen Untersuchungen zu korrespondierenden dreidimensionalen Studien überzugehen. Dieses Vorgehen wird auf Grund der Komplexität des Problems auch auf theoretischer Seite gewählt und ermöglicht dabei einen experimentellen Abgleich. Das experimentelle Vorgehen profitiert darüber hinaus von der Theorie in dem Sinne, dass bei der Weiterentwicklung von Messverfahren und -techniken für Metallsysteme theoretische Modellvorhersagen Aufschluss über die Güte erlauben, mit der neue Verfahren die obigen physikalischen Schlüsselparameter zu bestimmen gestatten. Für die Kolloidsysteme besteht die gleiche Kontrollfunktion hinsichtlich einer theoretischen Verifikation

der Phasendiagramme dieser Modellsysteme. Das „Handshaking“ zwischen Methoden und Materialsystemen ist der Schlüssel dazu. Programme, wie das obige Schwerpunktprogramm der Deutschen Forschungsgemeinschaft zeigen, dass die klassische ingenieurwissenschaftliche Materialentwicklung zunehmend von Bemühungen ergänzt wird, durch allein theoretisches Vorgehen von modelltheoretischen Grundlagen auf kleinster Skala, über mathematisch rigorose Weiterentwicklung dieser Modelle, verbunden mit einer numerischen Umsetzung durch Methoden des Höchstleistungsrechnens, ebenfalls einen Beitrag zu ingenieurwissenschaftlich relevanten Fragestellungen zu leisten. Diese Bemühungen sollen keine Alternative zum traditionellen ingenieurwissenschaftlichen Vorgehen darstellen, sondern sich angesichts der Größe der Herausforderung synergetisch mit diesem ergänzen und sukzessive das wissenschaftliche Gebiet um neue systematische, mechanismenorientierte Erkenntniszugänge erweitern. Grundlage, um die für ein solches interdisziplinäres Vorgehen notwendigen Gespräche führen zu können, ist natürlich auch eine entsprechend angelegte interdisziplinäre Ausbildung. Dazu

gehört einerseits, Studierenden Modellierungsmethoden in der Werkstofftechnik im Überblick zu vermitteln, damit diese ein Verständnis für Grenzen und Einsetzbarkeit von verschiedenen Methoden erlangen, andererseits, sie mit Trends und Herausforderungen der heutigen Werkstoffentwicklung vertraut zu machen. Ergänzt wird das Spektrum notwendiger Methodenkompetenz durch numerisches und informationstheoretisches Know-how. Dieses Spektrum wird an der RWTH Aachen in Zukunft auf verschiedenen Niveaus, vom Undergraduate bis zum Postgraduate Level, erworben werden können. Das Interesse der Werkstoffindustrie an diesen Absolventen ist schon heute hoch. Ebenso groß ist aber ihr Interesse daran, dass die oben angesprochenen mechanismenorientierte Methodenweiterentwicklung nicht allein eine prinzipielle Methodenentwicklung bleibt, sondern in industrieller Zusammenarbeit zur Optimierung konkreter Prozess- und Materialsysteme zielgerichtet eingesetzt wird – Optimierung, die die dynamischen Prozesswechselwirkungsmechanismen zwischen den Skalen in einer Weise berücksichtigen, wie klassische Lösungen es bisher nicht erlauben. Da diese mechanismenorientierte, skalenübergreifende

Bild 2: Wissenschaftler entwickeln mathematische Modelle, die die Skalenunterschiede zwischen Computersimulationen und Anwendungen in der Praxis überbrücken. Hier wird eine Kristallstruktur, die von einer Computersimulation vorhergesagt wurde, mit einem von Experimenten abgeleiteten Kristallmodell verglichen.
Foto: Peter Winandy

Material- und Prozessoptimierung untrennbar an Methoden des Höchstleistungsrechnens und der Höchstleistungsvisualisierung gebunden ist, ist die entsprechende Forschung an der RWTH Aachen konsequenterweise in das interdisziplinäre „Center for Computational Engineering Science“ eingebunden und wird gleichzeitig eines der zukünftigen Kompetenzfelder dieses Zentrums darstellen.

<http://www.ghi.rwth-aachen.de/www/>

Autorin:
Univ.-Prof. Dr.-Ing. Heike Emmerich betreut das Lehr- und Forschungsgebiet Modellbildung in der Werkstofftechnik.

Minireaktoren im Schlepptau aufsteigender Gasblasen

Rechnergestützte Intensivierung von Gas-Flüssig-Prozessen

RWTHTHEMEN 2/2007

Gas-Flüssig-Reaktionen bilden die Grundlage für bedeutende Prozesse der chemischen Industrie mit Umsätzen im Bereich mehrerer Millionen Jahrestonnen. Bei dieser Art chemischer Umwandlungen kommt einer der Reaktionspartner aus der Gasphase, wie zum Beispiel Luftsauerstoff als Oxidationsmittel. Dieser geht aus den Gasblasen in die Flüssigkeit über, wo er auf den zweiten Partner trifft und die chemischen Reaktionen stattfinden. Als konkreter industrierelevanter Prozess sei die Partialoxidation von aus Erdöl gewonnenem Cyclohexan zur Adipinsäure genannt. Die Adipinsäure ist wiederum ein wichtiger Rohstoff zur Herstellung von Kunststoffen – speziell Nylon – sowie Weichmachern. Damit ein solcher Prozess überhaupt starten kann, sind also Gas und Flüssigkeit in Kontakt zu bringen. Dies geschieht in so genannten Kontaktapparaten. Eine wichtige Klasse solcher Kontaktapparate bilden die Blasensäulen, bei denen am Fuß einer Säule Luft oder ein anderes Gas in eine umgebende Flüssigkeit gepumpt wird. Die Flüssigkeit strömt entweder in dieselbe Richtung oder im Gegenstrom. Durch Auftrieb steigen die Blasen in der Flüssigphase auf und vermischen diese dabei. Es kann deshalb auf verschleißanfällige mechanische Rührelemente verzichtet werden. Die durch Blasenbewegung erzeugte Vermischung erfolgt zudem unter geringer mechanischer Beanspruchung, so dass in biochemischen Prozessen vorhandene Enzyme oder Mikroorganismen nicht geschädigt werden. Deshalb kommt den reagierenden Zweiphasenströmungen in Blasensäulen eine hohe verfahrenstechnische Bedeutung zu.

Sowohl die Auslegung als auch der optimale Betrieb industrieller Blasensäulen sind extrem anspruchsvolle Aufgaben. Da umfangreiche experimentelle Untersuchungen nur im Labor und im Technikumsmaßstab sinnvoll sind, werden Methoden benötigt, mit denen eine Übertragung der Zusammen-

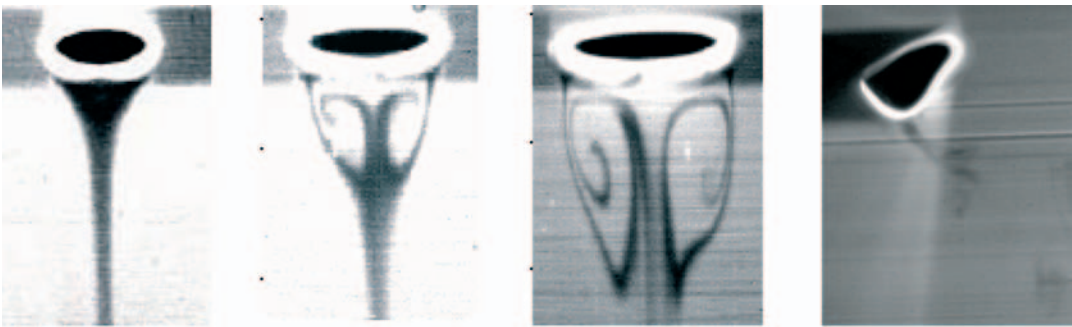


Bild 1: Experimentelle Aufnahmen des Sauerstoffgehaltes in Blasenschleppen bei unterschiedlicher Nachlauform. Die regellose Blase rechts ist verkleinert dargestellt. Quelle: Institut für Umweltverfahrenstechnik, Universität Bremen.

0.69	0.16	0	0	0	0
1	0.97	0.29	0	0	0
1	1	0.87	0.06	0	0
1	1	1	0.38	0	0
1	1	1	0.72	0	0

Bild 2: Beispiel einer möglichen Verteilung der Volumenanteilsfunktion in den Gitterzellen des Rechengebietes bei einer Volume of Fluid-Simulation.

hänge auf größere Maßstäbe möglich ist. Dieses so genannte Scaling Up ist notwendigerweise modellbasiert. Dabei spielen sich selbst einstellende Größen wie Gasgehalt und Strömungszustand sowie Form, Größe und Aufstiegsverhalten der Blasen eine wesentliche Rolle. Hinzu kommen lokale Phänomene auf Längenskala der Blasen und darunter wie Konzentrations- und Wirbelschleppen sowie starke Abhängigkeiten des übergehenden Stoffstromes von der Position auf der Blasenoberfläche. Tatsächlich stellt der Nachlauf einer einzelnen Blase eine Art Minireaktor dar: aus der Blase wird durch Stoffübergang einer der Reaktionspartner zur Verfügung gestellt,

der zweite Reaktand befindet sich in der Flüssigkeit und umströmt mit dieser die Blase. In der Nähe der Blasenoberfläche und in der Blasenschleppe kommen beide in Kontakt und reagieren miteinander. Die Blasenschleppe stellt dabei den Reaktionsraum dar. Abhängig von Größe und Aufstiegs geschwindigkeit der Blase stellen sich verschiedene Strömungsformen im Nachlauf der Blase ein, wie in Bild 1 gezeigt. Diese bewirken eine unterschiedliche Vermischung der Reaktanden. Die Güte der Vermischung und die Geschwindigkeit, mit der die Reaktionspartner vermischt werden, bestimmen die Ausbeute und die Qualität des Produktes.

An dieser Stelle setzen moderne numerische Simulationstechniken an, mit denen die Phasengrenzfläche in ihrer Form und Lage dreidimensional und unter Berücksichtigung ihrer Dynamik und Physikalität erfasst wird. Dies gelingt mit der „Volume of Fluid“-Methode, kurz VOF-Methode. Grundidee ist hier die implizite Erfassung der Grenzfläche zwischen flüssiger und gasförmiger Phase durch Bilanzierung des Volumenanteils der Flüssigkeit. Diese zusätzliche Volumenanteilsfunktion hat also den Wert 0 in Zellen, die ganz mit Flüssigkeit gefüllt sind und den Wert 1 in solchen, die vollständig in der Gasphase liegen. Dadurch können die unterschiedlichen Dichten

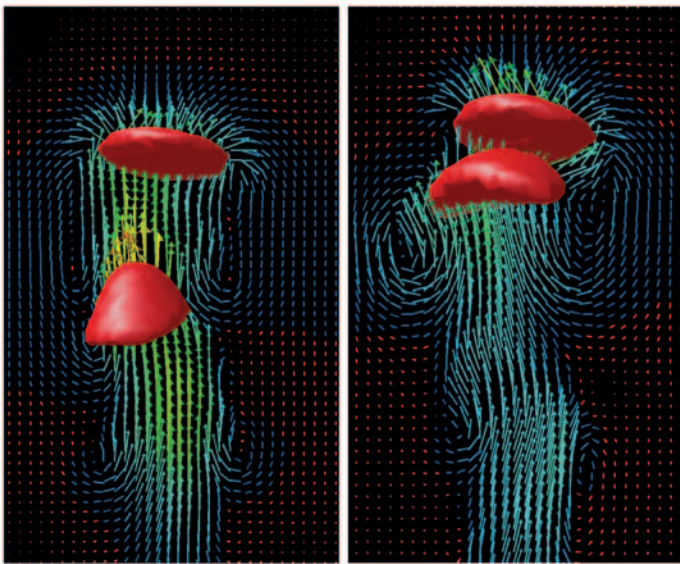


Bild 3: Direkte Numerische Simulation des gemeinsamen Aufstiegs zweier wackelnder Luftblasen mit Wirbelabstreifung. Die Farbkodierung gibt den Betrag der Geschwindigkeit wieder.

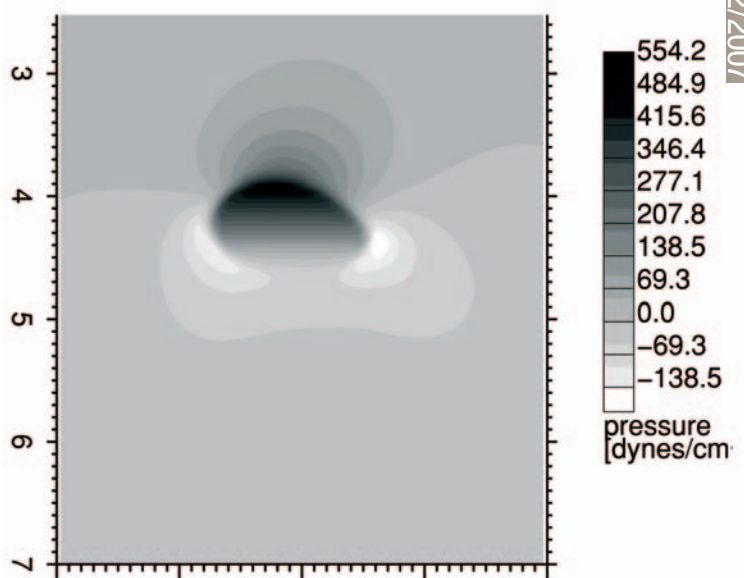


Bild 4: Berechnete Druckfelder um eine asymmetrisch verformte Blase bei Aufstieg in einem Schergeschwindigkeitsfeld.

ten und Viskositäten beider Fluide in der Strömungsberechnung berücksichtigt werden. In allen Zellen, die Phasengrenzfläche enthalten, besitzt die Volumenanteilsfunktion einen Wert zwischen 0 und 1. Bild 2 zeigt eine typische Verteilung der Werte. Aus der gesamten Verteilung der Volumenanteile können sowohl Lage und Orientierung der Phasengrenze als auch die Krümmung der Grenzfläche näherungsweise berechnet werden. Letzteres ist für eine physikalisch korrekte Simulation extrem wichtig, da die aus der Grenzflächenspannung resultierenden Kräfte proportional zur Krümmung sind. Diese Kräfte bewirken – ähnlich wie bei Seifenblasen – eine Mini-

mierung und dadurch Glättung der Grenzfläche. Kleine Blasen nehmen deshalb annähernd Kugelform an, werden mit wachsendem Durchmesser zunehmend ellipsoid bis die Blasen schließlich eine regellose, zeitlich variable Form annehmen.

In Kombination mit effizienten Rechentechniken und unter Einsatz paralleler Algorithmen gelingt durch Verwendung der VOF-Methode eine numerische Beschreibung der physikalisch-chemischen Vorgänge, die ohne vereinfachende Annahmen auskommt und alle auftretenden Strukturen erfasst. Man spricht dann von einer Direkten Numerischen Simulation. Solche Berechnungen bestätigen zu-

nächst die experimentelle Beobachtung, dass bereits einzelne Blasen hinsichtlich Form und Bewegungsbahnen alles andere als langweilig sind: sie können geradlinig vertikal aber auch schräg aufsteigen, zick-zackförmige Bahnen nehmen oder auf einer helikalen Kurve – wie bei einem DNA-Strang – aufsteigen. Gelegentlich bleiben Blasen sogar kurz stehen, bevor sie weiter aufsteigen – etwas, das nur im Zusammenspiel mit der Flüssigkeitsströmung zu erklären ist. Bei ihrem Aufstieg streifen größere Blasen an ihrer Unterseite regelmäßig Wirbel ab, die eine Zeit lang in der Flüssigkeit weiter bestehen und zur Vermischung beitragen, bis sie schließlich durch die innere

Reibung aufgezehrt werden; siehe Bild 3. All dies ist mathematisch noch nicht rigoros oder nur in Ansätzen verstanden, kann aber mittels numerischer Simulationen eingehend untersucht werden. Dabei werden lokale Informationen über Druck und Geschwindigkeiten im Umfeld und aus dem Inneren der Blase gewonnen, die experimentell überhaupt nicht zugänglich sind. Als Beispiel sei der Vorzeichenwechsel der Auftriebskraft genannt: Wenig verformte Blasen, die in einer Scherströmung aufsteigen, wandern in die Richtung der größeren Geschwindigkeit. Dies kehrt sich bei stärker verformten Blasen unerwartet um, wofür es keine einfache Er-

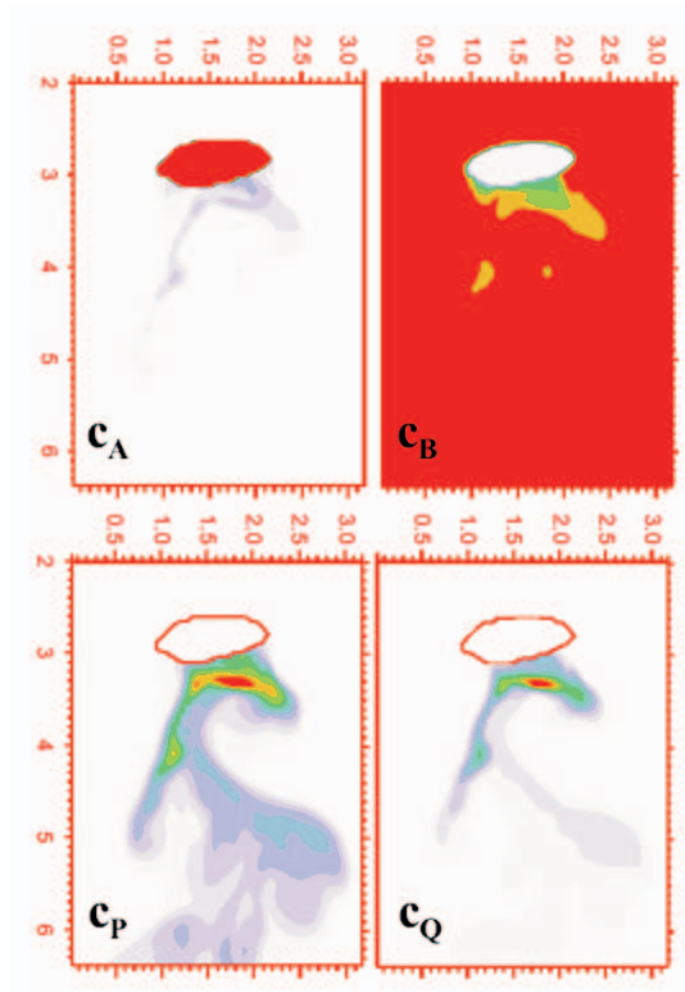


Bild 5: Simulierte Konzentrationsfelder im Umfeld einer formdynamischen Luftblase mit komplexer chemischer Reaktion. Die Übergangskomponente A reagiert mit B zum Produkt P, das wiederum mit A zum Nebenprodukt Q weiterreagiert.

klärung gibt. Tatsächlich zeigen numerische Berechnungen, dass nicht nur Druckkräfte ausschlaggebend sind, sondern auch ein komplexes Zusammenspiel zwischen asymmetrischer Verformung und Scherkräften; siehe Bild 4.

Durch Erweiterung der VOF-Methode um Transportgleichungen für die Konzentration chemischer Spezies ist auch die Simulation des Stoffübergangs in Gas-Flüssig-Strömungen mit anschließender chemischer Reaktion möglich. Insbesondere erlaubt dies erstmals die numerische Berechnung so genannter Stoffübergangskoeffizienten. Letztere geben die Rate an, mit der eine chemische Komponente über die

Grenzfläche ausgetauscht wird und bilden damit eine wesentliche Kenngröße zur Beurteilung der Effizienz des Kontaktapparates bei den zugrunde liegenden Stoffdaten und Betriebsbedingungen. Die Rechnungen bestätigen die experimentell gestützte Vermutung, dass offene Blasenschleppen mit Ablösung von Wirbeln zu einer Verbesserung des Stoffübergangs führen. Die in realen Systemen auftretenden chemischen Prozesse sind in der Regel sehr komplex mit einer Vielzahl beteiligter Spezies und ablaufender Reaktionen. Dabei sind die gewünschten Produkte oft Zwischenprodukte in einer ganzen Kette chemischer Umwandlungen, das heißt gleichzeitig auf-

tretende Folgereaktionen lassen die gewünschten Substanzen zu unerwünschten Nebenprodukten weiter reagieren; siehe Bild 5. Daher ist das Maß für die Güte solcher technisch-chemischen Prozesse neben dem Umsatz vor allem die Selektivität bezüglich des gewünschten Produktes. Das längerfristige Ziel dieser Forschungsarbeiten ist daher die direkte numerische Berechnung von Selektivitäten lokal im Umfeld einzelner Gasblasen, um daraus Hinweise für eine optimierte Prozess- und Reaktionsführung abzuleiten.

Diese Forschungsarbeiten finden im Rahmen eines Paketprojektes in enger Kooperation mit dem Institut für Thermody-

namik der Luft- und Raumfahrt der Universität Stuttgart sowie mit experimentell arbeitenden Gruppen statt. Zur numerischen Simulation wird der in Stuttgart entwickelte VOF-code FS3D (Free Surface 3D) eingesetzt, gemeinsam erweitert und weiterentwickelt.

www.mathcces.rwth-aachen.de/doku.php

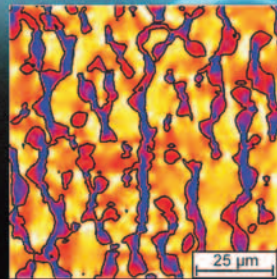
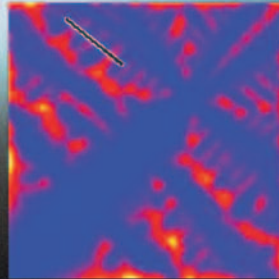
Autor:
Univ.-Prof. Dr.rer.nat. Dieter Bothe ist Inhaber des Lehrstuhls für Mathematik und Stellvertreter der Geschäftsführer des „Center for Computational Engineering Science“, kurz CCES.

microstructure evolution simulation software



Simulation of microstructure evolution in
technical alloys:

- solidification
- recrystallization
- grain growth
- solid state transformations
- coupling to thermodynamic / mobility data



www.micress.de
support@micress.de
www.access.rwth-aachen.de



Exzellenz braucht exzellente Partner!

Systemhaus SAR GmbH – Ihr Sun Microsystems Campus Reseller



Systemhaus SAR GmbH · Arnold-Sommerfeld-Ring 27 · 52499 Baesweiler
 Tel: 0 24 01-9 19 50 · Fax: 0 24 01-91 95 66 · E-Mail: sar@sar.de · www.sar.de · akademie.sar.de

Mathematik für Tropfen ist alles andere als trocken

D

Die Simulation von Strömungen in einer Flüssigkeit oder einem Gas ist durch die Fortschritte der Computertechnik und numerischen Methoden inzwischen zu einem zuverlässigen Werkzeug gewachsen, das aus den Entwicklungsabteilungen in der Industrie nicht mehr wegzudenken ist. Anders hingegen sieht es auf dem Gebiet von Mehrphasenströmungen aus, also zum Beispiel dem Aufsteigen von Gas- oder Öltropfen in Wasser. Hier sind die numerischen Verfahren noch nicht genügend ausgereift, um solche Probleme standardmäßig zu lösen. Eine Herausforderung stellt beispielsweise die Verfolgung der Phasengrenze dar, die die beiden Phasen Öl/Wasser oder Luft/Wasser voneinander trennt. Die Behandlung der Oberflächenspannung ist ein weiteres heikles Thema, das es in Zukunft zu lösen gilt.

Motiviert durch die Zusammenarbeit mit Ingenieuren im Rahmen des Sonderforschungsbereiches „Modellgestützte experimentelle Analyse kinetischer Phänomene in mehrphasigen fluiden Reaktionssystemen“ wird am Lehrstuhl für Numerische Mathematik Grundlagenforschung in diesem Bereich betrieben. Durch theoretische Untersuchungen werden neue Methoden entwickelt und in ein Software-Paket namens DROPS implementiert. Die Tauglichkeit der Algorithmen muss sich im Einsatz beweisen, wenn sie auf reale Zweiphasenprobleme der am Sonderforschungsbereich beteiligten Ingenieure angewandt werden. Der Nutzen liegt dabei auf beiden Seiten: Die Ingenieure können neue Erkenntnisse aus den Simulationen gewinnen, die Mathematiker wiederum Rückschlüsse ziehen, welche numerischen Komponenten weiterer Verbesserung bedürfen.

Im Rahmen des Sonderforschungsbereiches wird ein neuer methodischer Ansatz zur systematischen Modellierung kinetischer Phänomene in Mehrphasensystemen entwickelt, die so genannte Modellbasierte Experimentelle Analyse, kurz MEXA. Bislang werden zur Be-

urteilung von Modellkandidaten zumeist einige Simulationen des neuen Modells mit dem Computer durchgeführt und dann mit entsprechenden Messungen aus einem realen Experiment durch „scharfes Hinschauen“ miteinander verglichen. Der MEXA-Arbeitsprozess hingegen bringt die beiden Bereiche der Simulation und Messung durch die Formulierung und Lösung inverser Probleme zusammen und ermöglicht so eine objektive Bewertung unterschiedlicher Modellstrukturen. Bei der Lösung inverser Probleme wird aus Beobachtungen auf die Ursachen zurückgeschlossen. Diese Thematik spielt auch eine zentrale Rolle in der im Rahmen der Exzellenzinitiative gegründeten Graduiertenschule „Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science“, kurz AICES.

Eine Unteraufgabe dabei ist die numerische Simulation der betrachteten Zweiphasensysteme, welche in diesem Fall aus der Verfahrenstechnik stammen. Dies ist zum einen ein organischer

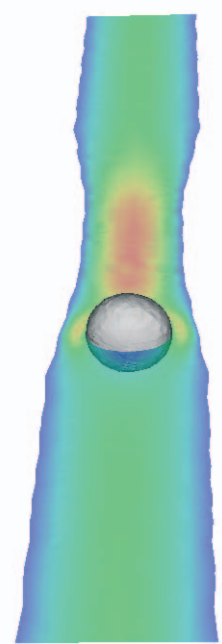


Bild 1: Einzeltropfen in einer Messzelle: links das reale Experiment, rechts die numerische Simulation.

Einzeltropfen in einer mit Wasser durchströmten Messzelle, an dem Stofftransport von der organischen in die wässrige Phase untersucht werden soll, siehe Bild 1. Solche Einzeltropfensysteme werden am Lehrstuhl für Thermische Verfahrenstechnik untersucht. Ein anderes Beispiel ist ein Rieselfilm, an dessen Phasengrenze Wärmeaustausch von der Flüssig- in die Gasphase stattfindet. Die Modellierung und Simulation von Transportvorgängen im Rieselfilm ist ein wichtiges Forschungsthema am Lehrstuhl für Wärme- und Stoffübertragung.

Numerische Simulation von Zweiphasenströmungen

Aus den Erhaltungssätzen für Masse und Impuls in den beiden Phasen erhält man die bekannten Navier-Stokes-Gleichungen mit einem zusätzlichen Term auf der Phasengrenze, der die Oberflächenspannung modelliert. Da die Phasengrenze mit der Strömung transportiert wird, ist ihre Position eine unbekannte und zu berechnende Größe. Die inter-

essanten Phänomene finden gerade an der Phasengrenze statt, daher ist es besonders wichtig, ihre Position möglichst genau zu verfolgen.

Solche mathematischen Modelle können mit der Standard-Software nicht realistisch simuliert werden, weil geeignete numerische Verfahren nicht zur Verfügung stehen. Die Entwicklung solcher Verfahren sowie die Implementierung in das Programmpaket DROPS ist ein Kernthema am Lehrstuhl für Numerische Mathematik. Bei der Implementierung ist die Parallelisierung ein wichtiger Aspekt. Die Entwicklung einer parallelen Version des DROPS-Paketes wird in enger Zusammenarbeit mit dem Lehrstuhl für Informatik 12 (Hochleistungsrechnen) durchgeführt.

Numerische Verfahren

Die allgemeine Vorgehensweise ist in Bild 2 dargestellt. Auf einem Ausgangsgitter werden die zu lösenden Differentialgleichungen diskretisiert. Dazu werden jedem Gitterpunkt Unbekannte zugeordnet und da-

Numerische Methoden zur Simulation von Zweiphasenströmungen

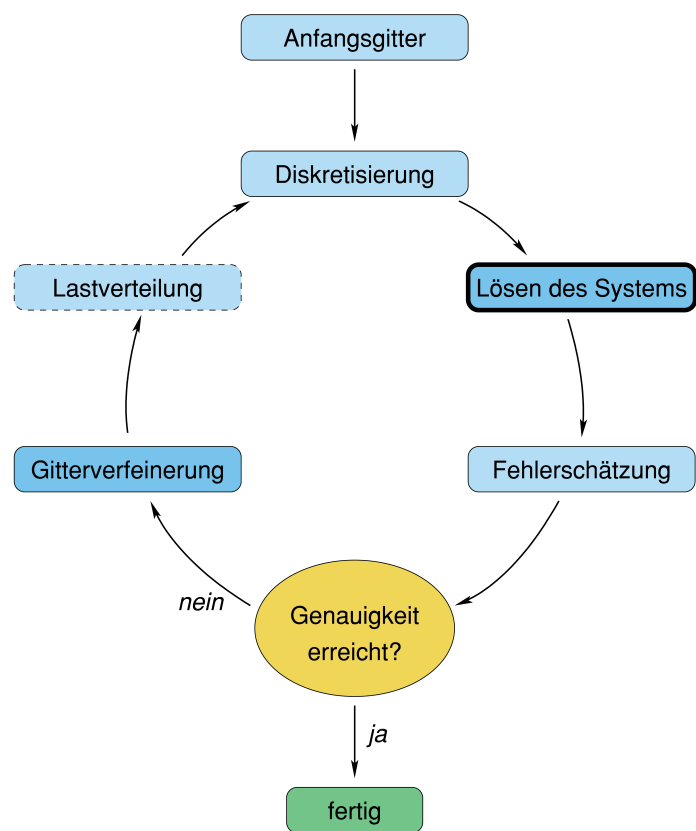


Bild 2: Adaptives Lösungsverfahren.

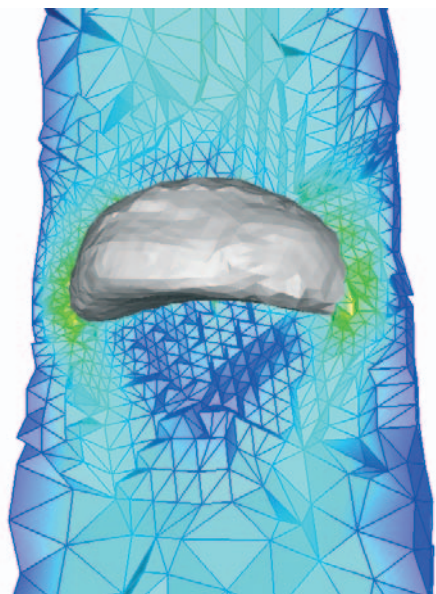


Bild 3: Lokal verfeinerte Gitter erhöhen die Auflösung an der Phasengrenze.

mit das unendlichdimensionale Problem auf ein endlichdimensionales zurückgeführt. Dabei entstehen große lineare Gleichungssysteme mit bis zu mehreren Millionen Unbekannten. Diese werden im nächsten Schritt mit iterativen Verfahren gelöst. Da die Lösungsverfahren typischerweise den Großteil der Rechenzeit ausmachen, liegt hier ein großes Potenzial zur Verbesserung von bekannten Methoden.

Die erhaltene Lösung kann nun mit Fehlerschätzern beurteilt werden, um die Bereiche zu lokalisieren, in denen die Genauigkeit noch zu gering ist. Im Falle von Zweiphasenströmungen möchte man eine hohe Auflösung an der Phasengrenze erreichen, weil dort die interessanten Phänomene stattfinden. Das Gitter wird dann in diesem Bereich durch einen Gitterverfeinerungsalgorithmus lokal verfeinert. Bild 3 zeigt ein solches angepasstes Gitter rund um einen Tropfen.

Da das Gitter nicht überall, sondern nur lokal verfeinert ist, können viele Unbekannte und

damit Rechenzeit eingespart werden. Gleichwohl kann die verbleibende Rechenlast einen einzelnen Computer schnell überfordern, wenn eine hohe Gitterauflösung erforderlich ist. Durch Parallelisierung muss die Rechenlast dann auf mehrere Prozessoren verteilt werden. Aus diesem Grund wird DROPS zurzeit parallelisiert, um zukünftig die Rechen- und Speicherkapazität des SunFire-Clusters am Rechen- und Kommunikationszentrum oder anderer Supercomputer nutzen zu können. Dabei wird das Gitter auf die verschiedenen Prozessoren verteilt, wie in Bild 4 zu sehen ist.

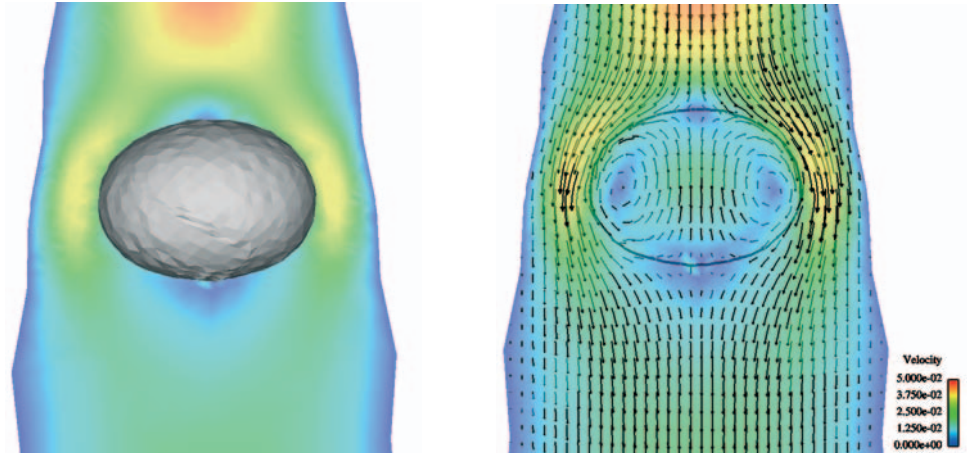
Anwendung

Bei der Untersuchung des erwähnten Einzeltropfens steigt der Tropfen aufgrund seiner geringeren Dichte im Gegenstrom des Wassers auf. Aufgrund der Verjüngung der in Bild 1 dargestellten Messzelle findet er dabei eine Gleichgewichtslage, in der er stehen bleibt und für Messungen zugänglich ist. Mit Hilfe von



Bild 4: Ein auf mehrere Prozessoren verteiltes Gitter der Messzelle. Jede Farbe steht für einen anderen Prozessor.

Bild 5: DROPS-Simulation der Gleichgewichtslage des Tropfens. Links die Tropfenform, rechts das Geschwindigkeitsfeld.



NMR, kurz für Nuclear Magnetic Resonance, wird am Lehrstuhl für Makromolekulare Chemie die Tropfenform und Geschwindigkeitsverteilung innerhalb des Tropfens gemessen. Zur Simulation dieser Gleichgewichtslage wurden die numerischen Methoden aus DROPS mit Erfolg auf dieses Zweiphasensystem angewendet. Ein Ergebnis ist in Bild 5 dargestellt.

Als nächster Schritt soll auch der Stofftransport vom Tropfen in die wässrige Phase sowie die Anlagerung von Stoffen auf der Phasengrenze mit DROPS simuliert werden. Die entsprechenden Gleichungen für die Konzentration in den Fluiden sowie auf der Phasengrenze werden zurzeit implementiert. Eine interessante Modellierungsfrage ist, wie die Konzentrationsverteilung auf der Phasengrenze die Oberflächenspannung beeinflusst. Die oben beschriebene MEXA-Vorgehensweise soll diese Frage beantworten helfen – im Wechselspiel von NMR-Messung und DROPS-Simulation.

www.igpm.rwth-aachen.de/DROPS

Autoren:

Dipl.-Math. Sven Groß ist Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Numerische Mathematik.
Univ.-Prof. Dr.rer.nat. Arnold Reusken ist Inhaber des Lehrstuhls für Numerische Mathematik.



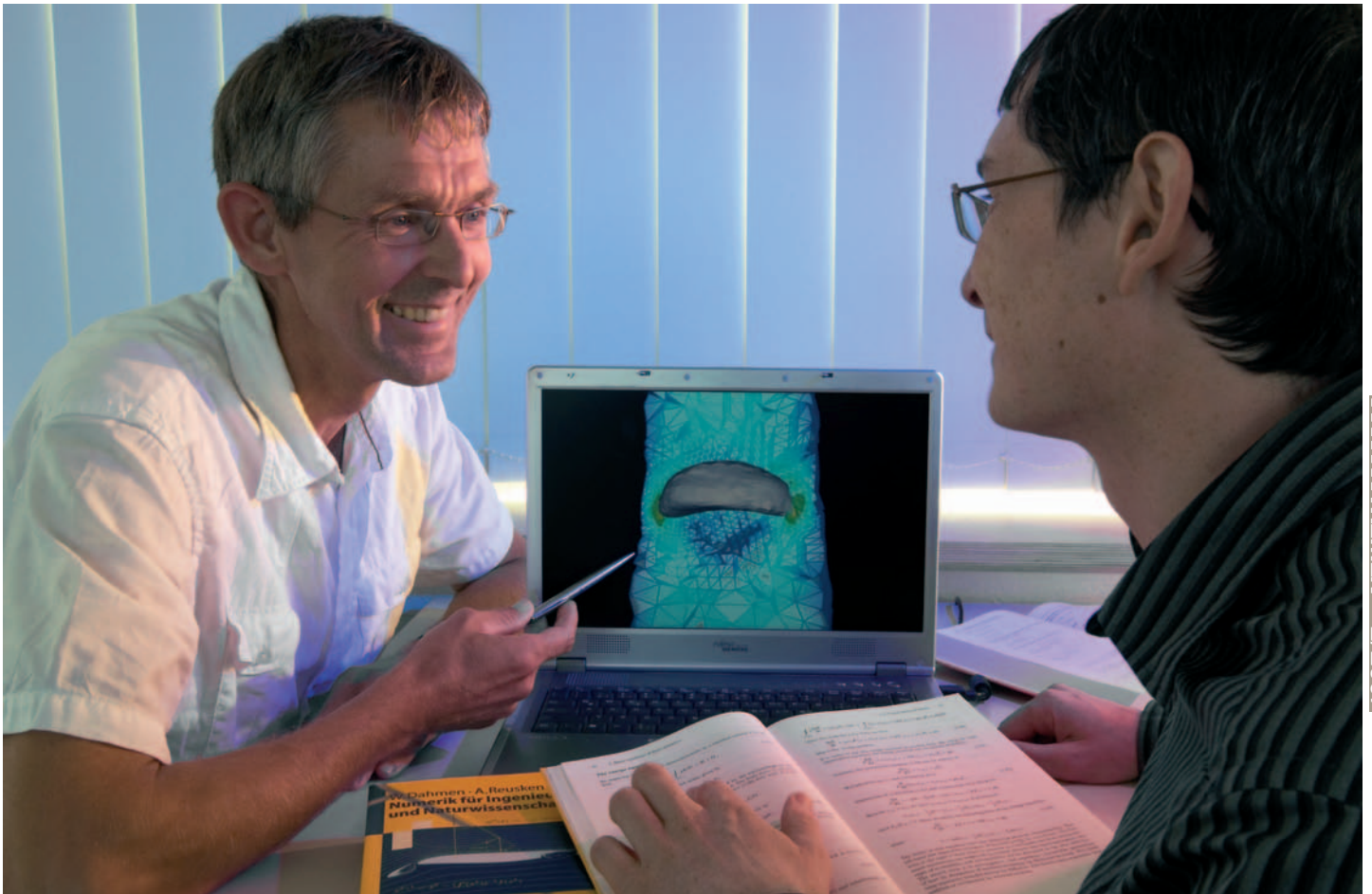


Bild 6: Wissenschaftler des Lehrstuhls für Numerische Mathematik diskutieren die Ergebnisse einer numerischen Simulation eines aufsteigenden Öltropfens in Wasser, die mit dem Paket DROPS berechnet wurden.
Fotos: Peter Winandy

Welchen Einfluss besitzen Modellparameter?

Wie bewegt sich Wasser, wenn man es in einer sich drehenden Schüssel herumschwenkt? Jeder von uns hat dieses „Experiment“ sicher schon einmal vollzogen, ohne aber den Effekt von Änderungen im „Versuchsaufbau“ auf das Verhalten des Wassers wirklich vorhersagen zu können. Eine solche Vorhersage erlauben beispielsweise die Grundgleichungen der Strömungsmechanik, die nach dem französischen Physiker Claude Navier (1785-1836) und dem irischen Mathematiker George Stokes (1819-1903) benannt sind. Diese Gleichungen beschreiben die Geschwindigkeit einer Strömung und die Verteilung des Drucks in Flüssigkeiten und Gasen.

Nach der Modellierung eines zu untersuchenden Problems müssen robuste und effiziente numerische Verfahren zur Lösung der kontinuierlichen Gleichungen gefunden werden. Hierzu wird mit einer so genannten Diskretisierung die Lösung einer kontinuierlichen Gleichung mit Hilfe einer endlichdimensionalen Konstruktion approximiert. Typische Vertreter von solchen Diskretisierungstechniken sind zum Beispiel die Methoden der finiten Elemente oder finiten Volumina sowie die Randelement-Methode. Letztendlich entsteht schließlich unter Wahl von geeigneten Algorithmen und Datenstrukturen sowie softwaretechnischen Umsetzungsstrategien ein Computermodell zur Berechnung von technisch-naturwissenschaftlichen Vorgängen. Ein Beispiel ist das Softwarepaket FLUENT™, das die Navier-Stokes-Gleichungen auf Basis der Methode der finiten Volumina löst. Es besteht aus einer Folge von etwa 1,6 Millionen Zeilen von Befehlen der Programmiersprachen Fortran 77, Fortran 90 und C. Bild 1 zeigt in den ersten beiden Spalten die Ergebnisse der numerischen Simulation einer Strömung von Wasser und Luft in einer sich drehenden Schüssel mittels FLUENT™.

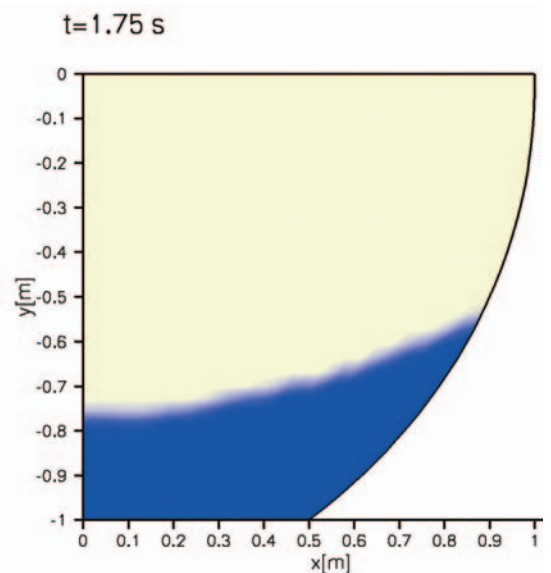
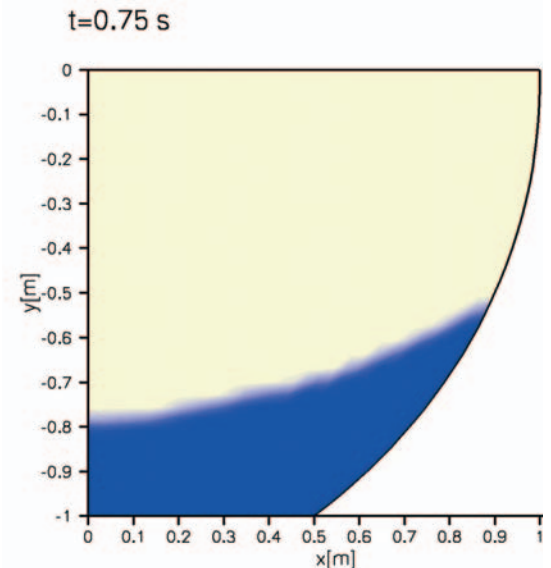
Die im Allgemeinen recht aufwändige Erstellung eines Computermodells ist aber typischerweise nur der erste Schritt.

Zum einen haben Computermodelle meistens Modellparameter, die man mittels einer so genannten Parameterschätzung anpassen muss, um zum Beispiel experimentelle Messdaten bestmöglich zu replizieren und so die Gewissheit zu haben, dass beim Ändern von durch den Nutzer beeinflussbaren Größen wie der Gestalt der Schüssel oder der Viskosität der Flüssigkeit die Vorhersage der Computersimulation gültig ist. Auch ist es wichtig herauszufinden, welche Modellparameter das Verhalten des Computermodells am meisten beeinflussen, oder ob es Abhängigkeiten zwischen den Parametern gibt. Da man viele Parameter nicht hundertprozentig genau messen kann, ist auch die Frage wichtig, wie das nächste Experiment geplant ist, um die Unsicherheit in den Modellparametern zu minimieren.

Verfahren zur Beantwortung dieser Fragestellungen beruhen wesentlich auf der Verfügbarkeit von Änderungsraten, die auch Ableitungen genannt werden. Ableitungen beantworten die Frage nach der Änderung einer Größe bei Variation eines Parameters. Mathematisch ist die Ableitung einer Funktion f in Bezug auf einen Parameter x definiert als der Grenzwert von $(f(x+h)-f(x))/h$, wobei die Schrittweite h gegen Null geht. Am Beispiel der mit Wasser gefüllten, sich drehenden Schüssel interessiert man sich zum Beispiel für den Einfluss eines Modellparameters, der die Turbulenz der Strömung im Kontext des so genannten k - ϵ -Turbulenzmodells beschreibt. In mathematischer Notation wird hier die Ableitung $\partial u / \partial C_{1\epsilon}$, also die Änderung des Geschwindigkeitsfeldes u mit Variation des Turbulenzparameters $C_{1\epsilon}$ gesucht. Die Schwierigkeit besteht nun darin, dass die Geschwindigkeit u nicht als Formel in Abhängigkeit des Modellparameters $C_{1\epsilon}$ darstellbar ist, sondern FLUENT™ nach Eingabe eines Wertes für den Turbulenzparameter $C_{1\epsilon}$ die resultierende Geschwindigkeit u berechnet. Numerisches Differen-

zieren bietet in diesem Falle die Möglichkeit, die Ableitung $\partial u / \partial C_{1\epsilon}$ durch mehrfaches Aufrufen des Programms FLUENT™ mit leicht geänderten Werten für $C_{1\epsilon}$ zu berechnen. Allerdings handelt es sich dabei lediglich um eine Approximation, deren Güte stark von der gewählten Perturbation in $C_{1\epsilon}$ vergleichbar der Schrittweite h abhängt und im besten Fall die Hälfte der signifikanten Ziffern der Vorwärtsrechnung als Genauigkeit erreichen kann. Hier bieten Techniken des so

genannten Automatischen Differenzierens Abhilfe. Dabei wird ein Computerprogramm durch ein Transformationswerkzeug in ein neues Computerprogramm transformiert, das die gewünschten Ableitungen berechnet. Am Lehrstuhl für Informatik 12 (Hochleistungsrechnen) werden im Rahmen des Sonderforschungsbereichs „Modellgestützte experimentelle Analyse kinetischer Phänomene in mehrphasigen fluiden Reaktionssystemen“ Techniken des Automatischen Differenzierens ent-



Bewertung und Auslegung von Computermodellen durch Automatisches Differenzieren

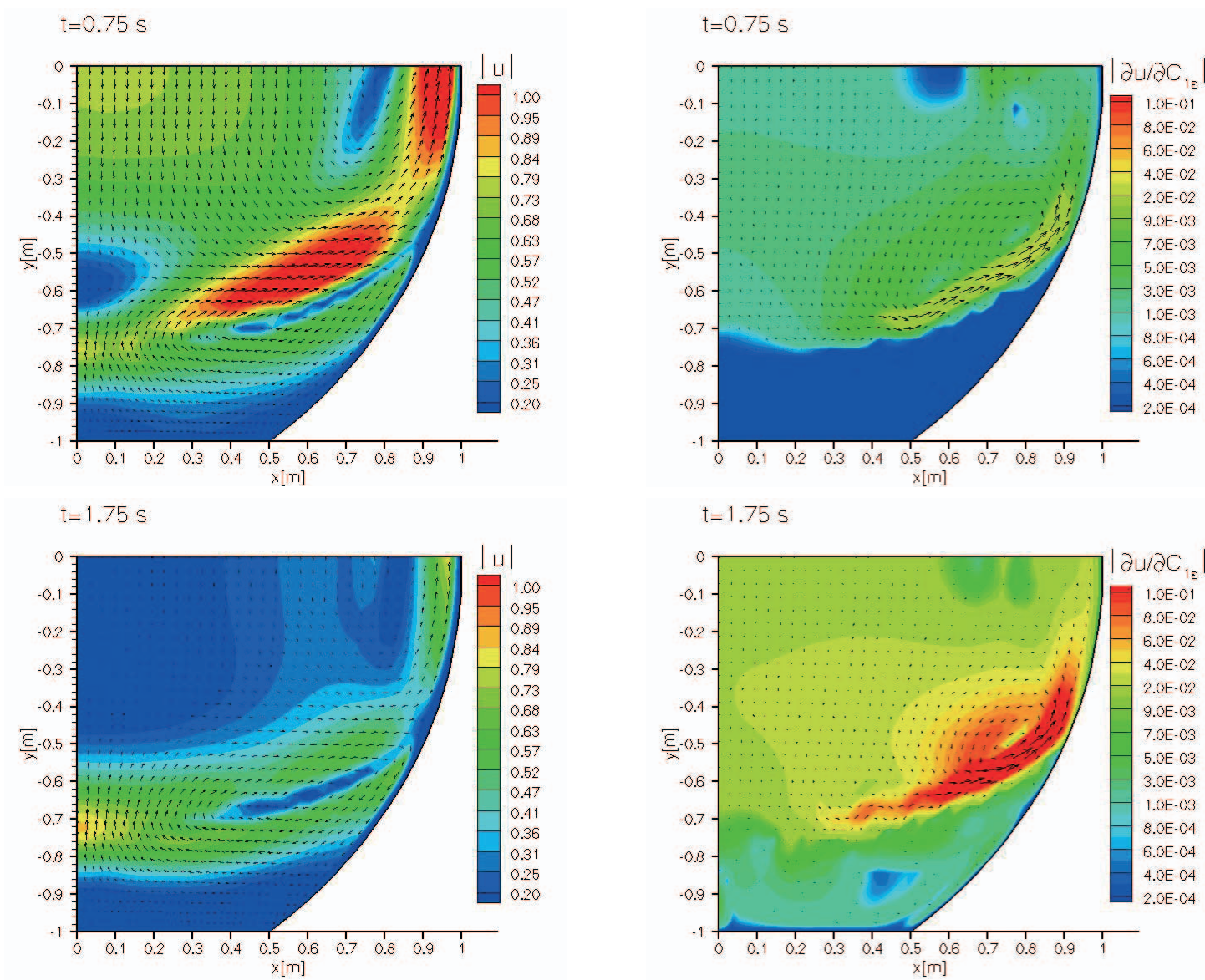


Bild 1: Ergebnisse der numerischen Simulation von Wasser und Luft in einer rotierenden Schüssel zu den Zeitpunkten $t=0.75\text{ s}$ (oben) und $t=1.75\text{ s}$ (unten). Die Spalten zeigen

(links) den Volumenanteil mit der Farbkodierung blau für Wasser und weiß für Luft. Die mittlere Spalte zeigt die Strömungsgeschwindigkeit, die rechte Spalte die Sensitivität

der Strömungsgeschwindigkeit bezüglich eines Modellparameters mit jeweils der Farbkodierung rot für hohe und blau für niedrige Werte.

wickelt und angewendet. Das Programm FLUENT™ konnte mit dem Software-Werkzeug zum Automatischen Differenzieren ADIFOR erfolgreich in eine „differenzierte Version“ transformiert werden, die aus etwa 2,2 Millionen Programmzeilen besteht. Die letzte Spalte in Bild 1 zeigt die so gewonnenen Ableitungen des Geschwindigkeitsfeldes nach dem Turbulenzparameter. Für den Zeitpunkt $t=1.75\text{ s}$ erkennt man an der roten Farbe beispielsweise deutlich, dass dieser Turbulenz-

parameter den größten Einfluss auf die Geschwindigkeit im äußeren Schüsselbereich knapp oberhalb der Wasseroberfläche besitzt. Aus Sicht der Informatik handelt es sich beim Automatischen Differenzieren um eine Programmtransformation. Bild 2 stellt schematisch den Aufbau des am Lehrstuhl für Informatik 12 (Hochleistungsrechnen) entwickelten Werkzeugs ADiMat dar. Dieses Werkzeug implementiert Automatisches Differenzieren für Programme in der

Programmiersprache MATLAB, die besonders im technisch-wissenschaftlichen Bereich breite Verwendung findet. Ein gegebenes MATLAB-Programm wird von ADiMat unter Einbeziehung von gewissen Verarbeitungsparametern zunächst eingelesen, in eine interne Repräsentation umgewandelt und dann analysiert, wobei zusätzliche Datenstrukturen angelegt werden, um diese Information zu speichern. Auf Basis dieser strukturierten Darstellung des Programms werden gewisse

Programmkonstrukte umgeschrieben, welche für die anschließend folgende Ableitungsberechnung problematisch wären. In diesem Kernschritt wird die Kettenregel der Differentialrechnung auf diese interne Repräsentation angewendet, wobei über eine Datenbasis die Ableitungsregeln für Elementarfunktionen von MATLAB, zum Beispiel Lösung linearer Gleichungssysteme, zur Verfügung gestellt werden. Nach einer Optimierung wird schließlich ein neues MATLAB-

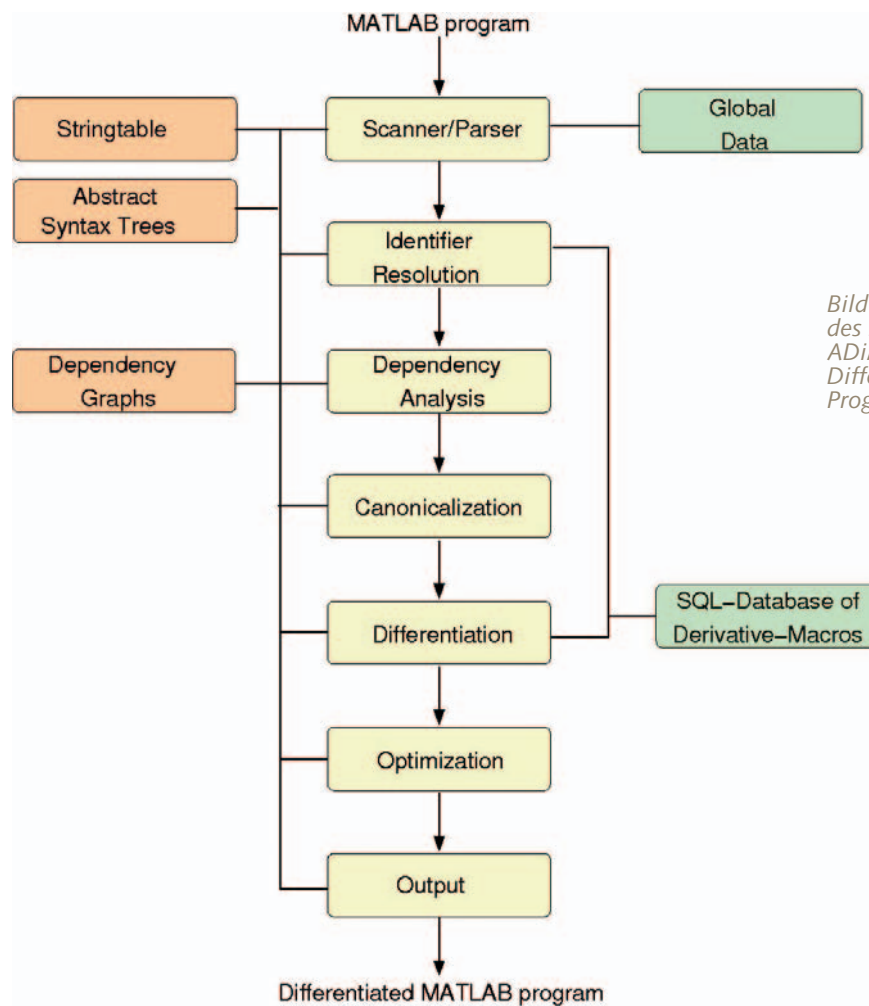


Bild 2: Schematischer Aufbau des Software-Werkzeugs ADiMat zum automatischen Differenzieren von MATLAB-Programmen.

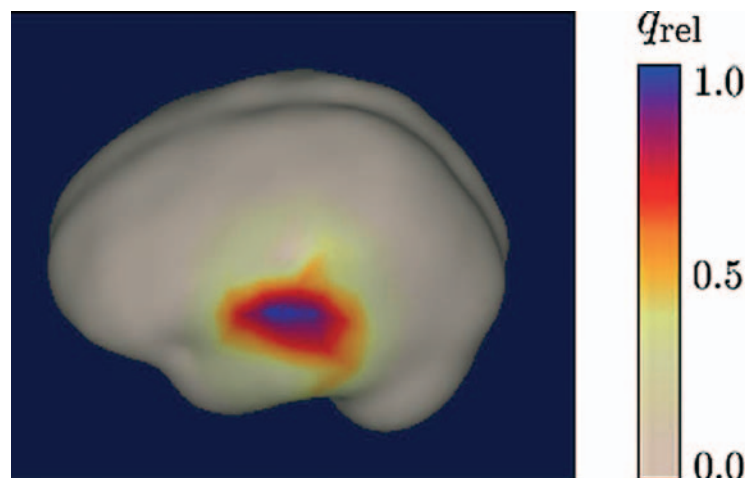


Bild 3: Lokalisation abnormer Hirnaktivitäten.

Programm mit der Funktionalität der Ableitungsberechnung erzeugt.

Die Kettenregel ist assoziativ und erlaubt bei einem nicht-trivialen Code viele mögliche Anwendungsszenarien, die sich nicht im berechneten Ergebnis, wohl aber im hierfür benötigten Rechen- und Speicherbedarf unterscheiden. Algorithmen, welche unter Einbeziehung von Information über den zugrundeliegenden Quellcode hier gute Transformationsstrategien berechnen, sind mit eines der Kernstücke von Werkzeugen des Automatischen Differenzierens. Aktuelle Forschungsarbeiten befassen sich mit der Transformation von parallelen Programmen und der Ausnutzung

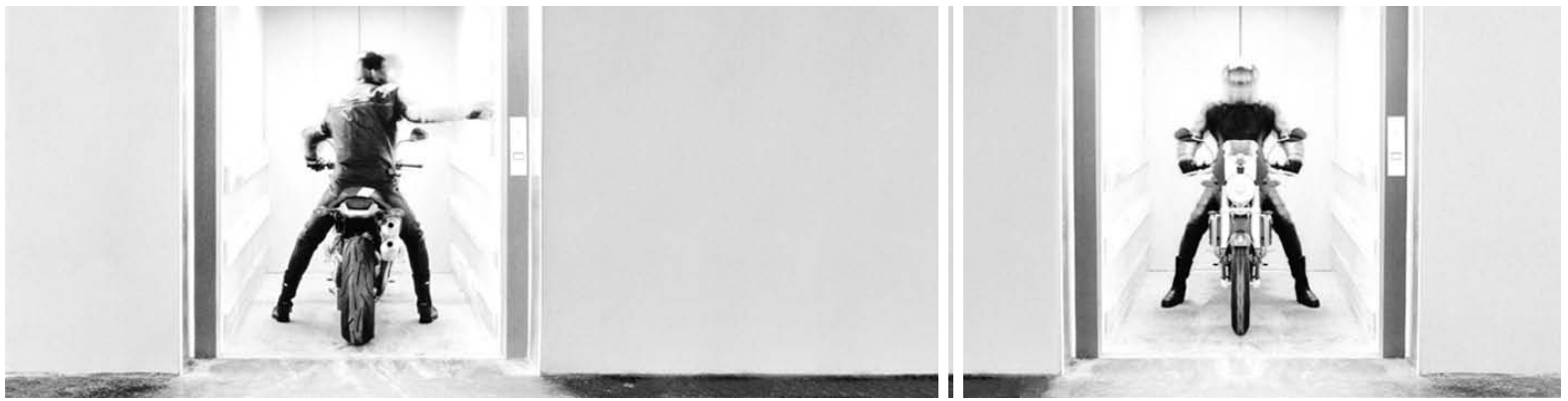
von Parallelismus in den generierten Programmen, da parallele Programme aufgrund des nachhaltigen Trends zu Parallelarchitekturen, zum Beispiel mit so genannten multi-core Chips, zukünftig eher die Regel als die Ausnahme sein werden. Abschließend sei eine Anwendung des Automatischen Differenzierens in der Medizininformatik erwähnt. Magnetoenzephalographie ist ein nicht-invasives Verfahren zur Messung des Magnetfeldes, das durch die neuronale Aktivität des menschlichen Gehirns verursacht wird. Die sehr präzisen Messungen werden durch Sensoren vorgenommen, die an einem helmartigen Körper angebracht sind. Ziel der neurologi-

schen Untersuchungen ist es, diejenigen Hirnregionen innerhalb des Kopfes zu bestimmen, die ein Magnetfeld außerhalb des Kopfes verursachen. Aus der beobachteten Wirkung, dem Magnetfeld im Außenraum des Kopfes, wird auf dessen Ursache, der neuronalen Aktivität im Innenraum des Kopfes, zurückgeschlossen und abnorme Aktivitäten, die zum Beispiel durch einen Hirntumor verursacht werden, identifiziert. Bild 3 zeigt die akkurate Lokalisation von neuronaler Aktivität mit Hilfe der BESATM-Software unter Einbeziehung von mittels Automatischen Differenzierens berechneten Gradienten.

www.sc.rwth-aachen.de

Autoren:

Univ.-Prof. Christian H. Bischof, Ph.D., ist Inhaber des Lehrstuhls für Informatik 12 (Hochleistungsrechnen) und Leiter des Rechen- und Kommunikationszentrums. Privatdozent Dr.-Ing. H. Martin Bucker ist Akademischer Oberrat am Lehrstuhl für Informatik 12 (Hochleistungsrechnen).



Schindler stands for Mobility. Mobility needs Talents.
Talent today. Leader tomorrow.
Launch your long-term career at Schindler as a:

Schindler Group Talent (m/f)

Schindler moves more than 700 million people a day around the world - with elevators, escalators and innovative mobility solutions. Nearly 40,000 employees in over 100 subsidiaries on all continents are behind this success.

Mobility is a way of thinking

As a Group Talent in our three stages Career Development Program you can expect a starting position in interesting functions within Schindler Germany. In the first two years you will have the unique opportunity from day one to experience the fascination of the elevator business, supporting senior managers in running their daily business, contributing to projects or assuming project responsibility yourself. As you succeed to advance to stage two and three, you will become more and more operational, assuming growing leadership responsibility including a mandatory assignment abroad. The goal is to bring you up to speed within six years to take one of our key management positions.

Mobility needs you

Our career program requires you to be passionate for our customers and people, to be team oriented and to have a burning desire to develop your skills. You will qualify for our ambitious program, if you can show:

- Excellent academic credentials (master degree - magna cum laude from a reputed university, preferably in engineering or business administration)
- Fluent in spoken und written German and proficiency in English, ideally in combination with other European languages
- MS office literacy; SAP know how would be an advantage
- Achievement orientation and ambition to lead
- Mind and actions with strategic focus
- Proven extra-curricula activities
- Mindset to be internationally mobile

For current job offers join our website!

Do you want to move the future with us? If so, we would like to meet you, and look forward to receiving your complete application documents.

Schindler Deutschland Holding GmbH
Human Resources / Yvonne Braun
Ringstrasse 54, 12105 Berlin
Telephone 030/7029 2637
Bewerbung@de.schindler.com

www.schindler.com



Schindler

Geometrieverarbeitung für die numerische Simulation

Eine der wichtigsten Voraussetzungen für die zuverlässige und effiziente numerische Simulation beispielsweise von Strömungs- oder Deformationsprozessen ist die Verfügbarkeit von qualitativ hochwertigen 3-D-Modellen. Durch die ständig steigende Leistungsfähigkeit der Berechnungsalgorithmen sowohl auf der Hardware- als auch auf der Software-Ebene können dabei immer detailliertere 3-D-Modelle eingesetzt werden. Während aber heutzutage die eigentliche Simulationsrechnung weitgehend automatisiert ist, müssen bei der Erzeugung von digitalen 3-D-Modellen immer noch viele Schritte manuell durchgeführt werden. Dies führt zu Anwendungsszenarien, in denen für die Vor- und Nachbereitung der Simulation mehr (Kosten-) Aufwand betrieben werden muss als für die eigentliche Berechnung.

Die geometrischen Rohdaten für die Generierung von 3-D-Modellen stammen typischerweise aus CAD-Systemen oder sie resultieren aus der direkten Vermessung von realen Objekten, beispielsweise mittels 3-D-Laserscanner oder medizinischer Bildgebung. In jedem Fall werden sie zunächst in eine mathematische Flächen-Repräsentation konvertiert, die sich besonders gut für Simulationsberechnungen eignet. Diese Repräsentation besteht aus einer großen Zahl kleiner Dreiecke oder Vierecke, mit denen eine gegebene Oberfläche beliebig genau angenähert werden kann. Der Vorteil dieser Repräsentation als Polygon-Netz besteht darin, dass selbst extrem komplexe Formen wie eine Auto-Karosserie oder ein menschliches Gehirn durch sehr einfache Elemente im Rahmen der vorgegebenen Genauigkeitsanforderungen dargestellt werden können. Steigende Anforderungen können durch eine erhöhte Anzahl von Polygonen befriedigt werden, ohne dass der Rechenaufwand überproportional wächst. 3-D-Modelle mit einer Million Polygone und mehr sind in heutigen Anwendungen keine Seltenheit.

Während die einfache Umwandlung der Rohdaten in ein Polygon-Netz in der Regel keine großen Schwierigkeiten bereitet, liegt die Problematik darin, bestimmte vorgegebene Qualitätsanforderungen zu erfüllen. Diese Anforderungen beziehen sich beispielsweise auf die Form der einzelnen Polygone, möglichst gleichseitig oder rechteckig, auf die Anordnung und Ausrichtung der Polygone sowie auf die Konsistenz der Daten, keine Löcher oder Selbst-durchdringungen.

Die Konsistenz eines Polygon-Netzes ist notwendig, damit das Netz überhaupt ein geschlossenes Objekt mit einer wohldefinierten Innen- und Außenseite beschreibt. Obwohl die Forderung nach Konsistenz

offensichtlich ist, erfüllen die meisten geometrischen Modelle diese Eigenschaft zunächst nicht. Die Gründe hierfür liegen in Rechenungenauigkeiten beispielsweise bei Schnittberechnungen oder im Auftreten von Messungenauigkeiten. Neuere Methoden zur „Reparatur“ von Polygon-Netzen, das heißt Methoden zur Herstellung der Konsistenz, greifen auf so genannte volumetrische Darstellungen zurück. Hierbei wird der Raum in kleine Zellen, die Voxel, unterteilt. Auf der Basis einer Reihe von geometrischen Regeln wird dann für jede Zelle bestimmt, ob sie im Inneren oder außerhalb des Objektes liegt. Aus der Voxel-Darstellung kann anschließend ein konsistentes Polygon-Netz extrahiert werden.

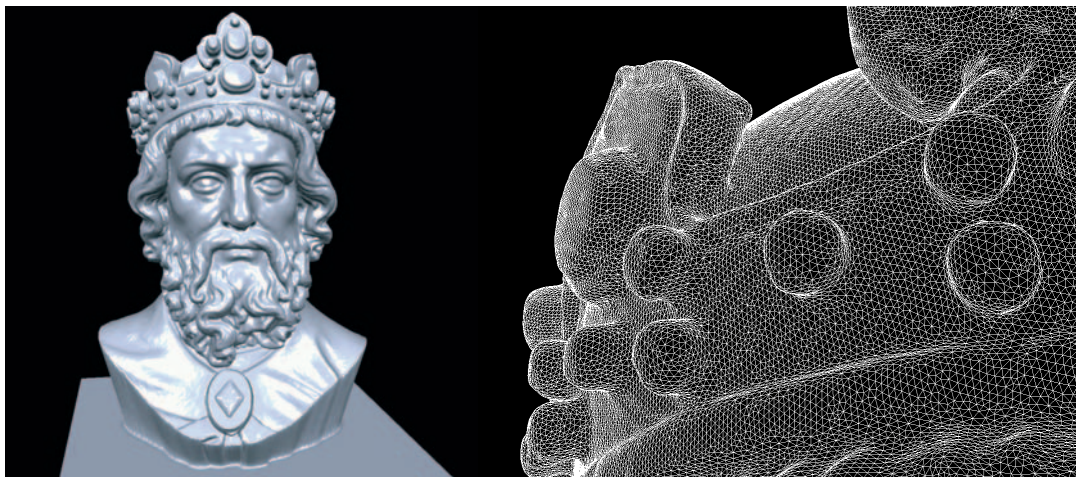


Bild 1: Digitales 3-D-Modell einer Karlsbüste mit etwa 1,5 Millionen Dreiecken.

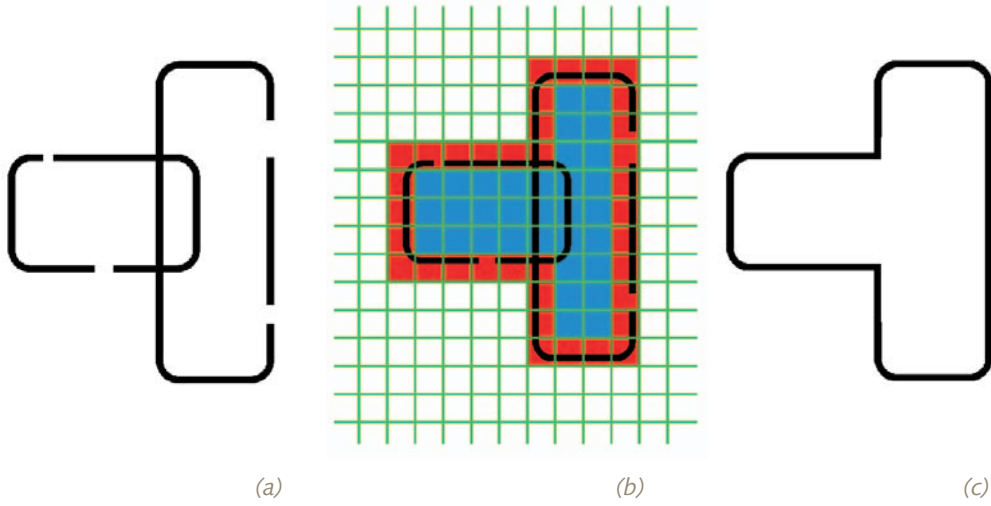


Bild 2: 2-D-Beispiel der Modell-Reparatur: Ausgehend von einer inkonsistenten Beschreibung (a) wird ein volumetrisches (Voxel-) Modell erzeugt (b), das jedem Voxel einen Status „innen“, „außen“ oder „Oberfläche“ zuordnet. Aus dem Voxel-Modell wird dann wieder ein konsistentes Polygon-Netz extrahiert. (c)

Nachdem die Konsistenz sichergestellt ist, können weitere Optimierungsalgorithmen angewendet werden, um die Qualität der einzelnen Polygone zu verbessern. Hierbei sind zum Beispiel Dreiecke mit schlechtem Seitenverhältnis oder großen Innenwinkeln zu eliminieren, da diese zu schlecht konditionierten Berechnungen führen.

Über die geometrische Qualität einzelner Polygone hinaus ist deren Orientierung und Anordnung wichtig für die Gesamtqualität des 3-D-Modells. Hierbei kommt zum Tragen, dass durch die richtige Anordnung der Polygone bei gleicher Anzahl von Elementen eine deutlich verbesserte Approximation erreicht werden kann.

Dieser Effekt basiert zum einen darauf, dass durch eine adaptive Vernetzung in flachen Bereichen der Geometrie relativ große Polygone eine hinreichend gute Approximation liefern und dadurch Elemente eingespart werden können. Zum anderen können scharfe Kanten eines Objektes nur dann korrekt abgebildet werden, wenn sie exakt mit den Kanten zwischen den Polygonen zusammenfallen.

Um alle diese Verarbeitungsschritte zu automatisieren, sind Algorithmen notwendig, die die geometrische Struktur des Eingabemodells analysieren und die Vernetzung entsprechend steuern. Unter dem Begriff der „diskreten Differentialgeometrie“ sind in den letzten

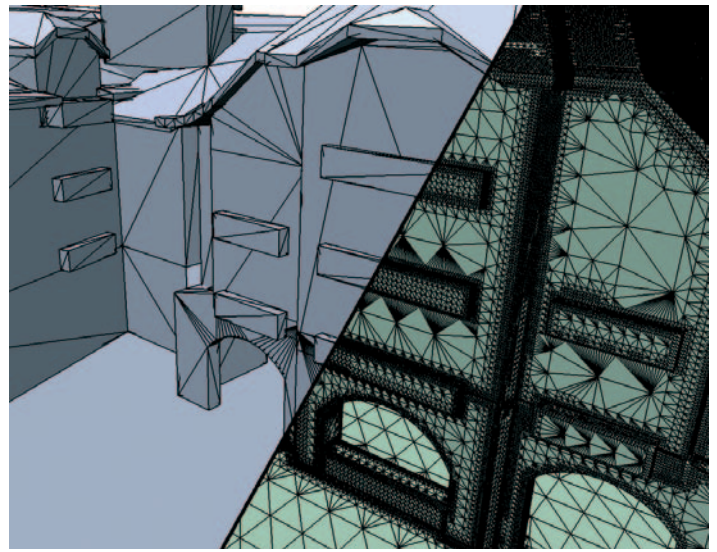


Bild 3: Beispiel eines 3-D-Modells vor (links) und nach (rechts) der Reparatur.

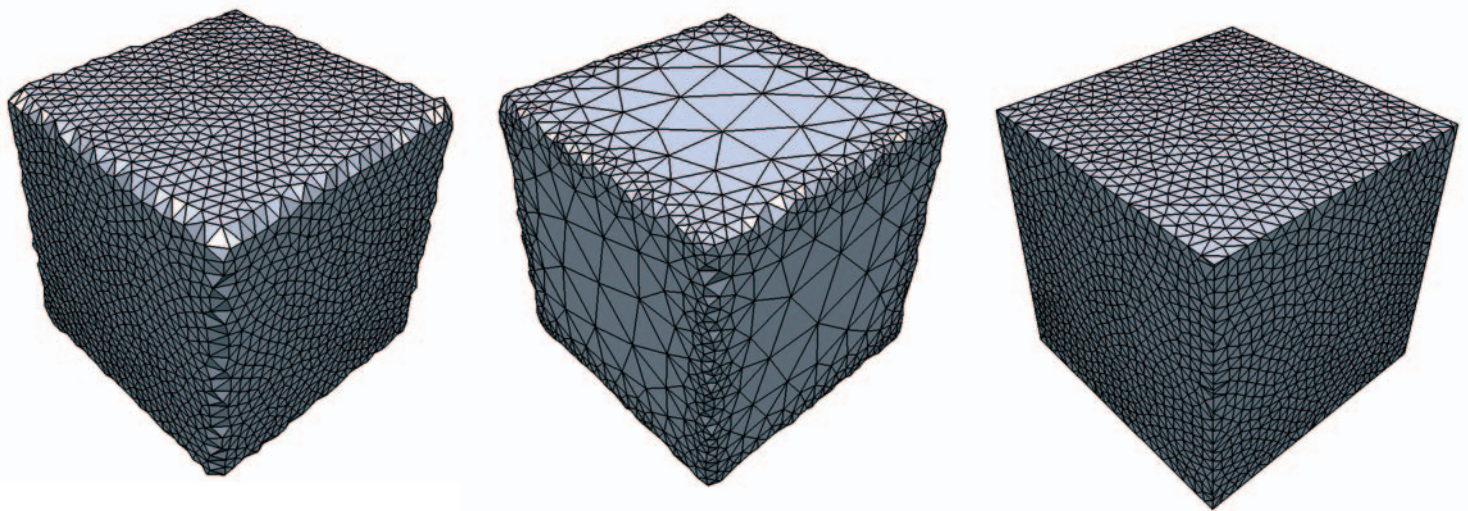


Bild 4: Für die uniforme Vernetzung (links) wird nur die Form der einzelnen Dreiecke optimiert. Bei der adaptiven Vernetzung (Mitte) wird die Größe der Dreiecke an die lokale Oberflächenkrümmung angepasst. Zur Erhaltung scharfer Kanten müssen die Polygone an den Objektkanten ausgerichtet werden (rechts).

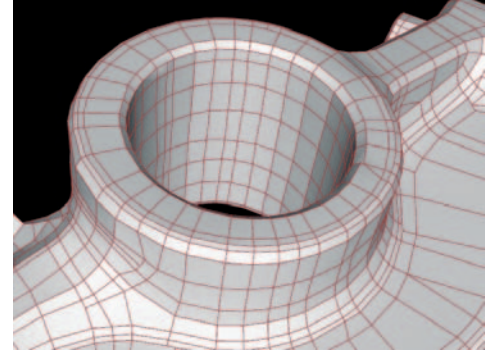
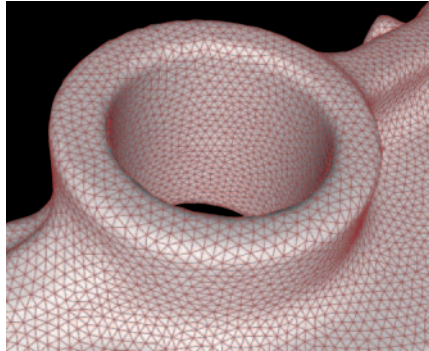
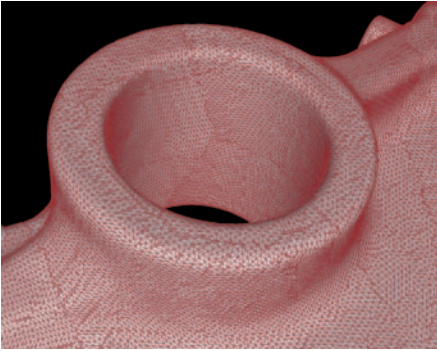


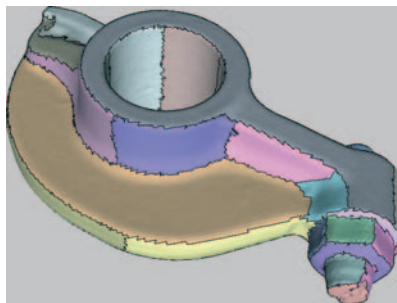
Bild 5: Aus den Rohdaten (links) können optimierte Polygon-Netze erzeugt werden, indem die Form einzelner Elemente verbessert wird (Mitte). Durch Ausrichtung der Polygonkanten an den Krümmungsrichtungen entstehen Netze, die optimal an die Struktur der zugrunde liegenden Geometrie angepasst sind (rechts).

Jahren innovative Methoden entwickelt worden, die es erlauben, geometrische Konzepte wie Krümmungen oder Hauptkrümmungsrichtungen auf Polygon-Netze zu übertragen. Mit der so gewonnenen Information kann die Größe der Polygone an die lokale Krümmung angepasst werden und die Orientierung der Polygonkanten an die Krümmungsrichtungen.

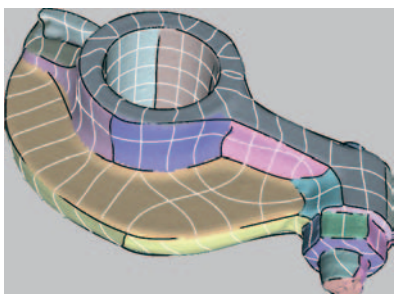
Soll die Simulation zur Formoptimierung eingesetzt werden, zum Beispiel zur Optimierung des Luftwiderstandes, müssen verschiedene Varianten der Eingabegeometrie miteinander verglichen werden. In den meisten Anwendungen müssen diese Varianten explizit modelliert werden und dann jede für sich gemäß der obigen Prozedur in ein Polygon-Netz konvertiert werden. Um die Effizienz und die Flexibilität eines Simulationssystems zu steigern, werden daher Verfahren benötigt, mit denen Form-Varianten direkt aus einer Polygon-Repräsentation generiert werden können. Darüber hinaus sollten diese Varianten idealerweise direkt durch die Simulation gesteuert werden, um einen simulationsgetriebenen Optimierungsprozess zu realisieren. Die Problematik liegt hierbei darin, die Anzahl der Freiheitsgrade effektiv zu reduzieren, um „sinnvolle“ Modifikationen des Eingabemodells mit wenigen Parametern zu kontrollieren. Hierfür hat sich das „Boundary Constraint Multiresolution Modeling“ etabliert, bei dem das Biegeverhalten einer dünnen elastischen Platte imitiert wird, um die Eingabegeometrie zu deformieren. Die globale Deformation wird dabei so berechnet, dass die lokalen Details der Geometrie erhalten bleiben.



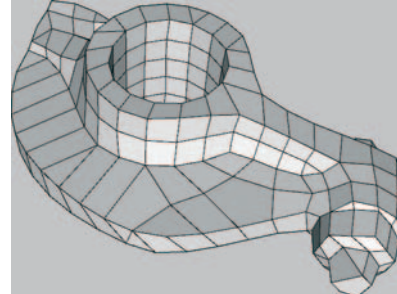
(a)



(b)

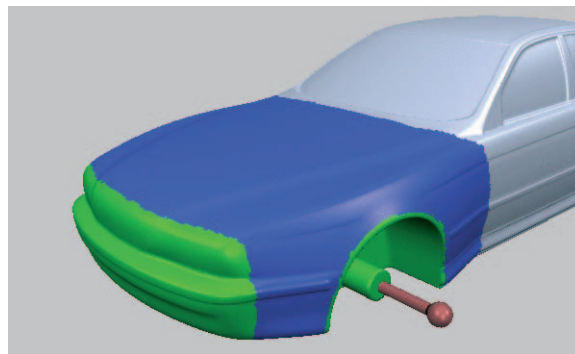
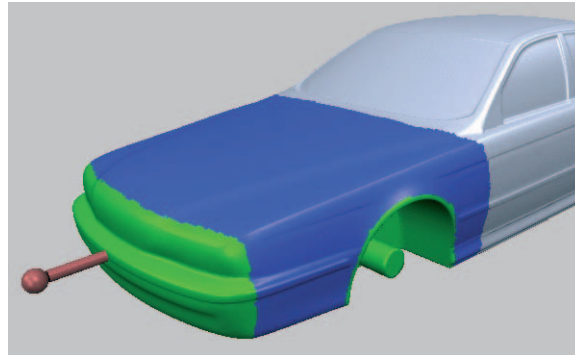
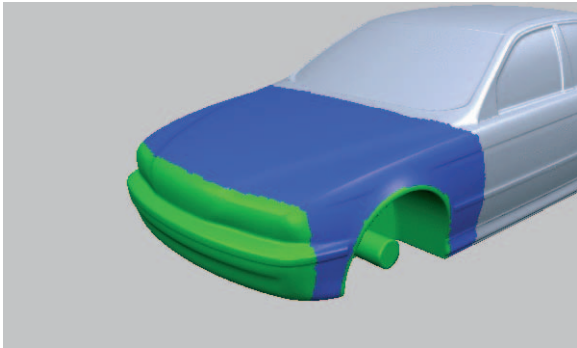


(c)



(d)

Bild 6: Durch Analyse der Eingabegeometrie (a) kann eine Segmentierung in verschiedene Zusammenhangskomponenten berechnet werden (b). Auf der Basis dieser Struktur wird die Vernetzung gesteuert (c), wodurch man bereits mit sehr wenigen Polygonen eine gute Annäherung an die Originaldaten erhält (d).



Ähnlich einer Frequenzanalyse erreicht man dies, indem man das 3-D-Modell in die globale Form (= niedrige Frequenzen) und die lokalen Details (= hohe Frequenzen) zerlegt und dann die einzelnen Frequenzbänder separat modifiziert.

Mit den beschriebenen Verfahren zur Erzeugung, Reparatur, Optimierung und Deformation von Polygon-Netzen lässt sich ein kompletter Workflow zur Analyse und Optimierung von komplexen Bauteilen realisieren, der keine weitere kosten- und zeitintensive Konvertierung zwischen verschiedenen Geometrie-Repräsentationen erfordert. Hierdurch lässt sich der Automatisierungsgrad und damit auch die Effizienz bei der simulationsgestützten Entwicklung deutlich erhöhen.

Während in den heute etablierten Entwicklungsabläufen immer noch eine strenge Trennung zwischen Design (wo NURBS-Darstellungen der Standard sind) und Simulation (wo Polygon-Netze der Standard sind) vorherrscht, können zukünftig rein polygonbasierte Systeme eingesetzt werden. Mit diesen Systemen können fast alle Phasen der industriellen Entwicklung integriert werden: vom Konzept-Design, über Reverse Engineering und die Analyse von Bauteil-Varianten durch Simulation bis hin zum Rapid Prototyping.

Bild 7: In diesem Beispiel wird die Motorhaube eines Fahrzeuges modifiziert. Das 3-D-Modell besteht aus weit über 100.000 Dreiecken. Mit den grünen Regionen an der Front und den Radkästen wird die Deformation kontrolliert. Pro Bereich ergeben sich sieben Parameter (3 x Translation, 3 x Rotation, 1 x Skalierung). Der blaue Bereich der Oberfläche verformt sich entsprechend der Bewegung der grünen Bereiche (boundary constraints) und verhält sich dabei wie eine elastische Gummi-Haut. Dadurch ergibt sich eine natürliche Deformation, bei der die geometrischen Details erhalten bleiben.

Numerische Strömungssimulation in Natur und Technik

RWTHTHEMEN 2/2007

Das Aerodynamische Institut, kurz AIA, beschäftigt sich seit Jahrzehnten mit der Entwicklung und Anwendung numerischer Lösungsverfahren zur Simulation und Analyse von Strömungsproblemen. Zu den verschiedenen Vorteilen der Simulation gegenüber dem Experiment gehören die geringeren Kosten und die Möglichkeit, Zustände zu simulieren, die im Experiment schwierig oder gar nicht erfasst werden könnten. Der Ablauf einer numerischen Simulation beginnt mit der Definition der physikalischen Problemstellung und der Auswahl eines geeigneten mathematischen Modells. Da im Allgemeinen eine analytische Lösung dieser Gleichungen nicht möglich ist, wird eine iterative Lösung an diskreten Punkten im betrachteten Strömungsgebiet nötig. In Bereichen, in denen sich die Strömungsgrößen, wie Dichte, Geschwindigkeit und Energie, räumlich stark ändern, ist eine höhere Punktdichte zur Auflösung der Strömung erforderlich. Dies führt in vielen Fällen zu einer sehr großen Anzahl von Punkten, was mit einem hohen Rechenaufwand verbunden ist. Durch Parallelisierung lässt sich dieser Aufwand auf mehrere Prozessoren verteilen, wodurch die Gesamtrechnungszeit reduziert wird.

Im Folgenden wird eine Auswahl der am AIA bearbeiteten Projekte vorgestellt, die, wenn nicht anders erwähnt, von der Deutschen Forschungsgemeinschaft gefördert werden. Die ersten drei Vorhaben beschäftigen sich mit der Widerstandsreduzierung durch Oberflächenstrukturierung und der Verringerung des Tragflächen- und Triebwerkslärms, während das vierte Projekt auf Anwendungen in der Biofluidmechanik eingeht.

Bionik

Die Idee der gezielten Strukturierung von Oberflächen mit dem Ziel der Reduzierung des Strömungswiderstandes stammt aus Beobachtungen von Haien. Diese perfekt an ihren Lebensraum angepassten Schwimmer haben keine glatte Oberfläche.

Bild 1: Wirbelstrukturen über einer Ribletoberfläche.

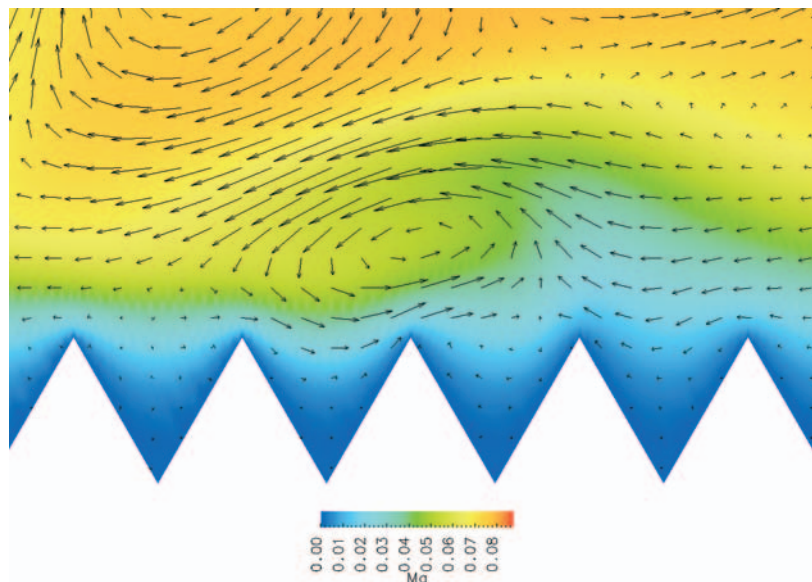
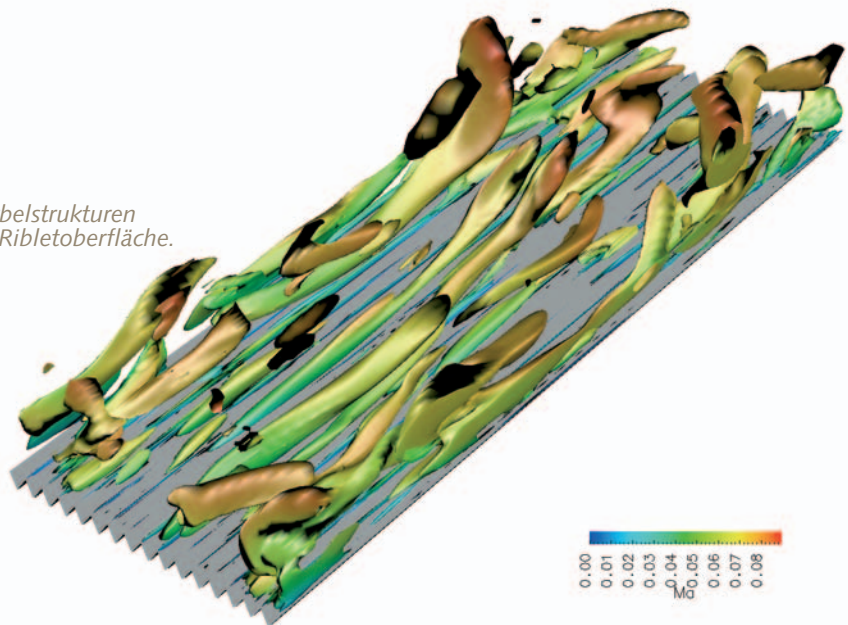


Bild 2: Einzelner Wirbel über einer Ribletoberfläche.

Ihre Schuppen weisen kleine Rillen in Längsrichtung auf, deren Breite nur wenige zehntel Millimeter beträgt. Seit Beginn der 80er Jahre des letzten Jahrhunderts werden Auswirkungen dieser so genannten „Riblets“ strömungsmechanisch untersucht. Es hat sich herausgestellt, dass eine Widerstandsreduzierung durch eine solche Oberfläche möglich ist, falls die Breite der Rillen ein gewisses, vom jeweiligen Anwendungsfall abhängiges Maß unterschreitet. Die Erklärung dafür, ist in der Struktur der Strömung über ei-

ne Körperoberfläche zu finden. Bewegt sich ein Körper durch Wasser, Luft oder ein anderes Fluid wird er entweder laminar oder turbulent umströmt. Bei nahezu allen technischen Anwendungen oder über der Haut des Hais stellt sich eine turbulente Strömung ein. Turbulent bedeutet dabei, dass sich in der Strömung viele unregelmäßige Wirbel bilden, die den Reibungswiderstand der Oberfläche erhöhen. In Bild 1 sind diese Wirbel über einer Ribletoberfläche dargestellt. Diese Wirbel haben einen vom jewei-

ligen Strömungszustand abhängigen typischen Durchmesser. Ist die Breite der Rillen kleiner als dieser Durchmesser, können die Wirbel nicht in die Rillen eindringen, wie in Bild 2 deutlich zu erkennen ist. Die Täler der Rillen kommen somit nicht mit den Wirbeln in Kontakt, was zu einer Widerstandsreduzierung führt. Bisher ist es aufgrund der nötigen kleinen Dimensionen der Rillen nicht möglich gewesen, diesen Effekt technisch zu nutzen. Lediglich einige Prototypen wurden verwirklicht, wie beispielsweise ein

Am Aerodynamischen Institut werden Methoden für die Berechnung technischer und medizinischer Strömungen entwickelt

Bild 3: Wirbelstrukturen um den Tragflügel.

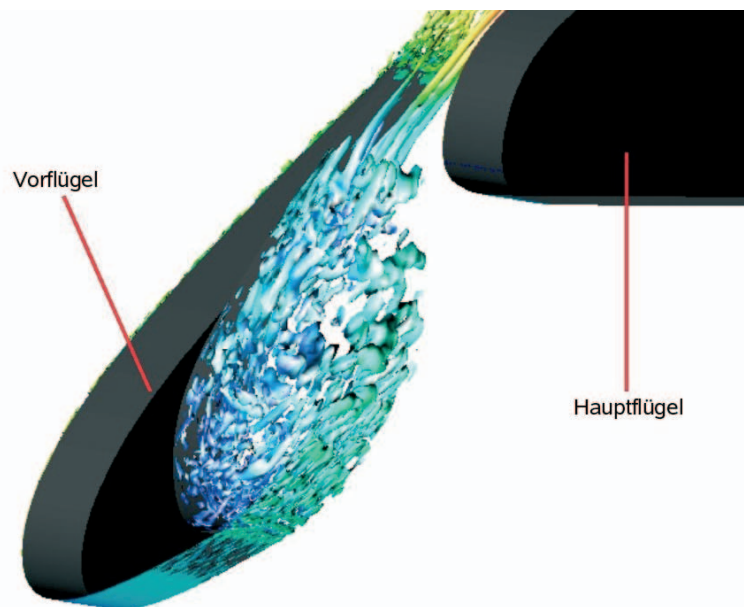
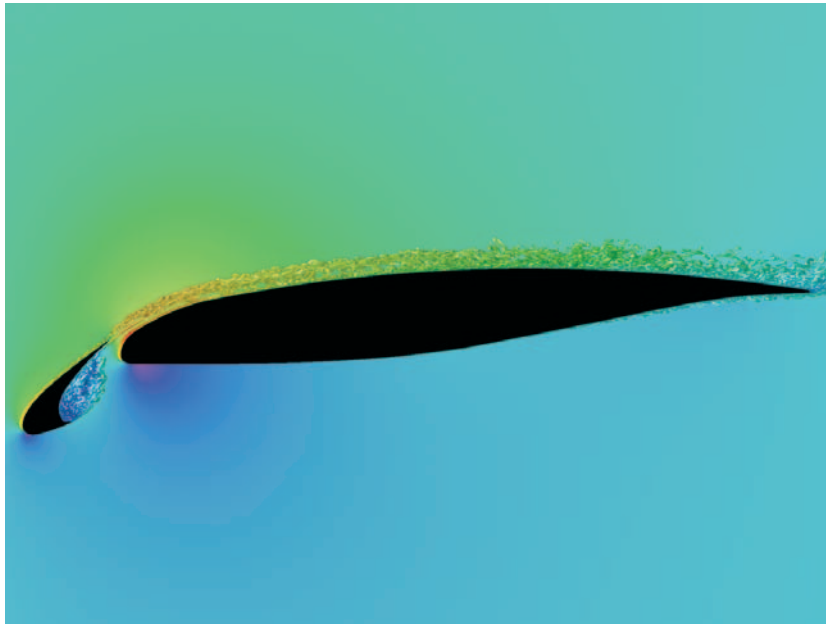


Bild 4: Wirbelstrukturen in der Nähe der Tragflügeloberfläche und im Spaltbereich zwischen Vor- und Hauptflügel.

mit einer Spezialfolie beklebtes Passagierflugzeug, was aber aufgrund der kurzen Lebensdauer der Folie und dem zusätzlichen Gewicht enorme Nachteile mit sich bringt. In einem von der Volkswagenstiftung geförderten Projekt ist es daher das Ziel, dieses Verfahren zur Widerstandsreduzierung gemeinsam mit dem Laboratorium für Werkzeugmaschinen und Betriebslehre, kurz WZL, und dem Institut für Bildsame Formgebung, kurz IBF, zur Anwendungsreife zu bringen. Dabei ist es Aufgabe des AIA mit-

tels Strömungssimulationen eine möglichst widerstandsreduzierende und trotzdem noch fertigbare Ribletgeometrie zu ermitteln, mit der die Oberfläche der jeweiligen Bauteile vom IBF und vom WZL mit speziell entwickelten Fertigungsverfahren strukturiert wird. Damit wäre es beispielsweise möglich, bei Passagierflugzeugen eine enorme Treibstoffeinsparung in der Größenordnung von etwa drei Prozent und somit natürlich auch eine Verminderung des Ausstoßes von CO₂ und Stickoxiden zu erreichen.

Reduzierung von Tragflächenlärm

Der Auftrieb eines Flugzeugs definiert sich im Wesentlichen aus der Fluggeschwindigkeit und der Flügelgeometrie. Während der Landephase wird der Auftriebsverlust aufgrund der relativ niedrigen Geschwindigkeit durch Änderung der Tragflächenform kompensiert. Diese Anpassung erfolgt durch Ausfahren von Vorflügeln und Hinterkantenklappen. Nachteilig daran ist allerdings, dass diese Hochauftriebskomponenten eine starke Lärmquelle darstellen.

Während des Landeanflugs verursachen sie den gleichen Geräuschpegel wie die Triebwerke. Die Ursache dafür liegt in der vermehrten Bildung turbulenter Strömungsstrukturen, siehe Bilder 3 und 4, die durch die Interaktion untereinander, die Wechselwirkung mit der Flugzeugoberfläche und beim Übergang von der überströmten Körperoberfläche in die Nachlaufströmung Schall erzeugen. Für das Design geräuscharmer Hochauftriebskomponenten folgt daraus, dass eine fundierte Kenntnis des instationären

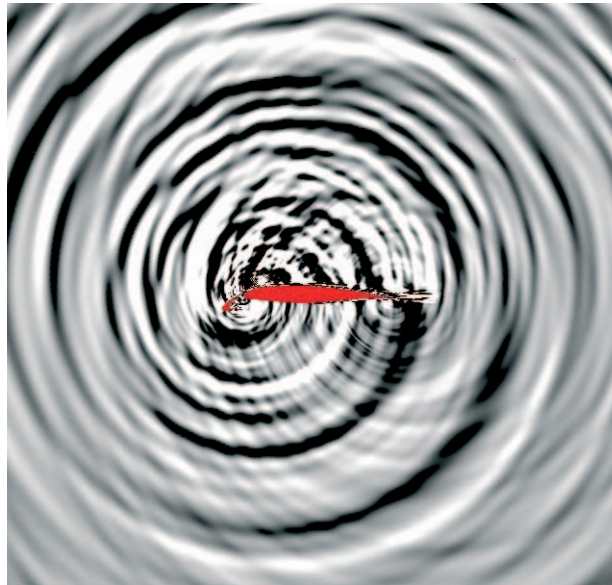


Bild 5: Schallfeld des umströmten Tragflügels.

Bild 6: Typische Triebwerksstrahlkonfiguration.

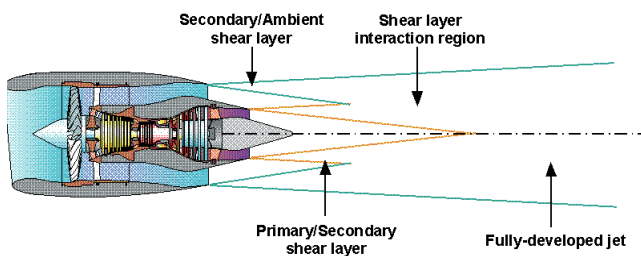
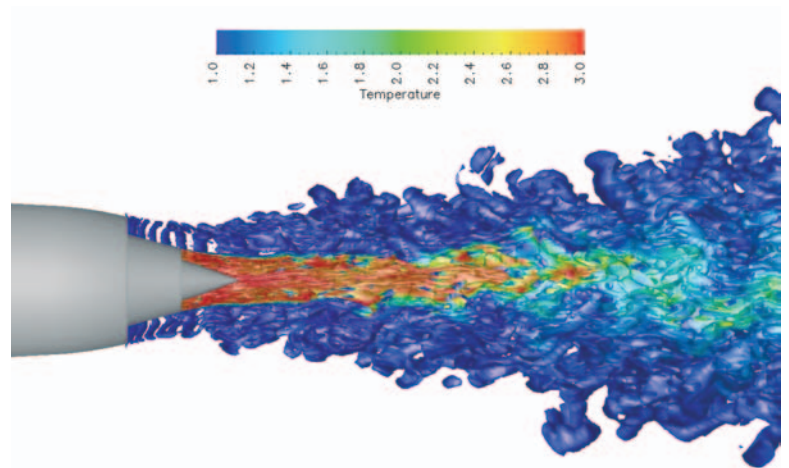


Bild 7: Wirbelstruktur innerhalb eines Triebwerksstrahls.



Strömungsfeldes erforderlich ist. Aus diesem Grund wird am AIA im Rahmen eines von der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderten Projekts die Strömung um eine Tragfläche, bestehend aus Vor- und Hauptflügel simuliert. Damit auch der Einfluss der kleineren Strukturen auf die Schallemission erfasst wird, muss das Rechengebiet ausreichend hoch aufgelöst werden. Dies führt auf eine Gesamtpunktzahl von 55 Millionen, was wiederum einen enormen Rechenaufwand bedeutet, der durch Parallelisierung auf viele Prozessoren verteilt wird. Bild 3 zeigt die turbulenten Strukturen im Vorflügelbereich anhand einer Momentaufnahme. Durch Optimierung der Flügelgeometrie kann das Strömungsfeld so beeinflusst werden, dass möglichst wenig Lärm entsteht. Dabei ist zu beachten, dass dies zu keiner Verschlechterung des Auftriebsverhaltens führt. Die Optimierung benötigt eine hohe Anzahl an Simulationen, was mit einem gewaltigen Rechenaufwand verbunden ist. Aus diesem Grund arbeitet das AIA an der

Entwicklung numerischer Verfahren, die es ermöglichen, mit deutlich geringerem Aufwand, aber ausreichender Genauigkeit, Strömungen zu berechnen. Die Entstehung und Ausbreitung des Schalls wird aus den instationären Strömungsfeldern ermittelt. Zu der oben beschriebenen Simulation zeigt Bild 5 das Schallfeld anhand von Druckfluktuationen. Deutlich erkennbar ist die Dominanz des im Vorflügelbereich entstehenden Lärms.

Numerische Simulation von Triebwerkslärm

Im Rahmen des von der EU geförderten Projektes CoJeN, kurz für Coaxial Jet Noise, sollen neue Simulationsmethoden für die Luftfahrtindustrie entwickelt und validiert werden, die es erlauben, den Lärm von Strahltriebwerken zu berechnen. Die gewonnenen Erkenntnisse sollen genutzt werden, um die Entstehung des Strahltriebwerkslärms besser zu verstehen und Wege zu finden, wie man diesen Lärm reduzieren kann. Die Untersuchungen beinhalten die Identifikation und die

Verbesserung der dazu geeigneten CFD-Methoden, kurz für Computational Fluid Dynamics-Methoden, zur Vorhersage des Strömungsfeldes, das sich hinter einem coaxialen Triebwerk von beliebiger Geometrie einstellt. Zusätzlich sollen aeroakustische Lösungsverfahren entwickelt werden, die basierend auf den Strömungsdaten das entstehende akustische Feld berechnen können. Die typische Triebwerkstrahlkonfiguration ist in Bild 6 dargestellt. Bild 7 visualisiert die Wirbelstrukturen in einem turbulenten Triebwerkstrahl. Die Farbverteilung entspricht der Temperaturverteilung.

Biofluidmechanik

Neben einer Vielzahl von numerischen Grundlagenuntersuchungen und Simulationen für industrielle Anwendungen beschäftigt sich das AIA auch mit biofluidmechanischen Problemen, wie sie zum Beispiel in der Medizintechnik auftreten. Ein Schwerpunkt liegt dabei auf der numerischen Simulation der Durchströmung der menschlichen Atemwege. Deren Ver-

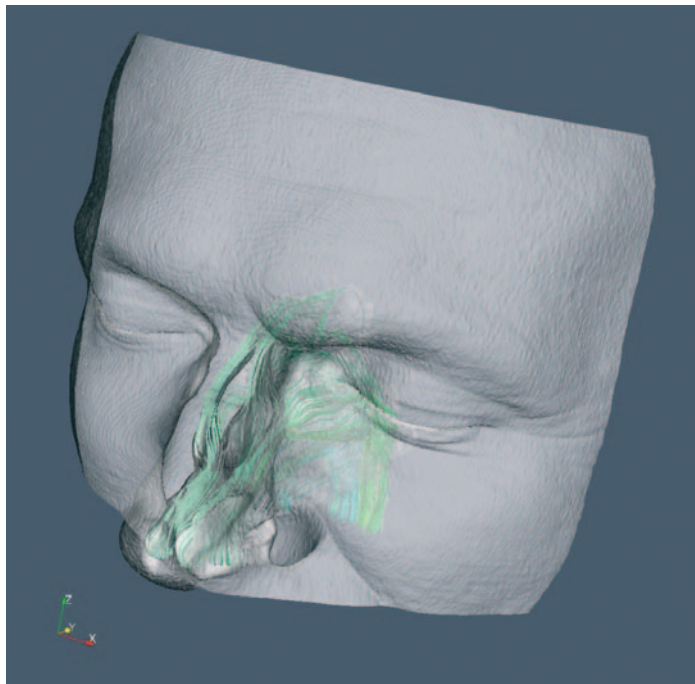


Bild 8: Nasengeometrie aus CT-Daten.

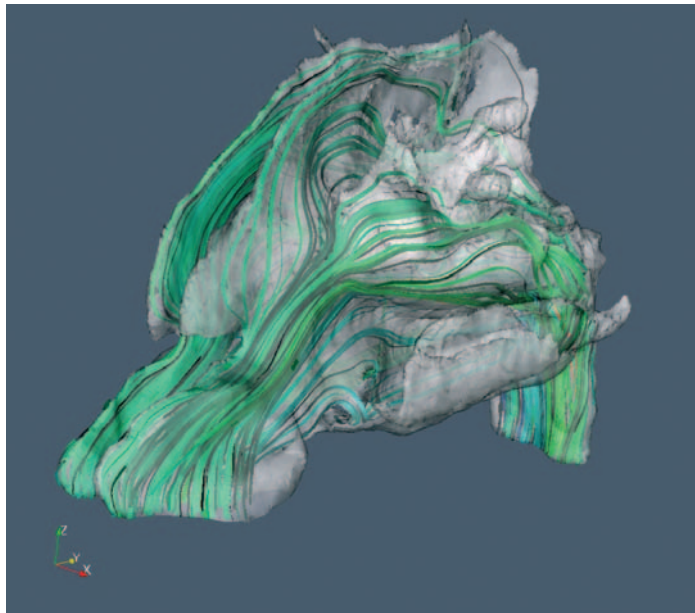


Bild 9: Stromlinien in der Nase.

ständnis liefert eine neue Dimension an Erkenntnissen bei einer Vielzahl von medizinischen Fragestellungen. Als Beispiel sei hier die Strömung durch die Nase genannt, die Gegenstand einer von der Deutschen Forschungsgemeinschaft geförderten Kooperation zwischen dem Rechen- und Kommunikationszentrum, der Klinik für Radiologische Diagnostik, dem AIA sowie dem Institut für Medizinische Statistik, Informatik und Epidemiologie der Universität zu Köln ist. Die Nase ist ein multifunktionales Organ, das heißt sie ist nicht nur für den Atemlufttransport und das Riechen zuständig, sondern auch für die richtige Temperierung, Befeuchtung und Reinigung der Atemluft. Zur Erfüllung dieser Funktionen besitzt die Nase eine komplexe geometrische Beschaffenheit, was extrem komplizierte Luftströmungen zur Folge hat. Für eine numerische Simulation dieser Luftströmungen werden zunächst die exakten geometrischen Informationen einer Nase benötigt. Die hierfür erforderlichen Daten liefert eine Compu-

tertomographie, kurz CT. Sie dienen als Grundlage zur Erstellung eines für die Simulation geeigneten Rechengitters. Die genaue Abbildung der Nasengeometrie führt dabei zu sehr feinen Gittern und langen Rechenzeiten, wodurch der Speicher- und Rechenaufwand der Simulation eine Größenordnung annimmt, die nur durch die Kombination moderner Höchstleistungsrechner und fortschrittlicher numerischer Methoden bewältigt werden kann. Als Resultat erhält man ein genaues Abbild des zeitlichen und räumlichen Verlaufs der Luftströmung in der Nase, wie in den Bildern 8 und 9 dargestellt. Alle eingesetzten Methoden, das heißt die Erzeugung von Oberflächendaten aus CT-Scans, die automatische Generierung von Gittern für die numerische Simulation und die eigentlichen Berechnungsalgorithmen, sind aktuelle Forschungsgebiete und ein Resultat der numerischen Forschung am AIA.

Die gewonnenen Ergebnisse liefern Medizinern nicht nur eine neue Grundlage für die Untersuchung und Ursache ver-

schiedener Atemwegserkrankungen, sondern erlauben es beispielsweise, den Einfluss operativer Veränderungen an der Nase zu beurteilen, ohne diesen Eingriff tatsächlich durchzuführen. Die Anwendung der beschriebenen Methoden ist natürlich nicht auf die Nase beschränkt, sondern kann in Zusammenhang mit zahlreichen biofluidmechanischen Fragestellungen des menschlichen Körpers genutzt werden.

www.aia.rwth-aachen.de

Autoren:

Dipl.-Ing. Rainhill Freitas,
Dipl.-Ing. Stephan Klumpp,
Dipl.-Ing. Daniel König,
Dipl.-Ing. Matthias Meinke und
Dipl.-Ing. Peter Renze sind
Wissenschaftliche Mitarbeiter
am Aerodynamischen Institut.
Univ.-Prof. Dr.-Ing. Wolfgang
Schröder leitet das Aerodyna-
mische Institut.

Hochleistungsrechnen und Visualisierung

Möglichkeiten für die computer-gestützte Wissenschaft über den Arbeitsplatzrechner hinaus

RWTHTHEMEN 2/2007

Neben der Modellbildung und dem Experiment hat sich die Computersimulation zum dritten Standbein der Wissenschaft entwickelt. Dies bedeutet auch, dass der wissenschaftlichen Programmentwicklung und dem Einsatz dieser Möglichkeiten in einer geeigneten Hardware-Umgebung sowie dem Verständnis der Rechenergebnisse eine Schlüsselrolle bei dem wissenschaftlichen Erkenntnisgewinn durch Simulation Science zukommt. Vor diesem Hintergrund arbeitet das Rechen- und Kommunikationszentrum darauf hin, durch entsprechende infrastrukturelle Maßnahmen in Bezug auf Themen wie High-Performance Computing, immersive Visualisierung, Netzanbindung und Speicherung großer Datenmengen die Institute in die Lage zu versetzen, ihre Anwendungen über die Grenzen des Desktop-Rechners hinaus zu skalieren.

Hierzu unterstützt das Rechen- und Kommunikationszentrum Anwender auch mit der Entwicklung von Software zur Visualisierung wissenschaftlicher Daten, bietet Kurse an und berät zur Parallelisierung und Leistungsverbesserung von Programmen. Weiter liefert es Know-how in Bezug auf die Nutzung von räumlich verteilten Ressourcen wie Computer, Datenbanken oder experimentelle Gerätschaften in so genannten Grid-Umgebungen. Gerade diese methodischen Unterstützungsaktivitäten spielen eine große Rolle bei der Sicherung der wissenschaftlichen Wettbewerbsfähigkeit der RWTH Aachen, da dieses Know-how den Studierenden und Mitarbeitern im Rahmen einer universitären Ausbildung typischerweise nicht vermittelt wird. Andererseits werden aber in Zukunft so gut wie alle Programme sowohl parallel als auch verteilt organisiert sein und die Entwicklungszeit von Softwaresystemen die Standzeit von Rechnern im Allgemeinen weit überschreiten.

Paralleles Rechnen

Die Bereitstellung von Rechenkapazitäten gehörte immer schon zu den Kernaufgaben eines „Rechenzentrums“, mit

Hochleistungsrechnern als traditionelle Flaggships der lokalen Infrastruktur. Hochleistungsrechner sind aber nicht mehr singuläre Installationen, sondern die Spitze einer „Rechnerpyramide“, die von den Arbeitsplatzrechnern über Lehrstuhl-Cluster, in der Regel von der Größe eines Computerschranks, bis hin zu Hochleistungsrechnern reicht. Ein Beispiel hierfür ist der aktuelle Cluster der RWTH Aachen von Sun Microsystems, der insgesamt 1.900 Prozessorkerne beinhaltet und eine aggregierte Leistung von 5,5 TFlops sowie 3,5 TByte Hauptspeicher zur Verfügung stellt. Die Spitze dieser Pyramide bilden die Höchstleistungsrechner an den Bundeszentren, wie beispielsweise die massiv parallele IBM Blue Gene Installation des Forschungszentrums Jülich.

Eine Konsequenz dieser Pyramide ist, dass die Durchgängigkeit der Software-Nutzung für die Programmentwickler eine immer größere Rolle spielt, da ein Programm auf mehreren dieser Ebenen gleichzeitig zur Anwendung kommt. Deshalb wird der Großteil des Clusters auch unter Solaris, der Unix-Variante von Sun, betrieben. Diese ermöglicht zum Beispiel eine unproblematische Portierung von Linux, enthält aber für die Nutzung großer Parallelsysteme eine erweiterte Funktionalität, wie bei der Verwaltung von parallelen Jobs. So setzen aktuell im Schnitt pro Monat circa 200 Nutzer den Parallelcluster im so genannten batch-modus ein, der Jobs je nach Ressourcenanforderungen bestmöglich auf die zur Verfügung stehende Hardware verteilt. Darüber hinaus ist aber auch Windows als Rechen-Plattform im Kommen. Aktuell nutzen 20 Institute im Batch-Betrieb diese Plattform. Parallelsysteme basierend auf Standard-Chips können für mehrere Betriebssysteme genutzt werden, was die Flexibilität der Anwendung erhöht. So ist zum Beispiel der in Bild 1 gezeigte Cluster der Firma Sun Microsystems, der auf AMD Opteron Prozessoren basiert, unter Linux, Solaris und Windows im Einsatz.

Die flächendeckende Verfügbarkeit von so genannten multi-core Chips, das heißt Rechnern, bei denen mehrere

Rechnerkerne, oder auch cores, eng integriert auf einen gemeinsamen Speicher zugreifen, macht paralleles Rechnen mittlerweile zu einer Notwendigkeit, will man nicht riskieren, dass die Programmleistung abnimmt. Viele Hersteller senken nämlich die Taktraten ihrer Systeme, um die Betriebstemperatur der Rechner zu mindern, und realisieren Leistungssteigerungen durch mehrere Rechnerkerne auf einem Chip. Für solche Shared Memory Multiprocessing Systeme, kurz SMP, bietet sich OpenMP als parallele Programmiermethodik an, da man die Parallelisierung durch das Einfügen von Direktiven in den Code erreicht, die dann von einem entsprechenden Compiler interpretiert werden. So kann man Programme schrittweise unter Beibehaltung eines zugrunde liegenden Quellcodes parallelisieren. Bei größeren Systemen ohne gemeinsamen Speicher muss man Codes allerdings so strukturieren, dass die Daten auf Prozessoren aufgeteilt werden und diese durch den Austausch von Botschaften, im Englischen „message passing“, die parallele Programmbearbeitung realisieren. Hierfür wird dann die so genannte Message Passing Interface Bibliothek, kurz MPI, benutzt. Das Rechen- und Kommunikationszentrum bietet regelmäßig Kurse zur Programmparallelisierung an, wobei eine besondere Expertise im Bereich OpenMP entwickelt wurde, da sich hiermit der oft unvermeidbare Umstieg von der seriellen auf die parallele Programmierung am einfachsten realisieren lässt.

Immersive Visualisierung

Von dem amerikanischen Mathematiker Richard Hamming stammt der Ausspruch: „The purpose of computing is insight, not numbers“. Es geht also um mehr als nur Zahlen und mittlerweile ist die Nutzung der Virtuellen Realität, kurz VR, eine sehr mächtige Technologie, um den Erkenntnisgewinn aus großen Simulationsrechnungen zu fördern. VR wird charakterisiert durch die Einbeziehung des Nutzers in die simulierte Welt, die Navigation und Manipulation in dieser Welt in Echtzeit, sowie durch intuitive dreidimensionale und multimodale, also visuelle, akustische und

taktile, Interaktionsmöglichkeiten. Insofern ist VR eine innovative Mensch-Maschine Schnittstelle, die über Computergaphik bei weitem hinausgeht. Im Virtual Reality Center Aachen, kurz VRCA, das von 42 Instituten der RWTH Aachen, zehn Firmen und vier externen Forschungsinstitutionen mitgetragen wird, werden die methodischen Grundlagen sowie Anwendungsszenarien von VR vorangetrieben. Die im Virtual Reality Labor installierten, großen Rückprojektionssysteme, insbesondere die so genannte CAVE, erlauben eine interaktive Untersuchung komplexer technisch-naturwissenschaftlicher Zusammenhänge. Anwendungsbeispiele reichen von der virtuellen Begehung geplanter Produktionssysteme, wie Bild 2 am Beispiel einer Gießwalzanlage der Firma SMS Demag AG zeigt, bis hin zur Analyse komplexer Strömungsphänomene, was Bild 3 mit der Simulation der Luftströmung durch die menschliche Nase verdeutlicht. Die CAVE-Rechner sind auch mit dem Hochleistungsrechner über ein schnelles Netzwerk gekoppelt, so dass diese zum Beispiel bei der Berechnung von Stromlinien in turbulenten Strömungen eingesetzt werden können, um die Interaktivität der Darstellung zu ermöglichen. Der am Rechen- und Kommunikationszentrum entwickelte VR-Toolkit VISTA, kurz für Virtual Reality for Scientific Technical Applications, integriert viele VR-Algorithmen unter Nutzung von community standards und bietet vielfältige Einsatzmöglichkeiten auf VR-Displays vom Bildschirm bis hin zur CAVE unter vielen gängigen Betriebssystemen. Insofern ist die CAVE auch kein „weißer Elefant“, sondern die Spitze einer breit angelegten Palette von Displaysystemen, die alle mit der gleichen Software betrieben werden können.

Kein Rechner ist eine Insel

Die Computersimulation erfordert oft große Datenmengen, entweder wenn komplexe Simulationsrechnungen viel Output generieren oder wenn Ergebnisse von langen Versuchsserien als Input von so genannten Assimilationsrechnungen benötigt werden, wo Computermodelle durch Abgleich mit Experimentalergebnissen kali-



Bild 1: Paralleles V40z Rechencluster der Firma Sun Microsystems.

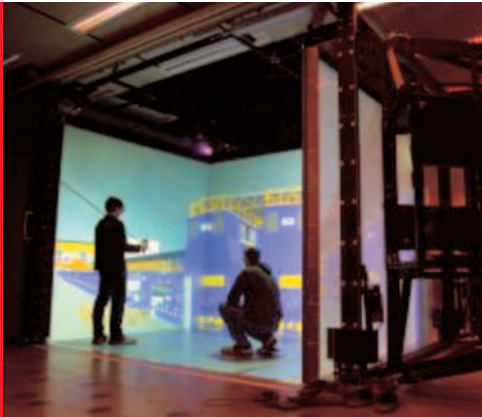


Bild 2: Virtuelle Darstellung einer Gießwalzanlage in der CAVE.

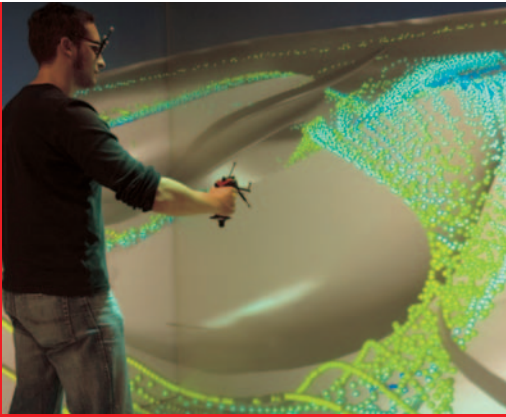


Bild 3: Interaktive Verfolgung von Strömungsvorgängen in der menschlichen Nase.

briert werden, um dann als Vorhersageinstrument oder Designwerkzeug zu dienen. Um große Datensätze langfristig zu speichern, bietet das Rechen- und Kommunikationszentrum ein Archiv mit einer Kapazität von mehreren hundert TByte an, das auch von Wissenschaftlern anderer Universitäten Nordrhein-Westfalens genutzt werden kann, wie übrigens 20 Prozent der Kapazität des Aachener Hochleistungsrechners diesen Nutzern offen steht. Die Nutzung dieser Ressourcen geschieht für den Anwender sehr komfortabel im Kontext des Ressourcenverbundes NRW, kurz RV-NRW, einer Ressourcen-Kooperative der universitären Rechenzentren in NRW. In diesem Rahmen können sich eingetragene Nutzer über eine Self-Service Nutzerverwaltung

Dienste selbst frei schalten. Diese Ressourcen sind zum Teil auch im Rahmen von Grid-Projekten nutzbar. So ist beispielsweise geplant, einen Teil des Archivs in das CMS-Grid zur Verarbeitung von Experimentaldaten des neuen Beschleunigers am CERN einzubringen. Als Partner des vom Forschungszentrum Jülich im Rahmen des D-Grid Projektes verantworteten Prototyp-Grids wird ein Teil des Aachener Hochleistungsrechners eingebracht. Mit diesen Mitteln lassen sich auch über mehrere geographische Standorte verteilt anspruchsvolle wissenschaftliche Workflows realisieren. Die RWTH ist in Bezug auf die Anbindung an das Wissenschaftsnetz mit aktuell zehn GBit/sec Bandbreite und unlimitierter Nutzungskapazität

Top-Nutzer in der Deutschen Wissenschaftslandschaft. Diese Geschwindigkeit ist circa 2.000 Mal so schnell wie die upstream-Rate typischer DSL-Verbindungen. Eine dedizierte Glasfaser-Infrastruktur auf dem Campus sowie zum Forschungszentrum Jülich und den Universitäten Bonn und Köln sowie zur Fraunhofer-Gesellschaft in St. Augustin sorgt für herausragende Verbindungsmöglichkeiten auf dem Campus und zu ausgewählten Partnern. Zusammenfassung Simulation Science braucht eine umfassende Infrastruktur, um ihr wissenschaftliches Potenzial zu erreichen. Die RWTH Aachen hat über viele Jahre in diesen Bereich investiert, um sicherzustellen, dass die Wissenschaftler und Wissenschaftlerin

nen nicht durch Ressourcenengpässe in ihrem Potenzial beschränkt werden und eine im universitären Umfeld einzigartige infrastrukturelle Landschaft geschaffen. Gerade in Zeiten verstärkten universitären Wettbewerbs um die besten Köpfe ist dies ein nicht zu vernachlässigendes Standortmerkmal. www.rz.rwth-aachen.de Autor: Univ.-Prof. Christian Bischof, Ph.D. ist Inhaber des Lehrstuhls Informatik 12 (Hochleistungsrechnen) und Leiter des Rechen- und Kommunikationszentrums.



Hier erfahren Sie mehr – Porsche Online: Telefon 01805 356 - 911, Fax - 912 (EUR 0,14/min) oder www.porsche.de.

„Das Wetter war zu schlecht, um Sport zu treiben.“
Eine ganz billige Ausrede.

Der Boxster.



PORSCHE

Lückenlose Qualitätskontrolle bei der Medikamentenherstellung

Wie Messtechnik und Simulation den Alltag sicherer machen

RWTHTHEMEN 2/2007

Haben Sie sich schon einmal gefragt, warum Sie bedenkenlos eine Schmerztablette nehmen und beim gleichen Produkt immer die gleiche Wirkung erwarten können? Diese Sicherheit garantiert Ihnen eine rigorose Qualitätskontrolle bei der Tablettenherstellung. Heute wird standardmäßig nach jedem Produktionsschritt eine Endkontrolle durchgeführt. Auch wenn dieses Vorgehen schon ein sehr hohes Maß an Sicherheit bietet, so kann die Produktionssicherheit durch eine lückenlose Kontrolle während des Produktionsprozesses weiter gesteigert werden. Dies soll in Zukunft durch den Einsatz spezieller Messtechnik direkt im laufenden Prozess gewährleistet werden. Am Lehrstuhl für Prozesstechnik werden mathematische Modellierung und Simulation zur Verbesserung einer solchen Messtechnik eingesetzt.

Partikelgröße als Qualitätsmerkmal

Eine Aspirin-tablette besteht beispielsweise zum größten Teil aus Füllstoffen und Bindemitteln wie Milchzucker oder Maisstärke, und zu einem weit aus kleineren Teil aus dem eigentlichen Wirkstoff Acetylsalicylsäure. In jeder Tablette muss eine genau definierte Menge dieses Wirkstoffs enthalten sein. Da dieser möglichst rein und in fester Form vorliegen sollte, wird er nach der chemischen Synthese in einer so genannten Lösungskristallisation gewonnen. Die Umkehrung der Lösungskristallisation, also das Lösen von Kristallen, kennt jeder, der seinen Kaffee gerne mit Zucker trinkt. Schüttet man einen Löffel Zucker in eine Kaffeetasse und rührt um, so lösen sich nach einigen Minuten alle Kristalle auf. Gibt man noch weitere Löffel dazu, so bleibt irgendwann ein Rest Zucker unten in der Tasse zurück. Das Kaffeewasser ist nun gesättigt, es kann kein weiterer Zucker mehr gelöst werden. Dieser Auflösungsprozess ist einfach. Ihn aber umzukehren, und den Zucker aus dem Kaffeewasser zurück zu

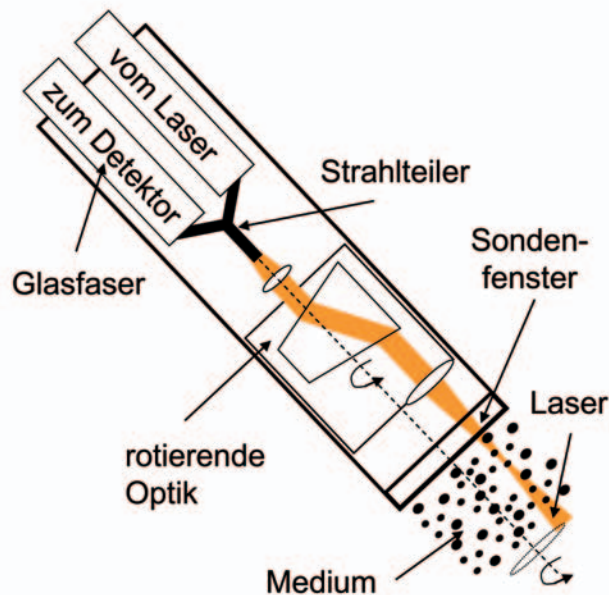


Bild 1: Links ist der Aufbau des Messgeräts dargestellt. Das Messprinzip beruht auf der Rückstreuung von Laserlicht. Eine Längenmessung ist möglich, da die Rotationsgeschwindigkeit des Laserstrahls

genau geregelt ist. Das Messgerät kann nur Sehnen auf den Kristallen messen. Diese Sehnenlängen hängen oft stark von der Orientierung des Partikels relativ zum Weg des Laserstrahls ab.

gewinnen, erfordert einen aufwändigen verfahrenstechnischen Prozess. Man müsste eine kleine Menge an Zuckerkrystallen in die süße Lösung einbringen und nun langsam und unter ständigem Rühren die Temperatur absenken. Dies würde dazu führen, dass die eingebrachten Zuckerkrystalle langsam anfangen zu wachsen. Einen solchen Prozess nennt man Lösungskristallisation. Für zu süß geratenen Kaffee lohnt sich so ein Prozess natürlich nicht, wohl aber für pharmazeutische Wirkstoffe.

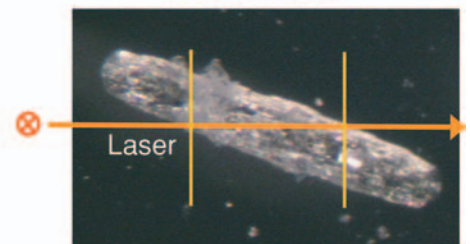
In der Lösungskristallisation eines solchen Wirkstoffs ist die Reinheit sowie die Form- und Größenverteilung der Kristalle entscheidend für die Produktqualität. Zu große Kristalle können nur schwer in eine Tablette gepresst werden, zu kleine lassen sich nur mit großer Mühe von der Lösung trennen. Ein ähnliches Problem kennt man

bei der Benutzung eines Salzstreuers: Sind die darin enthaltenen Kristalle zu groß, so können die Löcher im Deckel verstopfen. Kleine Kristallfragmente hingegen hängen oft an den Wänden des Salzstreuers fest. Um die Produktqualität im Hinblick auf die Kristallgröße gewährleisten zu können, sollte diese während des Kristallisationsvorgangs direkt in der Suspension - einer Mischung aus Feststoff und Flüssigkeit - gemessen werden. Eine solche Messung ist sehr anspruchsvoll, da die Kristalle ständig in Bewegung sind und sich einige Hundert gleichzeitig innerhalb eines Kubikmillimeters aufhalten können.

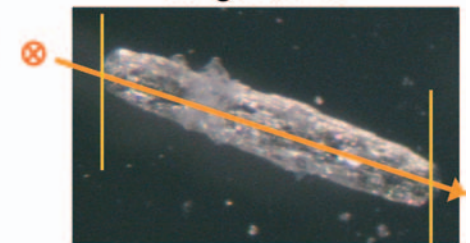
Die Messtechnik

Eine optische Messtechnik, die in der Lage ist, direkt während eines Kristallisationsvorgangs die Größe der Partikel zu vermessen, ist die Focused Beam

kurze Sehne



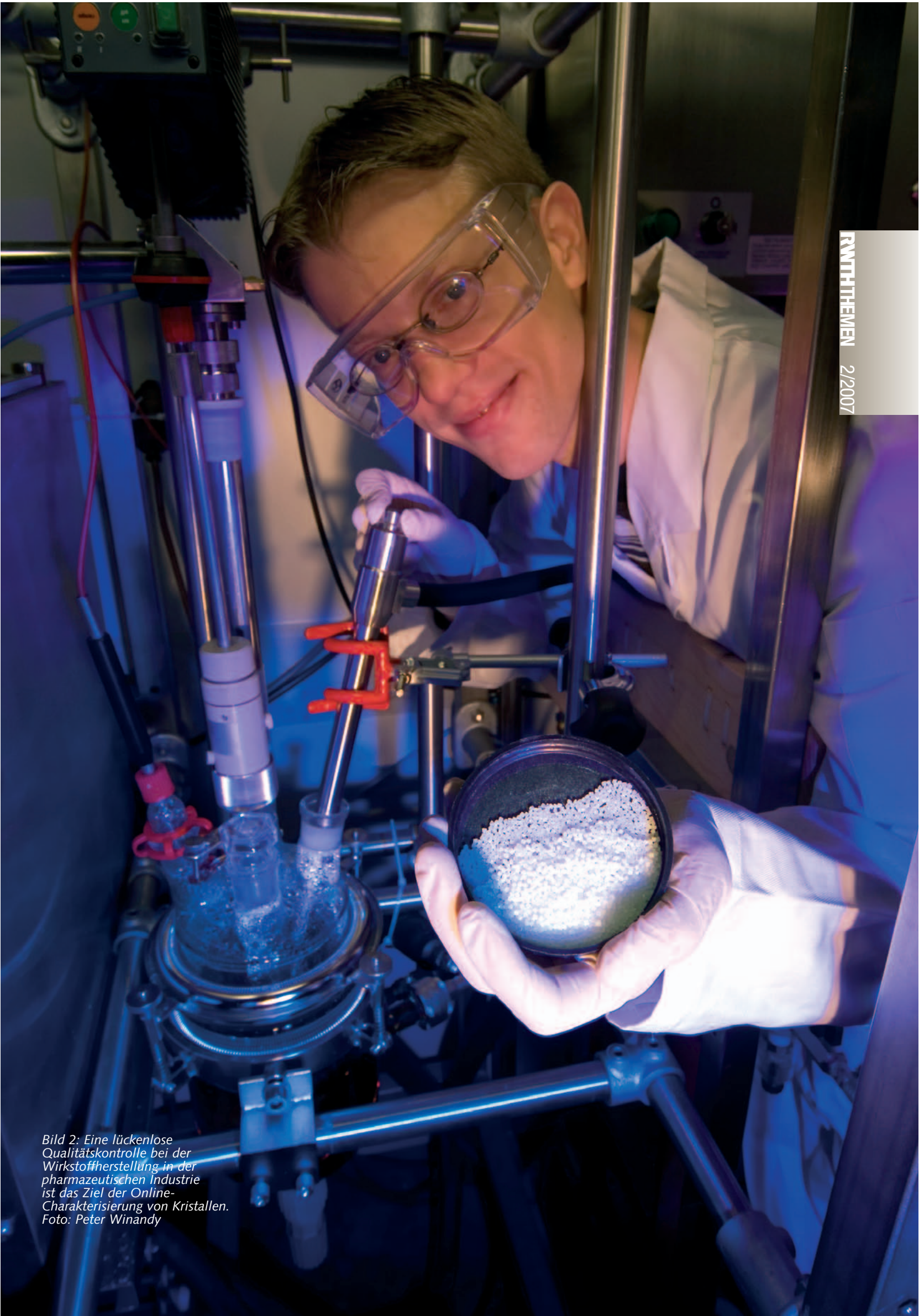
lange Sehne



Reflectance Measurement, kurz FBRM, wie in Bild 1 dargestellt. Eine FBRM-Sonde funktioniert prinzipiell ganz ähnlich wie eine Scannerkasse im Supermarkt, die einen Strichcode aus hellen und dunklen Streifen identifiziert. Die Scannerkasse nutzt dabei den Effekt, dass schwarze Partien eines Strichcodes im Gegensatz zu hellen kaum Licht reflektieren. Die FBRM benutzt ebenfalls einen Laserstrahl, der allerdings aus Platzgründen eine Rotationsbewegung im Medium ausführt. Wird ein Partikel von diesem Laserstrahl getroffen, streut Licht in die Sonde zurück.

Das Problem

Aus der Dauer des Lichtimpulses und der Rotationsgeschwindigkeit des Laserstrahls kann eine Sehnenlänge auf dem Partikel errechnet werden. Dieser Wert gibt leider noch nicht die exakte Größe eines Kristalls



*Bild 2: Eine lückenlose
Qualitätskontrolle bei der
Wirkstoffherstellung in der
pharmazeutischen Industrie
ist das Ziel der Online-
Charakterisierung von Kristallen.
Foto: Peter Winandy*

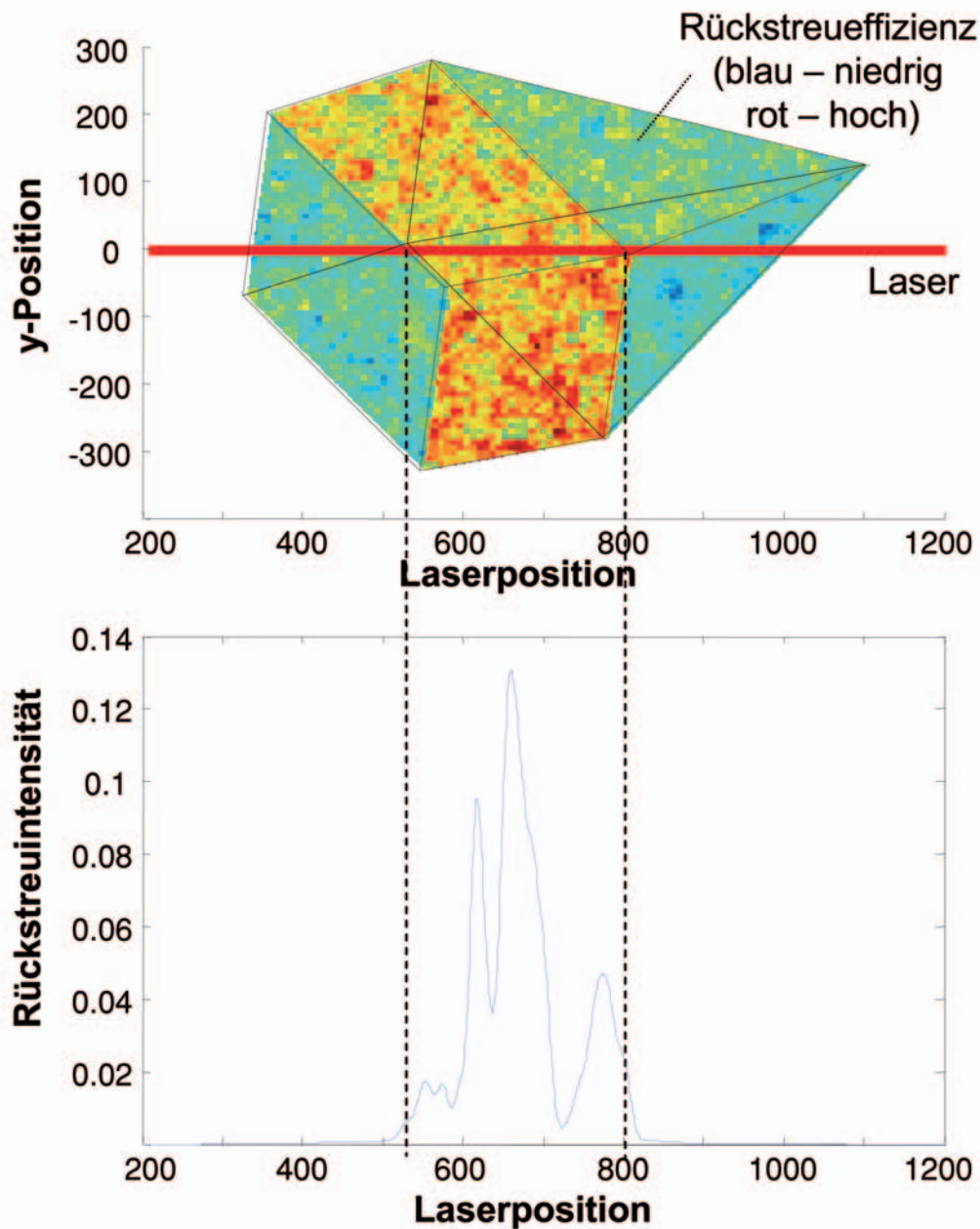


Bild 3: Im oberen Diagramm ist das Oberflächenmodell eines Kristalls abgebildet. Der Laserstrahl des Messgeräts läuft in diesem Beispiel quer über den Kristall. Die Lichtintensität, die dabei ins Messgerät zurückreflektiert wird, ist stark von der Orientierung der Kristalloberfläche abhängig. Im unteren Bild ist die simulierte Lichtintensität, die das Messgerät empfangen würde, dargestellt.

34

wieder. Je nach Orientierung können für ein einziges Partikel unterschiedlich lange Sehnenlängen gemessen werden, wie in Bild 1 dargestellt. Die Größe eines Partikels lässt sich also nicht direkt mit einer FBRM-Sonde messen.

Die Computersimulation

Um aus dem Messsignal der FBRM-Sonde indirekt Partikelgrößen bestimmen zu können, muss zunächst die Physik der Messung im Detail verstanden werden. Dazu kann man eine Computersimulation verwenden. Eine solche Simulation stellt dabei ein virtuelles Experiment dar, in dem die physikalischen Abläufe einer realen Messung mit Hilfe eines mathematischen Modells im Computer nachgebildet werden. Ein gutes Modell zeichnet sich dadurch aus, dass die Ergebnisse der Simulation mit denen des Experiments unter gleichen Randbedingungen übereinstimmen.

Das mathematische Modell

Im Gegensatz zu einem Strichcode auf Verpackungen hängt die Lichtrückstreuung einer Partikeloberfläche von ihrer Transparenz, Oberflächenrauigkeit und Orientierung relativ zum Pfad des Laserstrahls ab. Außerdem sind die zu messenden Partikel um ein Vielfaches kleiner als die Balken eines Strichcodes, deshalb hängt die Lichtstreuung zusätzlich noch von der Form des Laserstrahls ab. Alle diese Faktoren müssen in einem Modell berücksichtigt werden. Die simulierte Lichtrückstreuung eines einzelnen Kristalls zeigt Bild 3.

In einer realen Messung werden viele Tausend Partikel vom Laserstrahl überstrichen und die entsprechenden Sehnenlängen gemessen. Um eine solche Messung zu simulieren, müssen daher einige Tausend Partikel stochastisch, das heißt zufallsabhängig im Raum verteilt werden, ohne sich dabei zu durchdringen. Eine derartige Si-

mulation kann nur sinnvoll eingesetzt werden, wenn die Rechenzeit zur Auswertung eines Feldes mit 100.000 Partikeln nur wenige Sekunden beträgt. Ein mathematisches Modell, das alle diese Faktoren berücksichtigt, wurde am Lehrstuhl für Prozesstechnik entwickelt. Mit Hilfe dieses Modells ist es nun möglich, eine Messung von Sehnenlängen zu simulieren, nicht aber aus einer realen Messung Partikelgrößen zu errechnen. Die Lösung eines solchen „inversen“ Problems ist um ein Vielfaches schwieriger als die Simulation einer Messung.

Die Realität: Ein „schlecht gestelltes, inverses Problem“

Den Begriff eines „inversen“ Problems kann man gut durch folgendes Beispiel verdeutlichen: Nach dem Abschuss einer Kanonenkugel ist es relativ einfach zu berechnen, wo die Kugel einschlagen wird. Umgekehrt ist die Lösung des „inversen“ Problems, also aus dem

Ort des Einschlags den Standort der Kanone zu berechnen, um ein Vielfaches schwieriger. Nun zurück zum Problem der Messung von Partikeln mit Hilfe einer FBRM-Sonde. In der Realität kann man nicht davon ausgehen, dass jedes Partikel einzeln gemessen wird. Es kommt zwangsläufig zu Überlappungen. Unterschreitet der Abstand zwischen zwei Partikeln einen Minimalwert, so werden diese zwei fälschlicherweise als ein größeres wahrgenommen. Zusätzlich dazu bewegen sich alle Partikel relativ zur Sonde, so dass diese aus Sicht des Messgeräts verschmiert wahrgenommen werden. Diese Effekte sorgen dafür, dass eine gemessene Sehnenlänge in einer charakteristischen Weise verfälscht wird, was zwar im Modell berücksichtigt werden kann, aber gravierende Folgen für die Lösung des inversen Problems beinhaltet. Für Partikel einer einheitlichen Größe können Sehnenlängen

Milchzucker-Kristalle

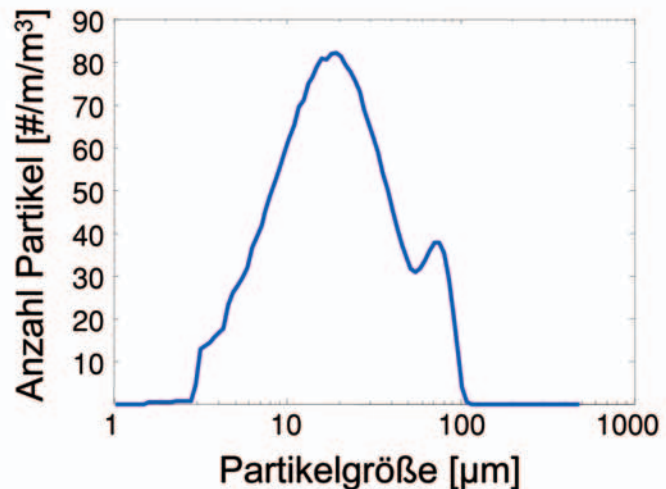
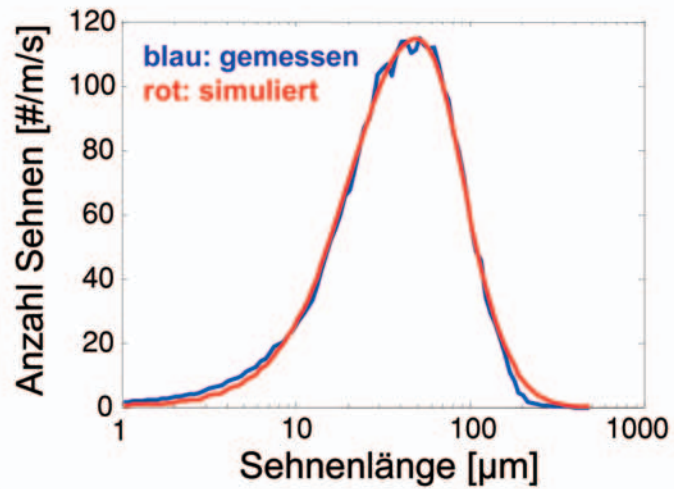
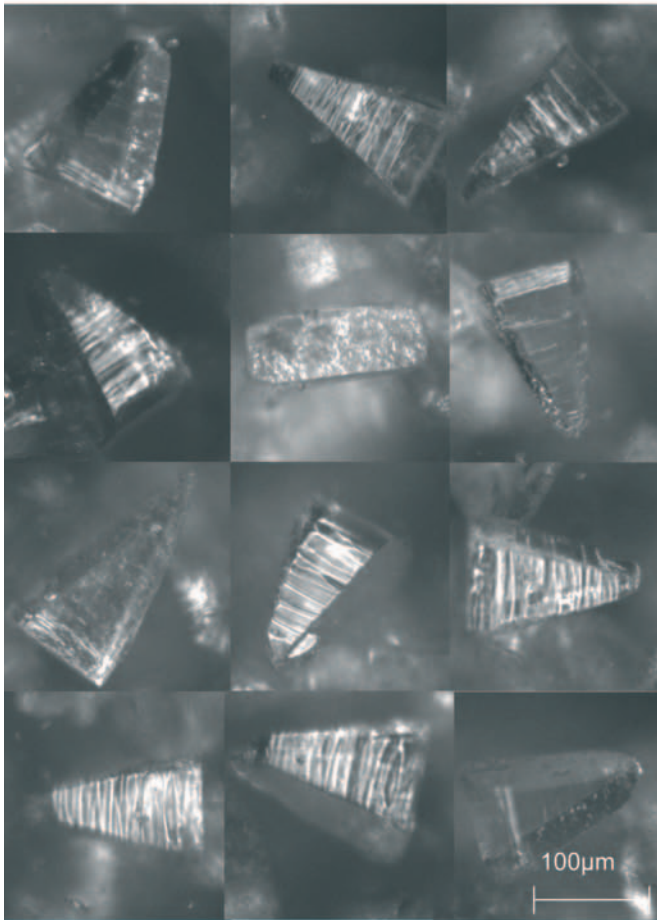


Bild 4: Links sind Mikroskop-aufnahmen von einzelnen Milchzuckerkristallen zu sehen, die an Kuchenstücke erinnern. Rechts oben sind die von der speziellen Technik gemessenen Sehnen in blau dargestellt. Die Grafik darunter zeigt

die daraus errechneten Partikelgrößen. Man sieht deutlich, dass ein sehr hoher Anteil der Kristalle im Bereich von 20µm liegt. Für eine einfache Weiterverarbeitung sind diese Kristalle zu klein. Die Qualität des Produkts ist daher niedrig.

Rechts oben ist zur Kontrolle die Simulation der errechneten Partikelgrößen aufgrund der gemessenen Sehnenlängen eingezeichnet. Beide Kurven, die Messung und die Simulation, zeigen sehr ähnliche Ergebnisse.

im gesamten Messbereich gemessen werden. Ändert sich die Partikelgröße, so ändern sich die gemessenen Sehnenlängen in einem wesentlich geringeren Maß. Umgekehrt können kleine, zufällige Änderungen in den gemessenen Sehnenlängen eine große Änderung der Partikelgröße suggerieren. In der Fachsprache bezeichnet man ein solches Problem als „schlecht gestellt“.

Expertise gefragt

Allgemein sind inverse Probleme, die aus vielen Fragestellungen in der Physik, der Wirtschaft und der Technik resultieren, leider sehr häufig solche „schlecht gestellten Probleme“. Ihre Lösung erfordert immer ausgeklügelte mathematische Methoden. Bei vielen Alltagsproblemen zögert man deshalb heute noch, inverse Probleme überhaupt zu formulieren und mathematische Lösungen anzugehen. Am Lehrstuhl für Prozesstechnik wird seit nunmehr

fünfzehn Jahren in allen Gebieten der Verfahrenstechnik an der Aufstellung und der Lösung inverser Probleme geforscht, um die Produktionssicherheit, den Prozessentwurf, den Betrieb von technischen Anlagen und die Auswertung von Messdaten im Labor zu verbessern.

Beispiel Milchzucker

Kommen wir noch einmal zum Anfangsproblem und der Herstellung von pharmazeutischen Wirkstoffen zurück. Aus Sicherheits- und Kostengründen ist es im akademischen Umfeld nicht üblich, mit pharmazeutisch aktiven Substanzen zu arbeiten. Deshalb wurden die Studien zur Rekonstruktion von Partikelgrößen mit Milchzucker durchgeführt. Milchzucker wird in der Pharmaindustrie sehr oft als Füllstoff verwendet, ist ungefährlich und wird wie viele Wirkstoffe in einer Lösungskristallisation gewonnen, siehe auch Bild 3. Die Kristalle des Milchzuckers sind sehr spröde,

so dass sie sich zwar gut verarbeiten lassen, aber sich während des Kristallisationsprozesses leicht abreiben. In einer nachfolgenden Filtration zur Gewinnung reinen Milchzuckers, sorgen diese Abriebsfragmente für lange Filtrationszeiten und den Rückhalt von Verunreinigungen im Produkt und damit zu hohen Produktionskosten. Ein optimaler Kristallisationsprozess sollte deshalb dafür sorgen, dass möglichst wenig Abrieb und möglichst große Kristalle entstehen.

Bestimmung der Partikelgrößen

Eine Suspension aus kleinen Abriebspartikeln und großen Kristallen wurde angesetzt und vermessen. Die gemessenen Sehnenlängen deuten dabei nicht direkt auf die Präsenz von kleinen Partikeln hin. Die Rekonstruktion der Partikelgrößen durch Lösung des inversen Messproblems zeigt hingegen klar die massive Präsenz von kleinen Partikeln und damit die

geringe Qualität des Produkts, Bild 4. Wie in diesem Beispiel gezeigt, kann die Kopplung von ausgeklügelten mathematischen Methoden und spezieller Messtechnik die Qualität von Pharmazeutika überwachen und damit verbessern.

www.avt.rwth-aachen.de

Autoren:

Dipl.-Ing. Norbert Kail ist Wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl für Prozesstechnik. Dr.-Ing. Heiko Briesen war Oberingenieur am Lehrstuhl für Prozesstechnik. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Marquardt leitet den Lehrstuhl für Prozesstechnik.

Bild 5: Verfahrenstechnisches Know-how ist erforderlich, damit ein Kristallisationsprozess solche regelmäßigen Kristalle liefern kann. Am Lehrstuhl für Prozesstechnik wird an der Überwachung von Kristallisationsprozessen geforscht, die Abweichungen von der gewünschten Kristallgröße online detektiert. Foto: Peter Winandy



Produktivität versus Performanz in der Simulation

Werden auf der Welt neue Höchstleistungsrechner eingeweiht, so gibt man deren Leistung meistens in FLOPS, also Floating-Points, beziehungsweise Gleitkomma-Operationen pro Sekunde, an. Aufgrund des bereits seit Jahrzehnten anhaltenden exponentiellen Wachstums der Prozessorleistung – beschrieben und auch bekannt als Mooresches Gesetz – verfolgt die Fachwelt heute gespannt die Ankündigungen erster Petaflop-Architekturen, die schon bald mit mehr als einer Billion Rechenoperationen pro Sekunde bei der Suche nach Lösungen für die dringendsten Probleme unserer Gesellschaft wie zum Beispiel dem Klimaschutz und der nachhaltigen Energieversorgung neue Impulse liefern werden. Am Forschungszentrum Jülich, dem Partner der RWTH in der Jülich Aachen Research Alliance, kurz JARA, ist die Installation einer derart leistungsfähigen Maschine für das Jahr 2009 geplant. Trotz beeindruckender Zahlen bleibt die effiziente Nutzung von Höchstleistungsrechnern eine Herausforderung. In einer jüngeren Studie, die 2007 Leonid Oliker und seine Kollegen vom Lawrence Berkeley National Laboratory in den USA vorlegten, wurde ein Spektrum von Codes auf verschiedenen Systemen der Spitzenklasse untersucht. Dabei lag der Anteil der tatsächlich durch eine Anwendung erreichten Leistung im Vergleich zur theoretischen Spitzenleistung in der Mehrzahl der Fälle unter 20 Prozent. Insbesondere bei der gleichzeitigen Nutzung einer hohen Zahl von Prozessoren, beispielsweise mehr als tausend, ist auch ein Anteil von weniger als zehn Prozent keine Seltenheit. Die Produktivität eines Simulationsvorhabens, gemessen an der Zeit, die man zur Lösung des zugrunde liegenden wissenschaftlichen Problems benötigt, hängt allerdings nicht allein von der verwendeten Hardware und deren optimalem Gebrauch ab. Vielmehr ist der Lösungsweg ein hochkomplexer Prozess, der eine Vielzahl hauptsächlich von Menschen durchgeführter Schritte beinhaltet:

die Modellierung des zu simulierenden Sachverhalts, die Auswahl geeigneter paralleler Algorithmen, deren Implementierung in einer Programmiersprache, das Finden und Beheben von Fehlern, die Optimierung des Leistungsverhaltens und schließlich nach der Ausführung des Programms auf dem Rechner die Analyse der Ergebnisse. Freilich ist dieses wasserfallartige Modell des Lösungsprozesses eine sehr grobe Vereinfachung. Oft kommt es zu Rückgriffen auf vorangehende Stufen, zum Beispiel wenn sich Zwischenergebnisse als unzureichend erweisen. Am Ende erfolgt nicht selten eine Verfeinerung des ursprünglichen Modells, wodurch sich der Kreis schließt und der Vorgang von neuem beginnt.

Es bleibt festzuhalten, dass die Produktivität und damit die Kosten von der Dauer all dieser Schritte abhängen. Versuche, den Prozess zu optimieren, müssen daher auch alle Teilaktivitäten berücksichtigen. So gestaltet sich die Programmierung der komplizierten hochparallelen Systeme als ausgesprochen schwierig. Während im Bereich der betriebswirtschaftlichen Software die Komplexität der Anwendungen hinter hoch entwickelten Programmierungsumgebungen verborgen bleibt, stagniert der Fortschritt in der Programmiermethodik von Höchstleistungsrechnern seit Jahrzehnten. Grund dafür ist das engmaschige Zusammenspiel zwischen Hard- und Software. So muss der Entwickler eines parallelen Simulations-Codes in der Regel beides sein: Ein Experte in seiner Fachdisziplin, der die besten Lösungsansätze für das jeweilige wissenschaftliche Problem findet, als auch ein Computerspezialist, der das System, für welches der Code entworfen wird, genau versteht und dessen Stärken optimal einsetzt. Und das ist gar nicht so einfach, da der Zugriff auf die Ressourcen eines hochparallelen Rechners mit Hilfe zum Teil wenig intuitiver und umständlicher zu erlernender Programmierschnittstellen erfolgt, deren Leistungsverhalten häufig Überraschungen bereithält und

bei deren Verwendung sich gerne Fehler einschleichen. Insbesondere auf sehr großen Systemen mit zehntausenden von Prozessoren ist die Erstellung korrekter und effizienter Programme extrem schwierig und zeitraubend. Auf Grund der technologischen Randbedingungen und zur Stillung des stetig wachsenden Bedarfs nach noch mehr Rechenleistung zur Durchführung noch feinerer und längerer Simulationen, wachsen die Prozessoranzahlen dennoch in rasantem Tempo weiter. Die Multicore-Revolution, wodurch mehr statt noch schnellere Prozessoren zum Einsatz kommen, um insbesondere den Energieverbrauch nicht noch weiter zu steigern, wirkt hierbei als Katalysator. Das Problem trägt den Namen Skalierbarkeit, womit die Fähigkeit eines Programms gemeint ist, auf einer großen Menge von Prozessoren effizient arbeiten zu können. Skalierbarkeit wird allerdings nicht nur von den Simulations-Codes selbst, sondern auch von den Softwarewerkzeugen erwartet, die Wissenschaftler einsetzen, um ihre Programme zu analysieren und zu verbessern. Oftmals sind die Werkzeuge aber nicht in der Lage, die dabei anfallenden enormen Datenmengen zu verarbeiten. Mal sind die Verarbeitungszeiten zu lang, so dass beispielsweise interaktives Arbeiten unmöglich wird, die Größe der Anzeigen reicht nicht aus, um dem Programmierer sinnvolle Auskunft über das Programmverhalten zu geben, oder unzureichender Speicherplatz verhindert die Verarbeitung völlig.

Dieser Problematik widmet sich seit etwa einem halben Jahr eine neue Kooperation mit dem Forschungszentrum Jülich, der Technischen Universität Dresden, der University of Tennessee in Knoxville und der RWTH Aachen: Das Virtuelle Institut High-Productivity Supercomputing, kurz VI-HPS. Es wurde vom Forschungszentrum Jülich initiiert und erhält Fördermittel aus dem „Impuls und Vernetzungsfonds“ der Helmholtz-Gemeinschaft Deutscher Forschungszentren. VI-HPS hat

sich zum Ziel gesetzt, die Qualität von komplexen Simulations-Codes aus Wissenschaft und Technik zu verbessern und ihren Entwicklungsprozess zu beschleunigen. Die vier Institutionen entwickeln modernste integrierte Programmierwerkzeuge für Höchstleistungsrechner, die die Programmierer dabei unterstützen sollen, Programmfehler zu identifizieren und das Leistungsverhalten zu optimieren. Den Schwerpunkt bilden dabei Skalierbarkeit und einfache Handhabung der Werkzeuge auf extrem großen Rechnersystemen.

Dabei setzen die Partner auf Technologien, die sie selbst im Rahmen langjähriger Projekte entwickelt haben. Im Vordergrund steht die Analyse von Kommunikationsmustern anhand von Ereignisspuren, die die Programmausführung in kleinsten Schritten protokollieren und die Aufdeckung von ineffizientem Verhalten erlauben. Ebenso sollen Central Processing Unit-interne Leistungsindikatoren, so genannte Hardware-Zähler, bei der Diagnose von Leistungsengpässen behilflich sein. Die Fehlererkennung zielt vorwiegend auf die inkorrekte Benutzung von Kommunikationsmechanismen. Insgesamt erhoffen sich die Partner, durch eine beschleunigte und qualitativ verbesserte Programmoptimierung und Fehlerbehebung sowohl den Entwicklungsprozess zu verkürzen als auch die später benötigte Rechenzeit zu minimieren. Das spart Kosten und steigert gleichzeitig das Potenzial der Simulations-Programme, die durch verbesserte Performanz und Skalierbarkeit auch anspruchsvollere Ergebnisse hervorbringen können. Um diese Vision möglichst effektiv umzusetzen, sollen die im Rahmen des virtuellen Instituts entwickelten Werkzeuge den Endbenutzern durch geeignete Trainings- und Unterstützungsangebote näher gebracht werden.

Virtuelle Institute sind ein bewährtes Förderinstrument der Helmholtz-Gemeinschaft. Helmholtz-Zentren und Universitäten nutzen dieses Instrument zur Bündelung von Forschungskompetenzen, um da-

durch Kooperationen von internationaler Bedeutung in den zentralen Forschungsbereichen zu fördern. Insgesamt fügt sich das VI-HPS nahtlos ein in die langfristige Kooperation und die gemeinsamen Initiativen zwischen der RWTH Aachen und dem Forschungszentrum Jülich im Bereich Simulation Science und Supercomputing. Die Helmholtz-Nachwuchsgruppe in Jülich ist gleichzeitig Mitglied der Graduiertenschule Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science, kurz AICES, die der RWTH Aachen im Rahmen der deutschen Exzellenzinitiative bewilligt wurde, um qualifizierten Studierenden im Bereich Computational Engineering Science die Promotion zu ermöglichen. Die von der

RWTH Aachen und dem Forschungszentrum Jülich gemeinsam geplante German Research School for Simulation Sciences, kurz GRS, wird begabten Studierenden durch das Graduiertenprogramm Computational Science and Engineering und durch den Bezug zum Hochleistungsrechnen spannende Ausbildungsmöglichkeiten bieten. Schließlich wird die bisher schon intensive Zusammenarbeit zwischen beiden Organisationen durch die Jülich Aachen Research Alliance, kurz JARA, weiter vertieft und strategisch ausgerichtet.

Am Virtuellen Institut High-Productivity Supercomputing, VI-HPS, sind beteiligt:

- Forschungszentrum Jülich gemeinsam mit der RWTH Aachen: Helmholtz-Nachwuchsgruppe Leistungsanalyse paralleler Programme
www.fz-juelich.de/zam/helmholtz-group/
- RWTH Aachen: Lehrstuhl für Informatik 12 (Hochleistungsrechnen) und das Rechen- und Kommunikationszentrum
www.sc.rwth-aachen.de
- Technische Universität Dresden: Zentrum für Informationsdienste und Hochleistungsrechnen (ZIH)
www.tu-dresden.de/zih
- University of Tennessee, Knoxville, USA: Innovative Computing Laboratory (ICL)
www.icl.cs.utk.edu

Autoren:
Univ.-Prof. Christian Bischof, Ph.D., ist Inhaber des Lehrstuhls Informatik 12 (Hochleistungsrechnen), Leiter des Rechen- und Kommunikationszentrums und Stellvertretender Sprecher des Virtuellen Instituts High-Productivity Supercomputing.
Prof. Dr.rer.nat. Felix Wolf ist Juniorprofessor für Leistungsanalyse paralleler Programme, Nachwuchsgruppenleiter am Forschungszentrum Jülich und Sprecher des Virtuellen Instituts High-Productivity Supercomputing.

www.vi-hps.org

Anzeige

Ihr Weiterbildungspartner (auch nach dem Erststudium) ZwW e.V. (FH Köln) mit aktuellen Weiterbildungsangeboten, z.B.:

Berufsbegleitendes Weiterbildungsstudium: **Fachplaner/in und Bauleiter/in Brandschutz; Brandschutzkoordinator/in**

Ein berufsbegleitendes zweisemestriges Weiterbildungsstudium für die Bereiche Architektur, Ingenieurwissenschaften, Handwerk und Bauhandwerk.

Ort: Fachhochschule Köln

Kursbeginn: März 2008 Kurskosten: Eur 2600,-

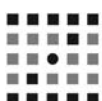
„Toleranzexperte/-in im Fahrzeug und Maschinenbau“

Angesprochen sind Ingenieur/innen und Techniker/innen, die Toleranzen festlegen, beurteilen und fertigungs- oder messtechnisch umsetzen oder überwachen müssen. Die Kurse sind auch einzeln buchbar.

Kurstermine:	14. + 15.2.08	Grundlagen der Toleranzfestlegung
	10. + 11.3.08	Berechnungsmethoden zur Abstimmung von Toleranzketten
	10. + 11.4.08	Systematische Toleranzfestlegung
		Ort: Fachhochschule Köln

Bitte informieren Sie sich unter www.bildungsscheck.nrw.de über die Möglichkeit einer Teilkostenerstattung der Kursgebühren (50% der Kosten/maximal 500 Euro)

Informationen und Beratung: ZwW der Fachhochschule Köln e. V.
Annette Grundmann · Tel.: 0221/8275-3145
weiterbildung@fh-koeln.de · www.fh-koeln.de (Weiterbildung)



Zentrum für wissenschaftliche Weiterbildung der Fachhochschule Köln (ZwW) e.V.

Anzeige




Der Veranstaltungsort der Region.

Ob Kongress, Tagung, Konzert, Ballettaufführung, Ball oder Ausstellung: hier finden Sie stets den richtigen Rahmen.

Top-Technik, variables Raumangebot, Spitzen-gastronomie, Kongress-Service etc. sind hier selbstverständlich!

Das gewisse "Mehr" bei uns: Individueller Service.

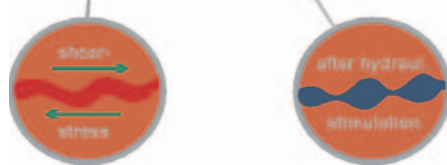
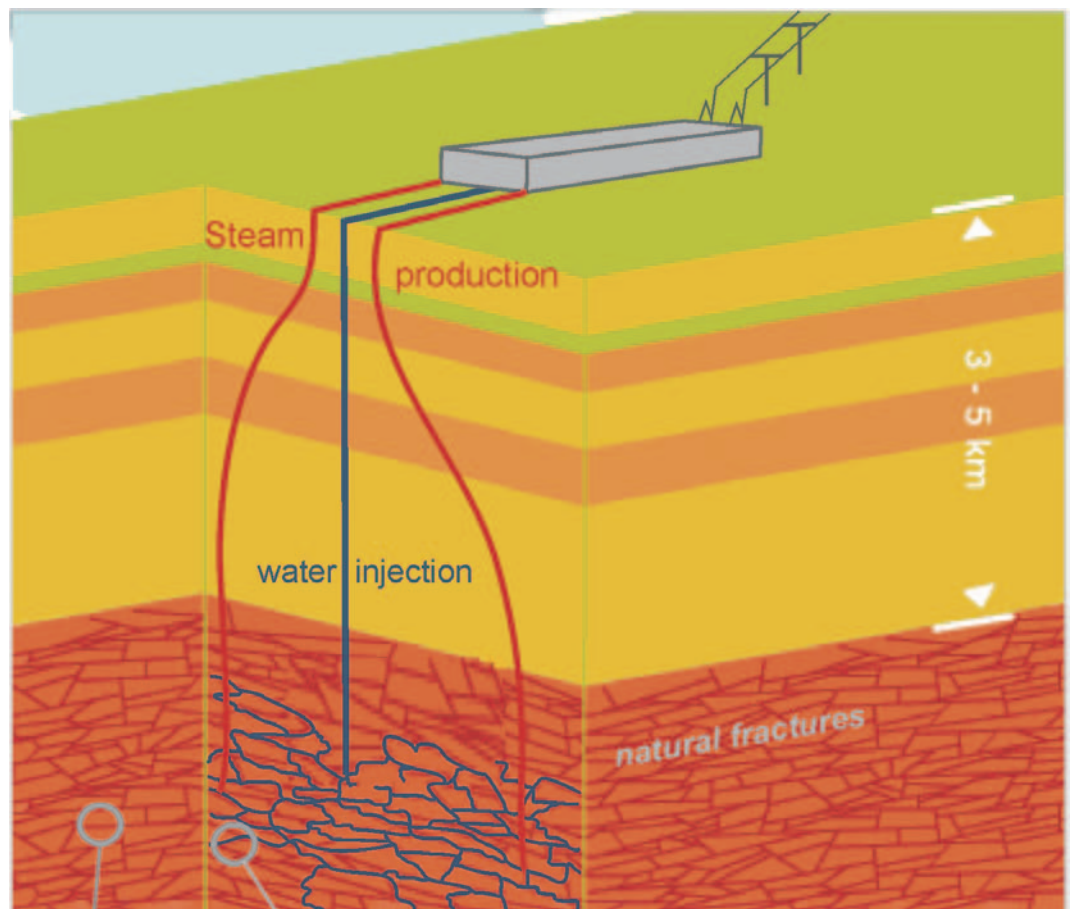
Wir informieren Sie!

Eurogress Aachen
Monheimsallee 48
52062 Aachen
Telefon 0241/9131-230
Telefax 0241/9131-200
info@Eurogress-Aachen.de

Neue Wege bei der Nutzung von Erdwärme und Speicherung von Kohlendioxid

Unsere Zivilisation bedarf vieler in der Erde befindlicher Ressourcen. Einige Feststoffe wie Sand, Kies und Steine können direkt an der Erdoberfläche gewonnen werden. Andere, wie Kohle und Erze, müssen meist durch Bergbau erschlossen werden. Öl, Wasser und Gas dagegen sind in den Poren und Spalten der Gesteine gespeichert, aus denen sie nur mit großem technischem Aufwand in Bohrungen gefördert werden können. Erdwärme schließlich ist allgegenwärtig in der Erde und sowohl in ihren festen wie flüssigen Bestandteilen enthalten. Daher kann sie unter anderem durch die Förderung von heißem Wasser oder Dampf gewonnen werden.

Länder wie Deutschland, die außerhalb der risikoreichen Vulkanzonen der Erde liegen, besitzen keine natürlichen Heißdampffelder, die wie etwa in Island oder Italien direkt zur Stromerzeugung genutzt werden können. Dennoch enthält auch hier der Untergrund riesige Mengen an Wärmeenergie. Diese in Strom zu wandeln erfordert jedoch die Schaffung künstlicher Wärmetauscher im tiefen Untergrund, was nach wie vor eine große geowissenschaftliche und verfahrenstechnische Herausforderung ist. Hierzu wird undurchlässiges, natürliches Festgestein in Tiefen von etwa fünf Kilometern durch Einpressen kalten Wassers unter hohem Druck aufgebrochen, damit es danach von Wasser durchströmt werden kann, welches ihm die Wärme entzieht, siehe Bild 1. Wiewohl diese Technologie der „Reservoirstimulation“ auch bei der Öl- und Gasförderung aus Sedimentgesteinen verwendet wird, unterscheiden sich die Verhältnisse im – meist kristallinen – Festgestein hiervon wesentlich. Entscheidend für den Erfolg oder Misserfolg der technischen Reservoirstimulation sind die dadurch ermöglichten Fließraten zwischen den Einspeise- und Förderbohrungen im System. Sind diese nicht hinreichend für eine wirtschaftliche Stromerzeugung, müssen Wege ermittelt werden, wie diese er-



hydraulic stimulation of naturally fractured rock under shear stress

höht werden können.

Um die Fließraten erhöhen zu können, muss das Strömungsverhalten in den komplizierten Poren- und Kluftsystemen der Gesteine verstanden werden. Neben hydraulischen Testen und Markierungsversuchen zum Erkennen der Strömungspfade eröffnet die numerische Simulation von Strömung und Wärmetransport die Möglichkeit, den Einfluss verschiedener Parameter, unter anderem Druck und Temperatur, auf das

Systemverhalten zu untersuchen. Auf diese Weise können unterschiedliche Optionen zur Erhöhung der Fließraten untersucht und bewertet werden. Mit diesen Fragen beschäftigen sich die Wissenschaftler am Lehrstuhl Applied Geophysics and Geothermal Energy des E.ON Energy Research Center der RWTH Aachen. Die Bilder 2 und 3 zeigen ein Beispiel für eine solche Simulation. Die Untersuchungen belegen, dass wegen der eng begrenzten

Bild 1: Prinzipbild eines technisch angelegten Untergrundwärmetauschers zur Verstromung von Erdwärme in Regionen ohne natürlichen Dampfplatzstätten (nach: www.geodynamics.com.au). Nach Aktivierung einer unter Scherspannung stehenden Kluft (links unten: rot) entsteht neuer Porenraum, der durch den seitlichen Versatz der Kluft offen gehalten wird (unten rechts: blau).

Simulationen vermitteln Einsicht in Prozesse vom Mikrometer- bis Kilometermaßstab

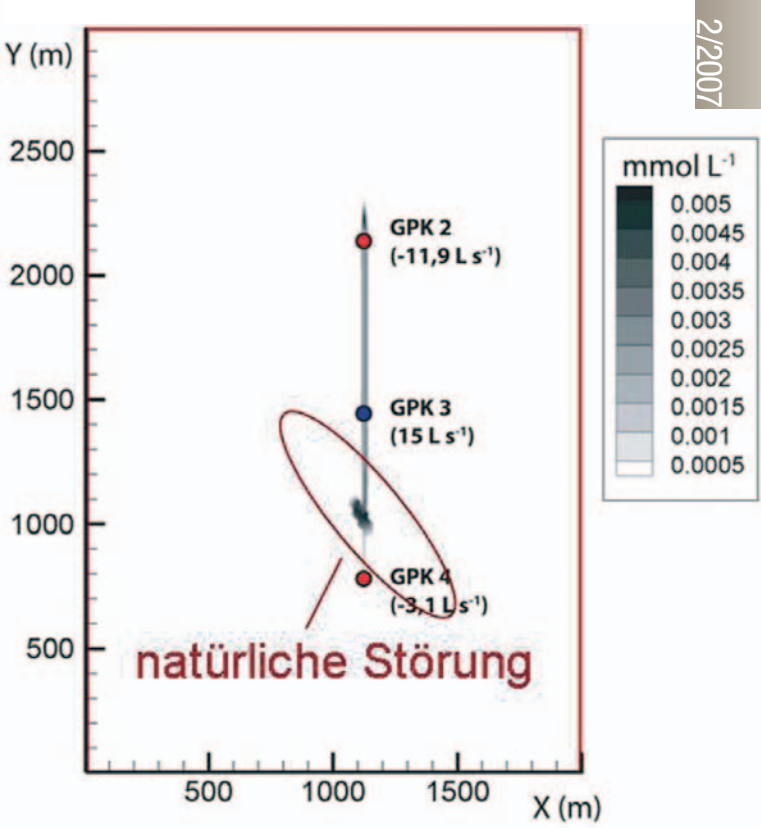
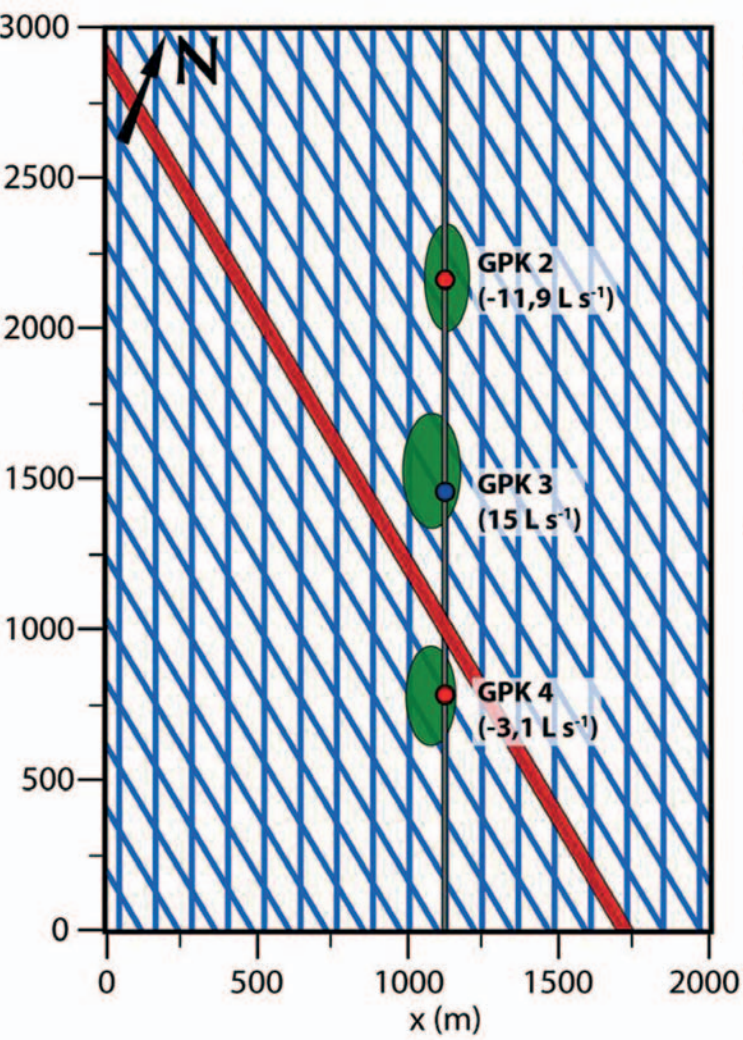
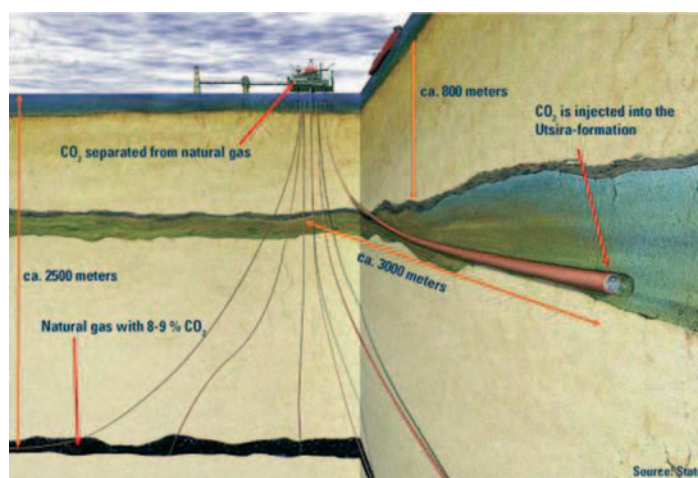
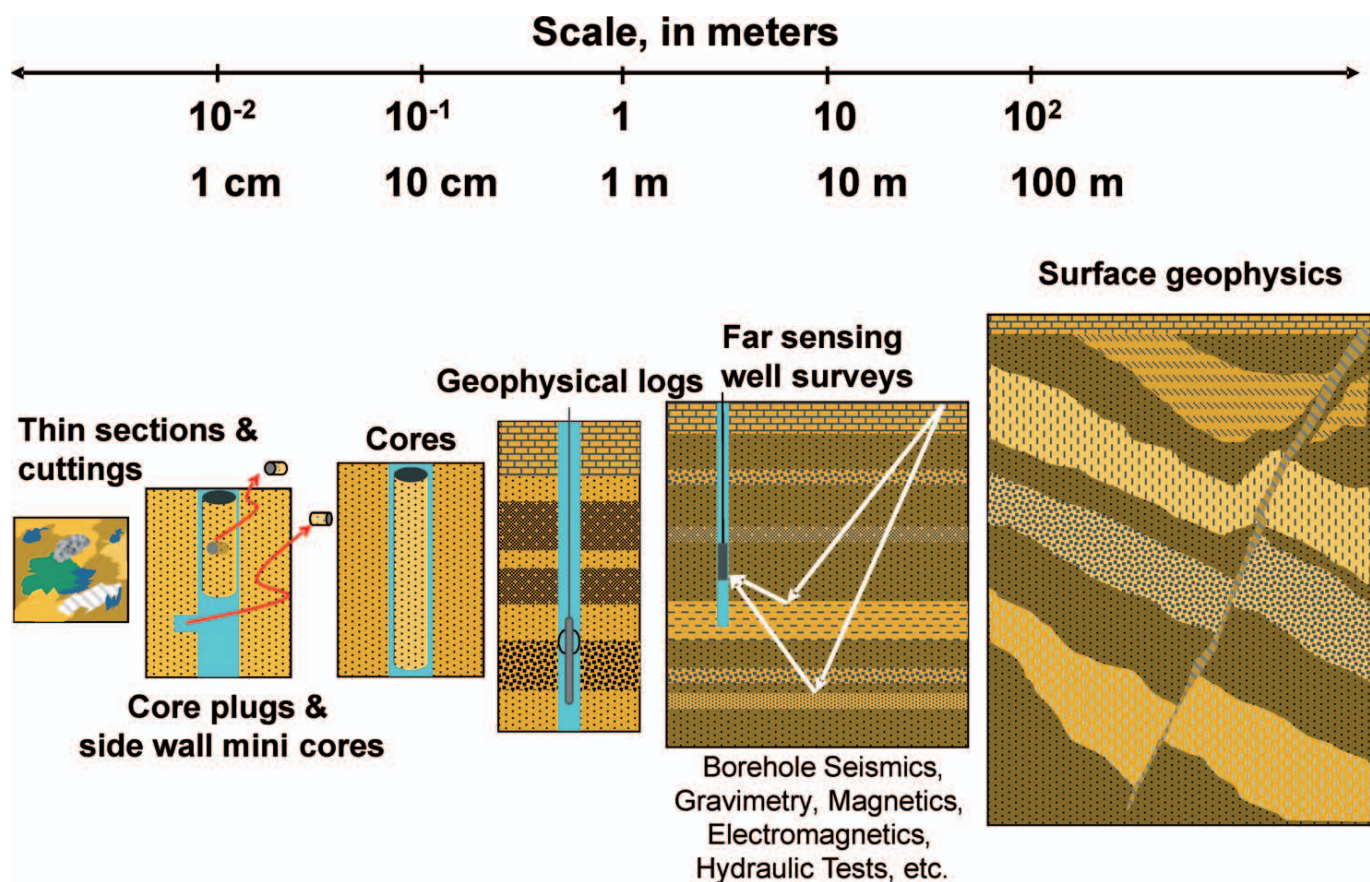


Bild 2: Links: Horizontalschnitt durch ein Modell eines stimulierten Reservoirs in kristallinem Gestein. Graue Linie: technisch angelegte Kluft zwischen den drei Bohrungen (rote Punkte: Förderbohrungen GPK2 und GPK4; blauer Punkt: Einspeisebohrung GPK3); Blaue Linien: natürliches Kluftsystem; rote Linie: natürliche Störungszone; Grüne Bereiche: technisch stimulierte Zonen im Bereich der Bohrungen.

Rechts: Simulierte Verteilung des Markierungsstoffs nach 150 Tagen: Die Ausbreitung des bei der Bohrung GPK3 eingespeisten Markierungsstoffs (Konzentration: Grautöne) erfolgt vorwiegend entlang der angelegten verbindenden Kluft, wenig in der großen natürlichen Störung und praktisch gar nicht durch die Mikrokluften des Gesteins. (Blumenthal, 2007).



42 Bild 4: Schema der Untertagespeicherung von Kohlendioxid (Quelle: www.sintef.no).

Strömungswege nur ein geringer Teil des Gesteins durchströmt und deshalb auch nur ein geringer Teil der Wärme in Strom gewandelt werden kann. Die ursprünglich geplante elektrische Leistung über die projektierte Betriebsdauer von 20 Jahren hinweg ist demzufolge nicht realistisch. Die durch zusätzliche technische Stimulationsmaßnahmen erzielbaren Verbesserungen des Betriebsverhaltens können durch weitere derartige Auslegungsrechnungen optimiert werden. Neben solchen „direkten“ Auslegungsrechnungen kann mit

Hilfe von „inversen“ Simulationen die Erkundung, Erschließung und Nutzung neuer geothermischer Felder optimiert werden. Diese Berechnungen gestatten es beispielsweise, die Durchlässigkeit des Untergrunds aus Temperatur und Druckdaten zu schätzen oder die Lage und Tiefe neuer Erkundungsbohrungen zu optimieren. In beiden Fällen ist es möglich, auch die Unsicherheit der ermittelten Zielgrößen zu schätzen. Dies ist für Sicherheits- und Finanzierungsaspekte von großer Bedeutung. Bei solchen Berechnungen müssen

Bild 3: Unterschiedliche Längenskalen kennzeichnen die für die Charakterisierung des Untergrunds zur Verfügung stehenden Informationen. Für eine numerische Simulation

müssen diese Information auf repräsentative Homogenbereiche in der Größenordnung der Gitterzellen interpoliert beziehungsweise extrapoliert werden.

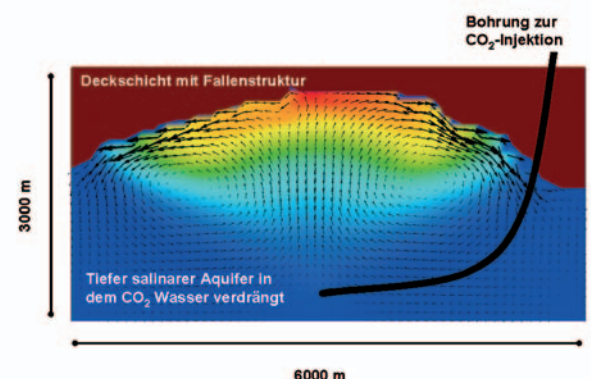


Bild 5: Prinzipbild der Einlagerung von Kohlendioxid in ein geologisches Reservoir (rote

und gelbe Töne: hohe Konzentration; grüne und blaue Töne: niedrige Konzentration).

die wirksamen Prozesse teilweise über mehrere Größenordnungen von Skalenlängen betrachtet werden, siehe Bild 4, was eine große Herausforderung für numerische Simulationen darstellt.

Aber nicht nur als Quelle von Rohstoffen oder Energie wird die feste Erdkruste auf der wir leben genutzt, sondern auch als Speicher für Stoffe, die gefährlich oder schädlich für Mensch und Umwelt sind. Neben giftigem und radioaktivem Abfall wird derzeit auch für klimaschädliches Kohlendioxid intensiv nach Wegen gesucht,

wie es sicher im Untergrund gespeichert statt in die Atmosphäre ausgestoßen werden kann, siehe Bild 4.

Aber sind die Gesteinsschichten oberhalb von potenziellen, tief im Untergrund liegenden Speichergesteinen widerstandsfähig und undurchlässig genug, um die Lagerung des Treibhausgases über Jahrhunderte zu gewährleisten? Dieser Frage widmet sich zurzeit ein Gemeinschaftsprojekt unter Beteiligung der Lehrstühle Applied Geophysics and Geothermal Energy, sowie Geologie, Geochemie und Lagerstät-



Bild 6: Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Christoph Clauser und Dirk Breuer untersuchen Bohrkerne an einem Multisensor-Core-Logger, einem Messgerät für geophysikalische Messungen an Bohrkerne.
Foto: Peter Winandy

ten des Erdöls und der Kohle und des Lehr- und Forschungsgebiets Ton- und Grenzflächenmineralogie.

Wenn Kohlendioxid als Gas in größeren Tiefen eingeleitet wird, steigt es wegen seiner geringeren Dichte auf, bis es auf eine undurchlässige Deckschicht trifft, siehe Bild 5. Dort bildet es im Kontakt mit Wasser aggressive Kohlensäure. Diese Kohlensäure vermag bis dahin dichte Gesteinsschichten zu schädigen. Im schlimmsten Fall kommt es zum Austreten des gespeicherten Kohlendioxids. Das vormals in großer Tiefe ge-

lagerte Kohlendioxid würde dann allmählich durch die darüber liegenden Erdschichten entweichen und gegebenenfalls gelangen – genau dies soll jedoch durch die Untertage-Speicherung vermieden werden. Bei den Untersuchungen in den Laboratorien der beteiligten Einrichtungen werden unter den in mehreren hundert Metern Tiefe herrschenden Druck- und Temperaturbedingungen ausgewählte Deckgesteine wie etwa Tonsteine oder Mergel auf ihre Dichtigkeit geprüft. Dadurch soll ein besseres Verständnis der

Transport- und Zersetzungsprozesse im Untergrund sowie der Wechselwirkung des Kohlendioxids beziehungsweise der Kohlensäure mit den Gesteinen gewonnen werden. Ziel der Arbeiten ist es, verlässliche Verfahren zur Charakterisierung von Deckgesteinen potenzieller Kohlendioxid-Speicher im Untergrund zu entwickeln.

www.geophysik.rwth-aachen.de

Autor:
Univ.-Prof. Dr.rer.nat. Christoph Clauser ist Leiter des Lehrstuhls Applied Geophysics and Geothermal Energy am E.ON Energy Research Center der RWTH Aachen.

Virtueller Test für Biowerkstoffe

Werkstoffe werden seit jeher meist durch empirische Verfahren entwickelt. Verbesserungen resultieren dabei einerseits aus der Erfahrung, wie sich Legierungszusätze auf die Eigenschaften auswirken, und andererseits aus einigen einfachen thermodynamischen Zusammenhängen bezüglich Stabilität und Darstellbarkeit auf der Basis einfachster Modelllegierungen. In diesem Zusammenhang spielen verschiedene Methoden der Computersimulation seit 15 Jahren eine wichtige Rolle, um die Werkstoff-Eigenschaften gezielt vorherzusagen.

Auf den einzelnen Skalen – von der atomaren Ebene bis zum kompletten Werkstück – haben diese Methoden inzwischen ihre Vorhersagekraft bewiesen. Schwierig ist es aber noch, die Eigenschaften eines Werkstoffs nur auf der Basis ihrer atomaren Komponenten zu berechnen. Zu diesem Zweck müssen Ergebnisse von Simulationen auf benachbarten Skalen sinnvoll miteinander verknüpft werden. Bislang wurden bestimmte Aspekte bei der Werkstoffprognose zwischen den unterschiedlichen Modellen und Skalen mit Hilfe von Multiskalenverfahren weitergegeben. Aufgrund der enormen Unterschiede zwischen der atomaren und der makroskopischen Skala wird es aber auch in Zukunft nicht möglich sein, einen Werkstoff komplett über alle Skalen hinweg durchgehend zu simulieren. Das lässt sich an einem einfachen Beispiel veranschaulichen: Elektronische Anregungen laufen im Bereich von Picosekunden ab, wohingegen Prozesse der Korrosion oder der Materialermüdung in der Größenordnung von Jahren anzusiedeln sind. Bezüglich der Ortsskala bewegen sich die relevanten Größenordnungen vom Sub-Angströmbereich, also kleiner als 10^{-10} Meter, bis hin zu Hunderte Meter große Konstruktionen, Bild 1.

Als Alternative zur Multiskalensimulation wurde am Max-Planck-Institut für Eisenforschung in Düsseldorf das Verfahren der skalenüberbrückenden Werkstoffsimulation entwickelt, um

Vorhersagen von der atomaren Ebene bis hin zur Makroskala vornehmen zu können. Dabei werden, anders als bei der beschriebenen sukzessiven Weitergabe von Informationen von Skala zu Skala, quantenmechanische Ergebnisse der Elektrentheorie unmittelbar auf der makroskopischen Ebene eingebunden.

Quantenmechanisch geführtes Werkstoffdesign

Der Erfolg der neuen Methodik kann am Beispiel zweier jüngst entwickelter Biowerkstoffe für Implantatanwendungen gezeigt werden. Als Ausgangsbasis für die Materialentwicklung dient das Implantatmetall Titan. Es ist bioverträglich und besitzt eine hohe Härte. Allein im Hüftbereich werden jährlich weltweit mehr als eine Million Prothesen daraus eingesetzt.

Trotz seiner positiven Eigenschaften besteht beim Einsatz von Titan ein bisher ungelöstes Problem: Während der menschliche Knochen eine elastische Steifigkeit von etwa 20 Giga Pascal, kurz GPa, besitzt, bewegen sich die entsprechenden Steifigkeiten der Titanimplantate im Bereich von 100 bis 110 GPa. Diese Diskrepanz führt zum Effekt der mechanischen Abschirmung. Das bedeutet, dass die im betroffenen Körperteil übertragene Kraft nicht mehr vom Knochen, sondern überwiegend vom metallischen Implantat getragen wird. Da der Knochen seine innere Struktur und mechanische Leistungsfähigkeit aber in Abhängigkeit von der anliegenden mechanischen Spannungen verändert, führt seine künstliche Entlastung durch das Implantat im Laufe der Zeit zu seiner Schwächung. In der Folge kommt es zur Knochenschädigung und zur Lockerung des Implantats. Auch die Entstehung von Entzündungsherden an der Grenzfläche zwischen Knochen und Implantat ist ein großes Problem.

Vor diesem Hintergrund sollten mit Hilfe der Verknüpfung von Quantenmechanik und Kontinuumsmechanik gleichzeitig experimenteller

Überprüfung der Vorhersagen neue titanbasierte Legierungen hergestellt werden, die eine deutlich geringere Steifigkeit haben als bisherige Materialien und gleichzeitig über eine hervorragende Bioverträglichkeit und Härte verfügen. Nur auf diesem Wege kann eine höhere mechanische Kompatibilität erreicht werden, die zu einer wesentlich verbesserten Langlebigkeit der Implantate im menschlichen Körper beitragen würde. Der Einsatz quantenmechanischer Rechnungen zeigte, dass Titan, welches in der Natur bei Raumtemperatur nur in einer hexagonalen Kristallstruktur vorkommt, in der kubisch-raumzentrierten Kristallstruktur eine deutlich reduzierte Steifigkeit aufweist.

Der Entwicklungsansatz bestand daher darin, die kubisch-raumzentrierte Gitterstruktur, die beim reinen Titan nur bei hohen Temperaturen auftritt, durch eine geeignete Legierung auch bei Raumtemperatur zu stabilisieren. Zu diesem Zweck wurden Legierungen aus Titan und den hochschmelzenden kubisch-raumzentrierten Metallen Niob und Molybdän analysiert, die medizinisch beide unbedenklich sind. Im ersten Schritt wurde dabei die Stabilität verschiedener Legierungen aus Titan und Niob sowie aus Titan und Molybdän mit ab-initio-Verfahren, also Verfahren, die keine empirischen Parameter benötigen, untersucht. Angeleitet durch diese theoretischen Vorhersagen wurden entsprechend aussichtsreiche Proben durch schmelzmetallurgische Verfahren hergestellt und am Elektronenmikroskop hinsichtlich der zuvor getroffenen ab-initio-Vorhersagen überprüft, Bild 2. In der Tat belegen sowohl die quantenmechanischen Rechnungen als auch die Experimente, dass mit zunehmendem Gehalt an Niob beziehungsweise Molybdän im Titan die kubisch-raumzentrierte Struktur des Materials bei Raumtemperatur eingestellt werden kann.

Der zweite wichtige Schritt bei der Entwicklung der neuen Implantatlegierungen bestand nun

darin, durch entsprechende ab-initio-Rechnungen zu untersuchen, wie es um die elastischen Eigenschaften der neuen Materialien im Hinblick auf einen späteren Einsatz als Implantatmaterial bestellt ist. Die elastische Steifigkeit der neuen Titan-Legierungen verlässlich vorhersagen zu können, ist dabei besonders wichtig, da die metallurgische Herstellung und die experimentelle Überprüfung der Elastizität an einer Vielzahl von Proben unterschiedlicher Zusammensetzung mit beträchtlichem Aufwand verbunden ist. Das bedeutet, dass im Falle des Erfolges der neuen Strategie zur Werkstoffentwicklung in Zukunft verbesserte oder auch gänzlich neue Materialien um ein Vielfaches schneller entwickelt werden können als bisher. Außerdem werden sich eine große Anzahl teurer, aufwändiger und komplizierter Experimente umgehen lassen.

Ein weiterer wertvoller Aspekt der ab-initio-Vorhersage der Elastizität einer Probe besteht darin, dass diese sowohl für eine Eigenschaft der Elementarzelle mit wenigen Atomen zutrifft, als auch für eine großformatige Probe, etwa ein Implantat, gilt. Anders gesagt, die ab-initio-Simulation der elastischen Steifigkeit dient auch unmittelbar der Vorhersage der makroskopischen Eigenschaften eines Materials, obwohl sie auf atomistischer Skala durchgeführt wurde. Im vorliegenden Fall der untersuchten Titan-Niob- und Titan-Molybdän-Legierungen ist zu erkennen, dass in der Tat eine hervorragende Übereinstimmung zwischen Theorie und Experiment erzielt wurde, Bild 3. Im Sinne der im ersten Absatz dargestellten Strategie der neuen Simulationsmethode wurden somit tatsächlich bereits im zweiten Teilschritt des Ansatzes viele Zehnerpotenzen zwischen den unterschiedlichen Skalen in der Vorhersagetechnik überbrückt und können nunmehr bereits makroskopische Eigenschaften auf der Basis einer ab-initio-Simulation vorhergesagt und für die technische Beurteilung eines

Quantenmechanik, Kontinuums- theorie und Experimente unterstützen die Simulation von Biowerkstoffen

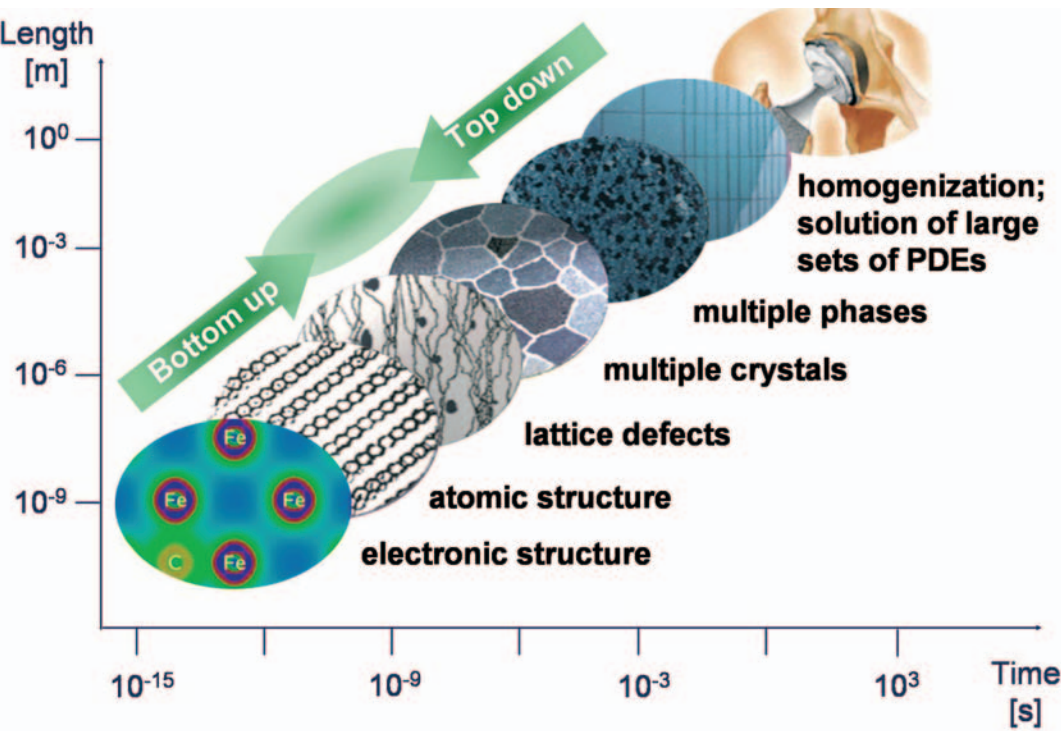


Bild 1: Unterschiedliche Modelle und Skalen im Zusammenhang mit Multiskalenverfahren bei der Werkstoffsimulation.

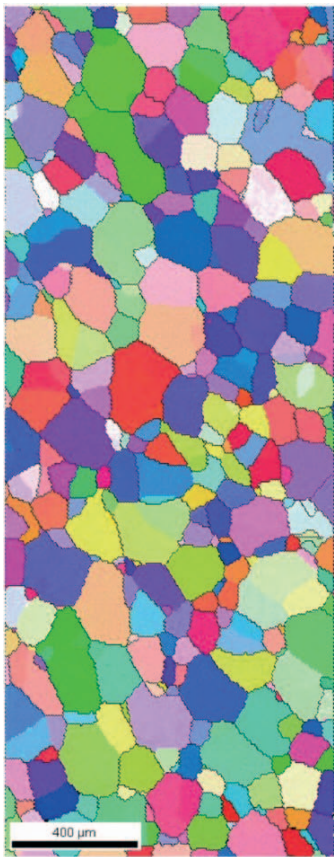


Bild 2: Mikrostruktur einer im Labor hergestellten Legierung aus Titan und Niob, deren Stabilität und Eigenschaften zuvor mittels ab-initio-Verfahren vorhergesagt worden war. Die Farbwerte der Darstellung entsprechen unterschiedlichen Orientierungen.

Werkstoffs unmittelbar herangezogen werden, Bild 4.

Der dritte Schritt der Materialentwicklung beinhaltet schließlich die Einbindung der elektronentheoretischen Ergebnisse in makroskopische Finite Elemente Rechnungen. Die Finite Elemente Methode, kurz FEM, ist ein mathematisches Verfahren zur Lösung von Differentialgleichungen, die herangezogen werden, um das Verhalten von Strukturen zu beschreiben; die Lösung der Differentialgleichungen ist für einfache Geometrien und Aufgabenstellungen möglich, nicht jedoch für komplexe diskontinuierliche Systeme, weshalb man die FEM als numerisches Näherungsverfahren nutzt. Besonders relevant bei der Übertragung der ab-initio-Simulationen

sind dabei einerseits die Gitterstruktur und andererseits die elastischen Konstanten. Wie oben erwähnt, wurden die Legierungen so entwickelt, dass die kubisch-raumzentrierte Gitterstruktur bei Raumtemperatur stabil ist. Diese Information ist für die Weiterverwendung in den FEM-Rechnungen von Bedeutung, da die Gitterstruktur auch die Freiheitsgrade und damit die Richtungsabhängigkeit der elastischen und plastischen, in diesem Fall bleibenden, Verformung bestimmt.

Auch in diesem letzten Schritt der neuen Skalen überbrückenden Simulationsstrategie zeigt sich der besondere Vorteil der Verknüpfung von ab-initio-Methoden und makroskopischen Mechanikmodellen in Zusammenhang mit

FEM-Lösungsverfahren: Die ab-initio-Vorhersagen zeigten nämlich nicht nur, dass sich beispielsweise im Falle der Titan-Niob-Legierungen durch den Einsatz von Niob tatsächlich die elastische Steifigkeit der Probe deutlich gegenüber den konventionellen hexagonalen Legierungen verringern ließ und sich somit der des Knochens annäherte, sondern dass sich auch die Anisotropie, das heißt die Richtungsabhängigkeit, der Elastizität verringerte. Anders gesagt bedeutet dies, dass die neuentwickelte Legierung auf der Basis von Titan und Niob einerseits eine bessere Kompatibilität zwischen menschlichen Knochen und dem Implantat gewährleistet, und andererseits die Richtungsabhängigkeit aus der Verteilung der kristallinen

Orientierungen durch eine bessere Isotropie der Eigenschaften bereits auf der Ebene der Elementarzelle deutlich verringert wird. Die letztere Eigenschaft ist von besonderer Bedeutung, da bei der Herstellung solcher Materialien in der Regel komplexe Orientierungsverteilungen der Kristalle in einer solchen Probe herbeigeführt werden. Bezüglich der Isotropie, also dem Gleichverhalten in allen Richtungen, sind demnach die Endeigenschaften für die vorgeschlagenen Legierungen deutlich weniger von den Details der späteren Herstellverfahren abhängig.

Neben den dargestellten wissenschaftlich-technischen Vorteilen der vorgeschlagenen Verknüpfung von ab-initio-Simulationen und Finite Elemente

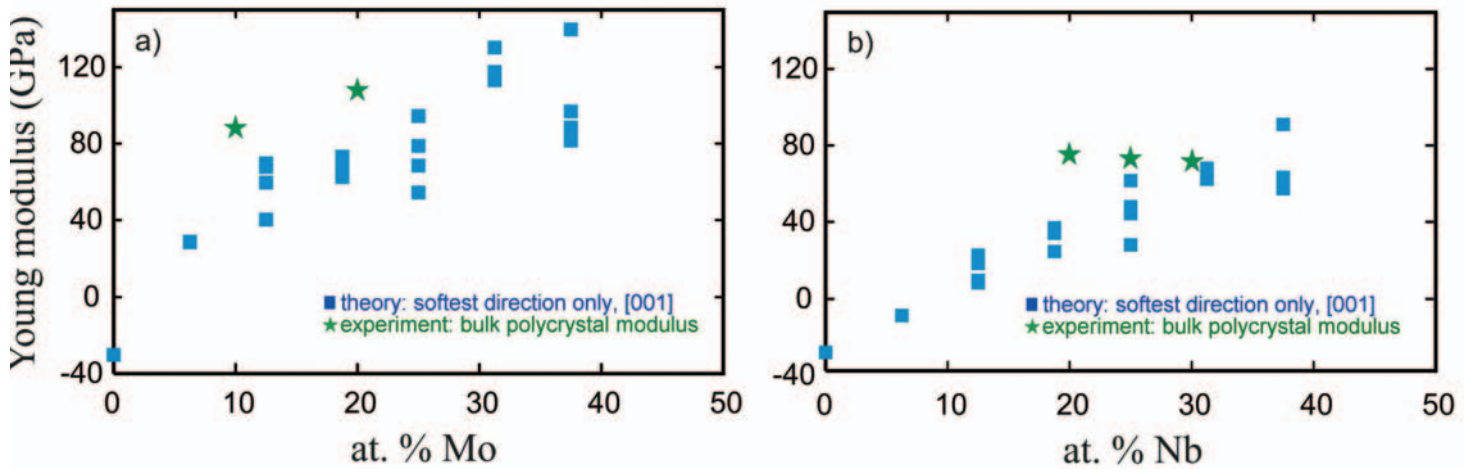


Bild 3: Vergleich der elastischen Eigenschaften der untersuchten Titan-Niob- und Titan-Molybdän-Legierungen, der die

hervorragende Übereinstimmung zwischen ab initio Theorie und Experiment belegt.

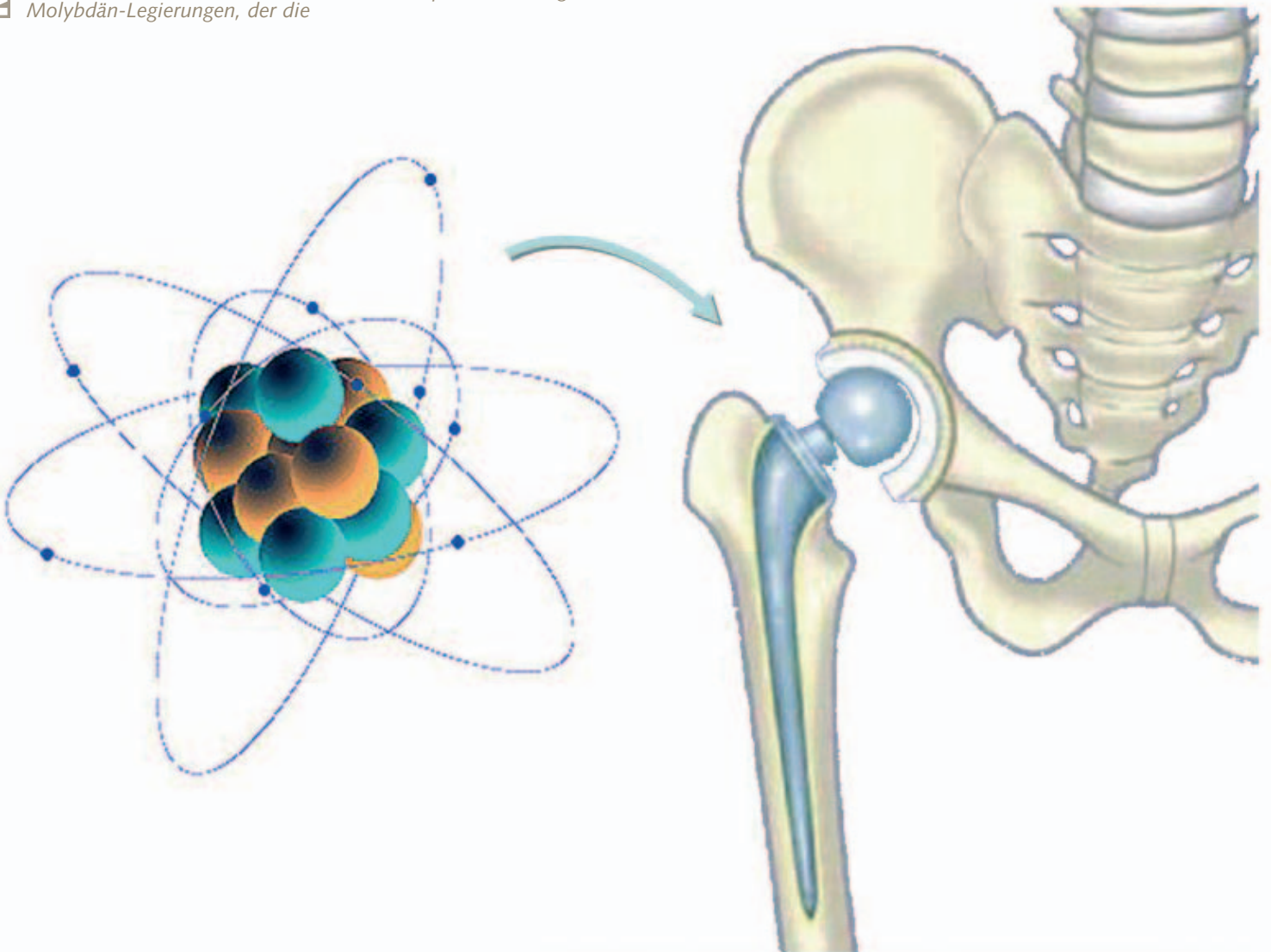


Bild 4: Mit der dargestellten Strategie der neuen Simulationsmethode können viele Zehnerpotenzen zwischen den unterschiedlichen Skalen in der Vorhersagetechnik überbrückt und makroskopische Eigenschaften auf der Basis einer ab-initio-Simulation vorhergesagt werden.

Methoden zur Überbrückung großer Skalendifferenzen bei der Werkstoffentwicklung liegt ein weiterer wichtiger Vorteil dieser Herangehensweise. Gerade im Bereich der Biwerkstoffe erlauben die elektronentheoretischen Methoden eine Vorhersage der Stabilität möglicher neuer Legierungen unter der Einschränkung der Auswahl nur ganz bestimmter, nämlich bioverträglicher Legierungselemente. Auch liefert die Verwendung von ab-initio-Ansätzen

in diesem Zusammenhang einen beträchtlichen Erkenntnisgewinn bezüglich der elektronischen Wirkung bestimmter Legierungselemente und erlaubt somit Einblicke in die Grundlagen der Bindungstheorie von Werkstoffen.

www.imm.rwth-aachen.de

www.mpie.de

Autoren:

Prof. Dr. Jörg Neugebauer ist Direktor der Abteilung Computational Materials Design am Max-Planck-Institut für Eisenforschung in Düsseldorf. Prof. Dr.-Ing. Dierk Raabe ist außerplanmäßiger Professor am Lehrstuhl für Allgemeine Metallkunde und Metallphysik und leitet die Abteilung Mikrostrukturphysik und Umformtechnik als Direktor am Max-Planck-Institut für Eisenforschung in Düsseldorf.



In Ihrem eigenen Unternehmen machen Sie schneller Karriere.

Mit Deutschlands wichtigstem Finanzierer von Existenzgründungen.



Wir befördern Sie sofort zum Chef! Denn die Sparkassen-Finanzgruppe unterstützt mehr als die Hälfte aller Existenzgründungen in Deutschland und steht Ihnen als kompetenter Partner für die Planung und die Finanzierung Ihrer Firma gerne zur Seite. Mehr dazu in Ihrer Geschäftsstelle oder unter www.sparkasse.de. **Wenn's um Geld geht – Sparkasse.**

Rechnen auf Zehntausenden von Prozessoren – wo muss ich klicken?

Heute ist die Computersimulation technischer Systeme wie Flugzeuge oder Autos ein standardmäßiger Teil des Designprozesses in praktisch jeder Firma. Das läuft ähnlich wie bei der Textverarbeitung oder Tabellenkalkulation, die häufig serienmäßige Softwaretools verwendet und durch illustrierte Bedienunterlagen, professionelle Kommunikation und anwenderfreundliche graphische Benutzeroberflächen unterstützt wird.

Warum beharren dann so viele Ingenieure, Informatiker und Mathematiker der RWTH darauf, ihre eigene Computersoftware beizubehalten? Warum lernen Studierende im Bereich Computational Engineering Science in Theorie und Praxis ihr eigenes Simulationsprogramm umzusetzen?

Skalierbarkeit

Die erste Antriebskraft ist die Notwendigkeit, rechnergestützte Leistung auszunutzen, die nur durch Parallelrechenanlagen zur Verfügung gestellt werden kann. Seit vielen Jahren werden Personal Computer immer schneller. Das Mooresche „Gesetz“ aus den 1960er Jahren prognostizierte, dass sich die Leistungsfähigkeit von Computern alle 18 Monate annähernd verdoppeln würde, siehe Bild 1. Ein Personal Computer war jedoch nie leistungsfähig genug, um die anspruchsvollsten Probleme im Bereich des Computational Engineering, beispielsweise rechnergestützte Strömungsdynamik (CFD), Klimamodellierung oder Molekularbiologie zu lösen. Die höchste Berechnungsrate kann nur erlangt werden durch die Leistungsnutzung von 1.000 und neuerdings 10.000 gleichzeitig arbeitenden Prozessoren. Diese spezialisierten Maschinen - parallele Höchstleistungsrechner - sind teuer, selten und beanspruchen unübliche Software.

Einer der leistungsstärksten Computer dieser Art in Europa befindet sich im Forschungszentrum Jülich und ist ein IBM Blue Gene L Computer mit exakt 16.384 ($=2^{14}$) Prozessoren. Obwohl einige der serienmäßigen Simulationsprogramme in der

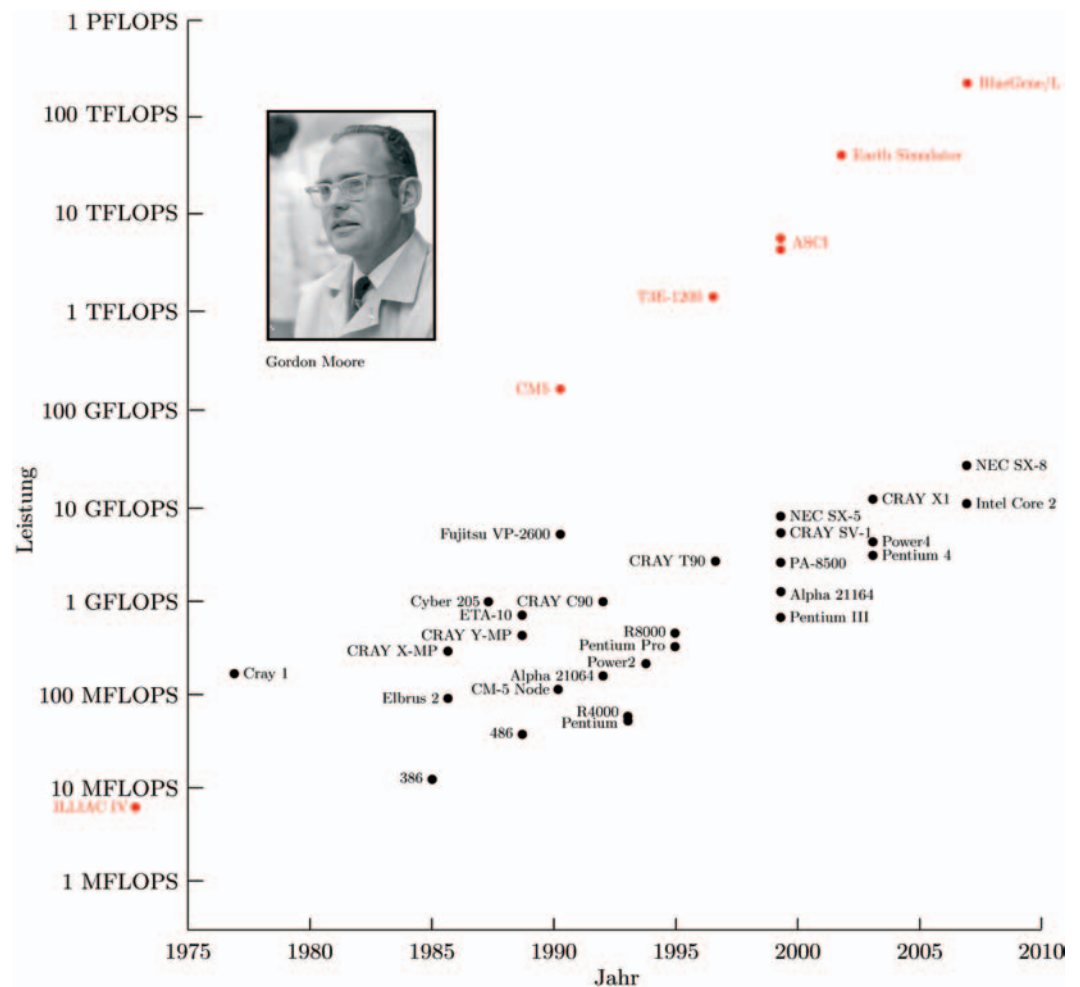


Bild 1: Darstellung des Mooreschen Gesetzes: Entwicklung der Computer Arbeitsleistung in FLOPS (Gleitkomma-Rechnung pro Sekunde) über einen Zeitraum von 35 Jahren. Schwarze Punkte zeigen

Single-Chip Computer, rote Punkte zeigen parallele Höchstleistungsrechner. Gordon Moore ist Mitbegründer der Intel Corporation und Urheber des gleichnamigen Gesetzes.

Lage sind, auf zehn oder 100 Prozessoren zu laufen, sind die Lizenzgebühren entsprechend hoch und die technischen Anforderungen, die einen effizienten Lauf auf 100 Mal so viel Prozessoren ermöglichen, signifikant unterschiedlich. Am Lehrstuhl für Computergestützte Analyse Technischer Systeme, kurz CATS, ist ein selbstentwickeltes Programm mit dem Namen XNS in der Lage, 4096 Prozessoren von Blue Gene effizient auszunutzen, siehe Bild 2. Es ist absehbar, dass sich in zehn Jahren auch die Schreibtisch-

computer auf 10.000 Prozessoren stützen werden. Notwendigerweise sollte serienmäßige Software dieser Hardware angepasst werden. Bis zu diesem Zeitpunkt wird sich die Aufmerksamkeit von Forschungseinrichtungen, die ihre selbstentwickelte Software beibehalten, dem Quantum Computer zugewandt haben!

Modelle

Entscheidende Bestandteile der Computersimulation sind Modelle, also mathematische Verhältnisse, die relevante physikali-

sche, chemische oder biologische Prozesse beschreiben. In vielen neuen Anwendungsgebieten müssen diese Modelle noch entwickelt werden. Zum Beispiel werden am Lehrstuhl CATS Modelle entwickelt, die die Eigenschaften des Blutflusses in biomedizinischen Geräten betreffen. Dabei geht es darum, welche Effekte bestimmte Eigenschaften des Blutflusses, wie etwa die variierende Geschwindigkeitsverteilung, auf die Bestandteile des Blutes, zu denen die Erythrozyten gehören, haben. Viele mechanische Geräte

Strömungssimulation mit skalierbaren Simulations-Codes und maßgeschneiderten Modellen

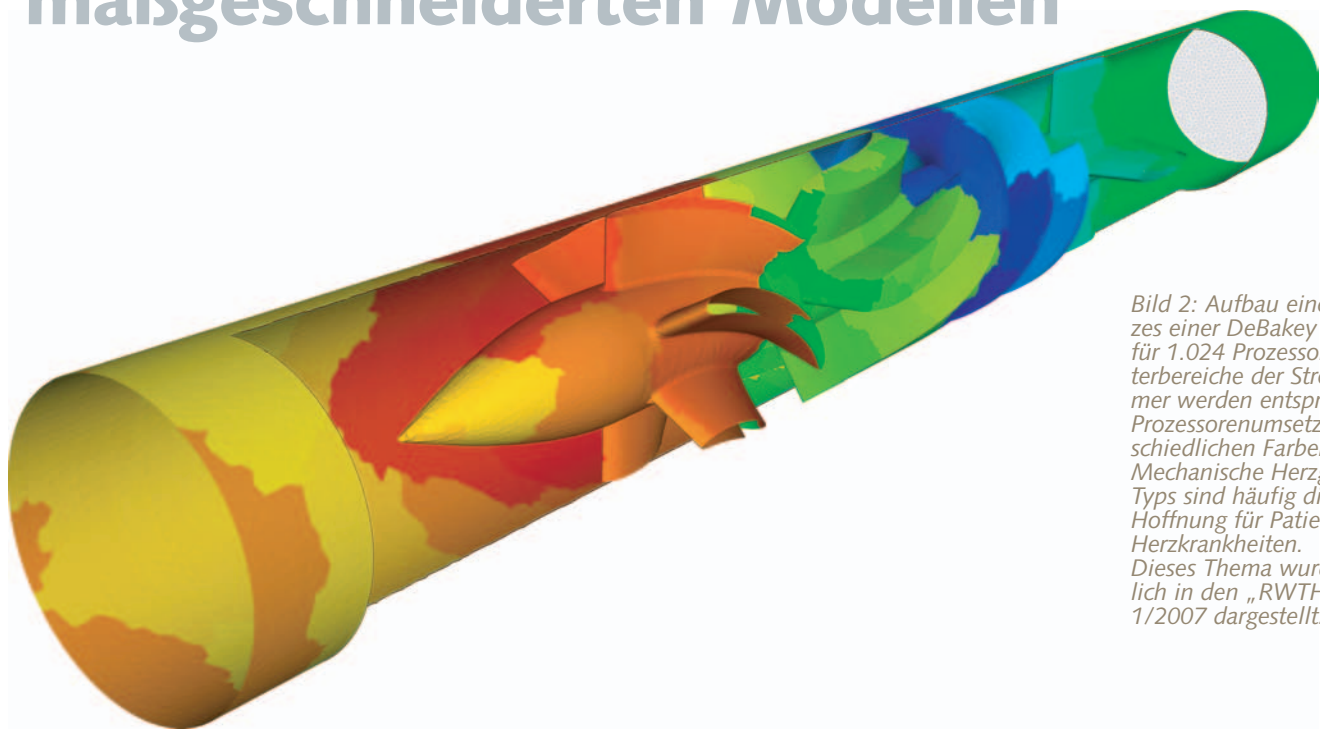


Bild 2: Aufbau eines Gitternetzes einer DeBakey Blutpumpe für 1.024 Prozessoren. Die Unterbereiche der Strömungskammer werden entsprechend der Prozessoren Umsetzung in unterschiedlichen Farben angezeigt. Mechanische Herzgeräte dieses Typs sind häufig die letzte Hoffnung für Patienten mit Herzkrankheiten. Dieses Thema wurde ausführlich in den „RWTH-Themen“ 1/2007 dargestellt.

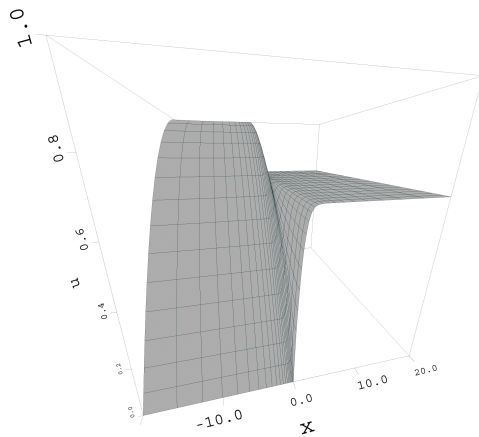
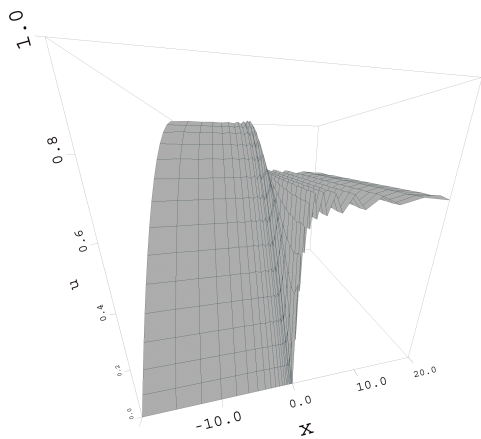


Bild 3: Gute Simulation versus schlechte Simulation: Geringfügige Änderungen der rechnergestützten Methoden können zu unrealistischen Ergebnissen führen. Zu sehen ist hier ein Geschwindigkeitsprofil $u(x,y)$ eines Durchflusses in einem Flussbett ohne und mit unphysikalischer Schwingung.

zum Bluttransport produzieren unnatürliche Durchflussmuster, welche einen ungünstigen Einfluss auf die Blutzellen haben können. Exakte Modelle, die die Tendenz des Blutes zu gerinnen oder die vorzeitige Abgabe von Hämoglobin vorhersagen können, werden zurzeit entwickelt und sind typischerweise nicht in einem kommerziellen Softwarepaket erhältlich.

Unsicherheiten
Alle Computersimulationen sind Annäherungen an reale Systeme. Ein Simulationsergebnis soll-

te möglichst nah an der Realität sein. Vielleicht hat man jedoch ein falsches Modell gewählt oder das beste Modell ist zu diesem Zeitpunkt noch nicht ausreichend ausgearbeitet. Oder die Übersetzung mathematischer Gleichungen in ein Problem, dass der Computer lösen kann, ist zu grob - parallele Höchstleistungsrechner helfen bei diesem Problem, aber sie können es nicht eliminieren. Wie kann man nun einschätzen, ob die Simulation, siehe Bild 3, die Wirklichkeit aufzeigt? Die Minimierung von Unsicherhei-

ten ist ein Unterbereich von Computational Science, in welchem die neuesten mathematischen und programmierungstechnischen Methoden eingesetzt werden, um von vorneher ein nicht nur das Verhalten eines Systems voraussagen, sondern auch seine Reliabilität. So wie im Fall der inversen Probleme, die im nächsten Abschnitt beschrieben werden, ist eine Unsicherheitsanalyse nur möglich mit einem umfassenden Verständnis eines Simulationsprogramms.

Invertiertes Ablaufdiagramm
Jahrzehntelang wurden Computer-Simulationen als eine schnellere und billigere Version eines Experiments eingesetzt. Eine gute Simulation reproduziert zum Beispiel beim Flugzeugdesign die Ergebnisse eines aufwändigen Windtunnels oder beim Biomedical Engineering ein schädliches Experiment in einem lebenden Organismus. Im Gegensatz zu dem, was im Folgenden ausgeführt wird, lösen solche Simulationen ein „direktes“

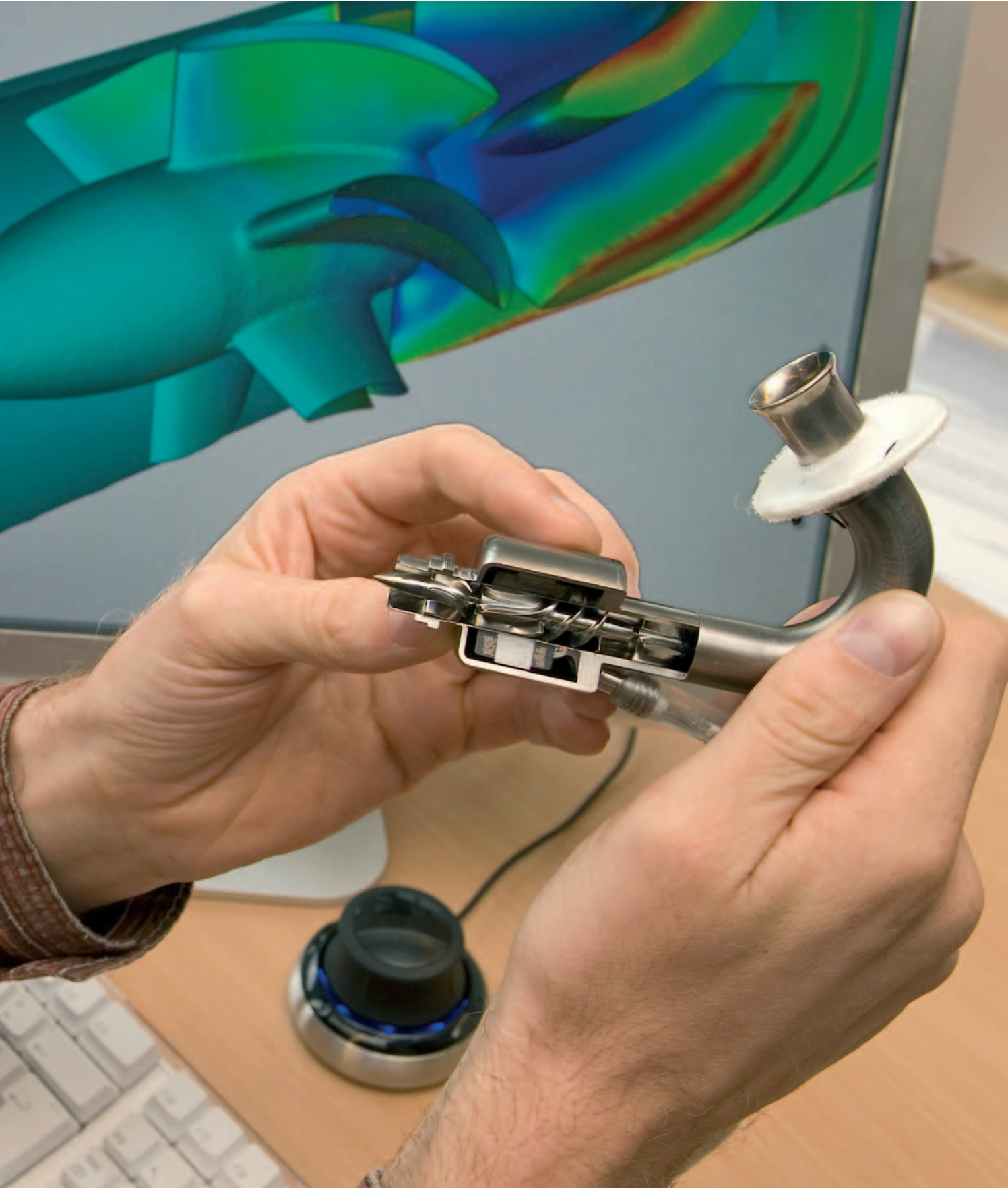


Bild 4: Ein interdisziplinäres Team entwickelt berechenbare Modelle um das Design von miniaturisierten, implantierbaren Blutpumpen zu unterstützen. Der dargestellte Titan-impeller dreht mit 10.000 Umdrehungen pro Minute, daher ist ein besonderes Design erforderlich, um den Einfluss auf die Blutzellen zu verringern.

Foto: Peter Winandy

Problem: Es werden bestimmte Inputs eingegeben und das physikalische System, wie im Computerprogramm festgelegt, gibt bestimmte Outputs, die verglichen werden können mit experimentellen Messwerten. Aber rechnergestützte Lösungsvorschläge in den Natur- und Ingenieurwissenschaften bieten andere, einzigartige Einsatzverfahren, wo man die Inputs, die ein bestimmtes gewünschtes Resultat produzieren würden, suchen oder eine Bandbreite möglicher Modelle, die Resultate produzieren, die die Realität am besten

abbilden evaluieren würde. In diesem Sinne sind die Probleme „invers“ und werden rückwärts gelöst. Luftfahrtingenieure setzen diese Lösungsvorschläge bereits lange ein, um eine optimale Feinabstimmung der Form verschiedener Flugzeuge, beispielsweise im Sinne der bestmöglichen Leistungsfähigkeit zu erzielen. Obwohl es möglich ist, solche inversen Analysen mit einem „Black-Box“ Simulationsprogramm durchzuführen, zum Beispiel wenn der Quellcode nicht verfügbar ist, können vollständige Synergie und Effizienz



nur dann umgesetzt werden, wenn die Software so modifiziert werden kann, dass zusätzliche Informationen in Ergänzung zu den erforderlichen Informationen für direkte Probleme erzeugt werden können.

Fazit

Computersimulation, die über die einfach verfügbare kommerzielle Software hinausgeht, ist der Forschungsschwerpunkt des Lehrstuhl CATS und vieler anderer Institute, die in die Aktivitäten rund um das Thema „Computational Engineering

Science“ an der RWTH Aachen involviert sind. Besonders Simulationen, die die Leistung Tausender parallel arbeitender Prozessoren ausnutzen, um erforderliche Genauigkeit, Entdeckung mathematischer Modelle auf Basis experimenteller Daten, Unsicherheitsanalyse und Optimierung zu erhalten, können als Ziele aufgeführt werden. Sie verlangen eine enge interdisziplinäre Zusammenarbeit zwischen den Ingenieuren, den Mathematikern und den Informatikern.

Autoren:

Univ.-Prof. Marek Behr, Ph.D. leitet den Lehrstuhl für Computergestützte Analyse Technischer Systeme.

Nicole Faber, M.A. ist Geschäftsführerin der Graduiertenschule „Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science“.

Simulation an der RWTH Aachen



Wie bereits ausgeführt im Artikel „Rechnen auf Zehntausenden von Prozessoren – wo muss ich klicken?“, werden in sehr vielen Bereichen der RWTH Aachen die unterschiedlichsten Simulationsverfahren entwickelt und eingesetzt. Um die Zusammenarbeit der verschiedenen Institute zu dokumentieren, hat die Graduiertenschule Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science eine Befragung durchgeführt, bei der 388 Lehrstühle und Institute der RWTH Aachen angeschrieben wurden. Ziel der Befragung ist die Erstellung eines Überblicks über die eingesetzten Simulationspakete und -methoden sowie Simulationsprojekte und Ansprechpartner. Von den verschickten Fragebögen wurden 65 zurückgesandt, zwei Rückmeldungen zeigten, dass keine Simulationen an den entsprechenden Lehrstühlen durchgeführt werden. Dieser Gesamtrücklauf entspricht einer Quote von ungefähr 17 Prozent. Teilgenommen haben Institute aus sieben von neun Fachbereichen der RWTH Aachen.

Die Institute geben vorrangig Simulationsprojekte aus den Bereichen Materialwissenschaften, Medizin, Strömungslehre, Kraftfahrtwesen, Prozesstechnik, Elektrotechnik, Geologie, Informatik, Biologie und Physik an. Die bis zu maximal acht angegebenen Einzelprojekte setzen sich aus Teilprojekten der Sonderforschungsbereiche oder Exzellenzcluster, Projekten von Forschergruppen und Transferbereich-Projekten zusammen. Weitere werden von der Deutschen Forschungsgemeinschaft oder dem Bundesministerium für Bildung und Forschung sowie industriellen Vorhaben gefördert oder sind eigenfinanziert. Weitere Informationen zur Befragung, inklusive einer Liste der Institute, die teilgenommen haben, sind unter www.aices.rwth-aachen.de/research/simulation-survey-2007 abrufbar.

Insgesamt 50 Institute geben an, selbstentwickelte Simulationspakete einzusetzen. An 56 Instituten werden kommerzielle Simulationspakete verwendet, hierzu gehören unter anderem Matlab, Fluent, ANSYS, Modelica/Dymola, DICTRA, FactSage, VASP, PHONO, OpenMX, EMT0, LARSTRAN/SHAPE, PEP, CAOT, STRUCSIM, Gaussian, ECOTEC, Turbomole, DL-POLM, Malpro, ABAQUS, MADYMO, HyperWorks, RADIOSS, FEMFAT, ADAMS, CoWare, Convergence, LISATEk, HFFS, ADS, Renew, Poses++, SeSAm, Ramsis, Kinematix, ARToolkit, ECLIPSE, TOUGH, TOUGHReact, ELAN, Interactive Petrophysics, Comsol Multiphysics, gPROMS, ModelMaker, MARC/MENTAT, PAMCRASH, PAMFORM, WISETEX, Parsival, GTM-X, Bodybuilder, FEAP.

Die vorhandenen Simulationsmethoden und Algorithmen basieren hauptsächlich auf den Monte-Carlo-, Finite-Elemente- und Finite-Volumen-Methoden, inklusive Mehrgitterverfahren und anderen iterativen Lösungsverfahren sowie ALE (Arbitrary Lagrangian-Eulerian), Molekulardynamik, Adaptive Multiskalen-Methoden, CFD, DFT (Density functional theory), dynamische Simulation, Short-Cut-Methoden, sequentiell modulare Simulation, Finite-Differenzen-Methoden, Maschen- und Knotenpotenzialverfahren, Petri-Netze, Multi-Agenten Simulation, Diagonalisierung (CI), Kubo-Response-Theorie, Floquet-Theorie, Metropolis- und Cluster-Flip-Algorithmen.

Das weitere Vorgehen bezüglich der Ergebnisse dieser Befragung wird innerhalb der Graduiertenschule diskutiert und den Professoren, die an dieser Befragung teilgenommen haben, mitgeteilt. Fragen zu den einzelnen Ergebnissen der Erhebung oder zu den entsprechenden Ansprechpartnern in den Instituten beantwortet die Graduiertenschule gerne.

Autoren:

Univ.-Prof. Marek Behr, Ph.D. leitet den Lehrstuhl für Computergestützte Analyse Technischer Systeme.

Nicole Faber M.A. ist Geschäftsführerin der Graduiertenschule „Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science“.

Erfolgreiche Wissenschaftsnacht „5 vor 12“

Vergabe der RWTH-Preise Wissenschaftsjournalismus

A

Am 9. November 2007 öffnete die RWTH Aachen bereits zum fünften Mal ihre Türen zur RWTH-Wissenschaftsnacht „5 vor 12“. Wissenschaft zu ungewöhnlicher Zeit aus ungewöhnlicher Perspektive ist das Motto dieser Veranstaltung, die Jahr für Jahr mehr Besucher mit Vorträgen, Filmvorführungen, kabarettistischen und musikalischen Beiträgen bei freiem Eintritt begeistert.

Der Auftakt der Wissenschaftsnacht widmete sich traditionell den kleinen Besuchern. In einer Experimentalvorlesung für Kinder zwischen 8 und 12 Jahren machte Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Lutz Feld vom I. Physikalischen Institut Töne sichtbar. Unterstützt wurde er dabei von Orchestermitgliedern des Theaters Aachen.

Insgesamt vier Institute der RWTH öffneten im Laufe des Abends ihre Türen für die Gäste der Wissenschaftsnacht. Ging es im Institut für Bergbaukunde um die Frage „Wie viele Rohstoffe verbraucht ein Mensch in seinem Leben?“, konnte man einige Meter weiter im ehemaligen Heizkraftwerk der Hochschule miterleben, dass

Kohleverbrennung auch ohne CO₂-Emission möglich ist. Im Lehrstuhl für Oberflächentechnik im Maschinenbau erhielten die Besucher Einblicke in die vielfältigen, alltäglichen Anwendungen von Beschichtungen, während das Institut für Schweißtechnik und Fügetechnik in der Pontstraße zeigte, dass schon dem Steinzeitmenschen ohne Fügetechnik das Bärenfell von den Hüften gerutscht wäre. Bis nach Mitternacht beantwortete ein umfangreiches Vortragsprogramm unter anderem Fragen nach der Lebendigkeit der Pathologie, der Wirkungsweise von Werbung und der Geschichte vom Fliegen, Starten und Landen. Während Univ.-Prof. Dr.-Ing. Gerd Ascheid mobil auf Funkwellen surfte, Dr. Ulrich Knittel zu einer Reise zu den Supervulkanen einlud und Philipp Hübl M.A. dem weißen Kaninchen folgte, zeigte Univ.-Prof. Dr.techn. Werner Baumgartner, wie die Bionik von einer Echse zum kratzfesten Autolack führt.

Im Rahmen der RWTH-Wissenschaftsnacht „5 vor 12“ wurde auch der RWTH-Preis

Wissenschaftsjournalismus verliehen. Dieser würdigt seit 1993 beispielhafte Beiträge aus Printmedien, Hörfunk und Fernsehen und wurde jetzt zum achten Male verliehen. Die Auszeichnung ist mit 1.000 Euro je Kategorie dotiert.

Den RWTH-Preis Wissenschaftsjournalismus im Bereich Printmedien erhielt Johannes Bernreuter für seinen Beitrag „Solarzellen – einfach gedruckt“ aus der Zeitschrift „Bild der Wissenschaft“, Ausgabe 2/2007. Der Autor beschreibt darin die Entwicklung von Dünnschicht-Solarmodulen durch Druck des Halbleiters auf Folie – mit Tinte aus Nanopartikeln. Die Jury lobte vor allem die populärwissenschaftliche Darstellung des Technologietransfers von der Idee zum Produkt.

In der Kategorie Hörfunk erhielt Dr. Jan Lublinski für sein Radiofeature „Der saure Ozean – wie der Klimawandel die Weltmeere bedroht“, ausgestrahlt am 30.4.2006 in der Sendung „Forschung aktuell“ des Deutschlandfunks, die Auszeichnung. In der Begründung

zur Preisvergabe heißt es, dass die Berichterstattung gelungen biologische, klimatologische und ozeanographische Aspekte zu einem Gesamtzusammenhang verknüpft. „Die Fakten sind korrekt, gut recherchiert und sauber dargelegt“, so die Aussage der Jury, „das Thema ist ausgezeichnet mit vielen O-Tönen aufbereitet.“

Die Redaktion der Sendung „Quarks & Co“ des Westdeutschen Rundfunks um Redakteurin Claudia Heiss wurde ausgezeichnet für ihren Beitrag „Herzklopfen – Rhythmus des Lebens“ aus dem Jahre 2006. Dem Autoren-Team mit Katrin Krieft, Tanja Winkler, Hilmar Liebsch, Heinz Greuling, Tilman Wolff und Moderator Ranga Yogeshwar werden von der Jury nicht nur eine sachliche korrekte und umfassende Darstellung attestiert. „Darüber hinaus ist der Beitrag didaktisch sehr gut und in höchstem Maße interessant verfasst und aufgebaut.“

*Rektor
Burkhard Rauhut
beglückwünschte
die Preisträger
des RWTH-Preises
Wissenschafts-
journalismus.*



Jülich Aachen Research Alliance – JARA

Rektor Rauhut und der Vorstandsvorsitzende des Forschungszentrums Jülich Prof. Achim Bachim unterzeichneten in der Düsseldorfer Staatskanzlei einen Vertrag zur Gründung der Jülich Aachen Research Alliance, kurz JARA. Ziel ist es, ein Modell einer international hoch angesehenen Partnerschaft zwischen universitärer und außer-universitärer Forschung zu schaffen. Die Allianz startet in drei zukunftssträchtigen Forschungsfeldern mit den Sektionen: JARA-BRAIN Translational Brain Medicine (Neurowissenschaften), JARA-FIT Fundamentals of Future Information Technology (Informationstechnologie) und JARA-SIM Simulation Sciences (Simulationswissenschaften). Weitere Sektionen werden in Kürze gegründet, als nächstes auf dem Gebiet der Energieforschung.

„JARA hat Modellcharakter, weil wir vertraglich geregelt eine enge Verschmelzung von Wissenschaftsgebieten vornehmen und vorwärtsweisend institutionelle Hürden überwinden“, machte Rektor Rauhut anlässlich der Vertragsunterzeichnung deutlich. So würden die Forschungsziele in den Sektionen gemeinsam definiert und gestaltet, gemeinsam die Ressourcen in Forschung, Lehre und Ausstattung genutzt, gemeinsam Lehraktivitäten entwickelt sowie Personal- und Investitionsentscheidungen gemeinsam geplant. Dabei soll eine möglichst unbürokratische Zusammenarbeit JARA auf schnellem Wege zu einer starken Marke machen.

10 Jahre AMICA

Im Juni 1994 stellte der Leiter des Instituts für Halbleitertechnik und heutiger Direktor von AMICA (Advanced Micro- and Optoelectronic Center Aachen), Univ.-Prof. Dr.phil. Heinrich Kurz, erstmals die Pläne für ein Nanotechnologielabor vor. Im Juli 1997 wurde AMICA eröffnet und startete mit mehreren Forschungsprojekten auf dem Gebiet der Nanotechnologie. Heute blickt AMICA stolz auf eine 10-jährige Erfolgsgeschichte zurück. Seit der Gründung arbeitet man an Strategien und Potenzialen der Nanotechnologie sowie der Umsetzung dieser Potenziale in strategische Zukunftstechnologien wie Informationstechnik, Energie und Life Science.

Auszeichnung für Rory Koenen

Dr. Rory Koenen, Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Kardiovaskuläre Molekularbiologie am Uniklinikum Aachen, erhielt auf der Jahrestagung der European Vascular Biology Organisation in Bristol die Auszeichnung „Young Investigator Award“. Der Preis wird vom European Vascular Genomics Network verliehen, das die europäischen Kompetenzzentren für Kardiovaskuläre Forschung vernetzt. Der 31-jährige Koenen forscht mit einem internationalen Team unter Leitung von Univ.-Prof. Dr. Christian Weber auf dem Gebiet der Atherosklerose. Diese Erkrankung wird durch eine chronische Entzündung der Gefäßwand verursacht. Dabei spielen verschiedene Botenstoffe, darunter kleine Peptide, eine Rolle. Die Peptide locken Immunzellen in die Gefäßwand und verstärken so die Entzündung. Solche Peptide können auch aneinander binden und sich gegenseitig in ihrer Wirkung verstärken. Koenen konnte die strukturellen Merkmale eines solchen Peptidkomplexes aufklären. Auf diese Weise gelang es ihm, ein synthetisches Biomolekül zu entwickeln, das die Bildung eines solchen Komplexes verhindern kann.

Bundesweit größtes Forschungsvorhaben der Orthopädie

Rund 80 Wissenschaftler und Industrievertreter sind in das bundesweit größte Forschungsvorhaben der Orthopädie "orthoMIT" eingebunden. Mediziner, Elektrotechniker, Informatiker, Materialtechniker und Arbeitswissenschaftler gehören zum Team von orthoMIT. Neben den Aachener Kliniken ist auch das Helmholtz-Institut für Biomedizinische Technik beteiligt. Das Projekt orthoMIT wird vom Bundesforschungsministerium für die Dauer von fünf Jahren mit 13 Millionen Euro gefördert. Insgesamt 24 Partner aus Klinik, Forschung und Industrie erarbeiten unter dem Motto „Schonendes Operieren mit innovativer Technik“ neue Arbeitsplätze, Verfahren und Werkzeuge für die Orthopädie.

Neues Katalysezentrum

Die Bayer Technology Services GmbH und die RWTH Aachen haben eine zunächst auf fünf Jahre angelegte, intensive Zusammenarbeit auf dem Gebiet der Katalysatorforschung vereinbart. „Katalyse ist längst zu einer Schlüsseltechnologie in der chemischen Industrie geworden. Kaum eines unserer Produkte entsteht, ohne dass es mit Katalysatoren in Berührung gekommen wäre“, erklärte Ian Paterson, im Vorstand von Bayer MaterialScience zuständig für Marketing und Innovation, anlässlich der Vertragsunterzeichnung in Aachen. Bayer MaterialScience will über den Zeitraum von fünf Jahren insgesamt 6,05 Millionen Euro in das Zentrum für Katalysatorforschung investieren, Bayer Technology Services beteiligt sich zusätzlich mit 1,25 Millionen Euro. Das Land NRW und die RWTH Aachen steuern insgesamt weitere 2,7 Millionen Euro zur Finanzierung des Zentrums bei. Bis zu zwölf Forscher werden dort arbeiten. „Die Entwicklung gänzlich neuer katalytischer Prozesse, wie wir sie in dem gemeinsamen Zentrum anstreben, öffnet viele Chancen und stellt gleichzeitig eine enorme Herausforderung dar“, erläuterte Univ.-Prof. Dr. Walter Leitner, wissenschaftlicher Leiter des neuen Zentrums. Bei der Katalyse können bereits kleinste Mengen eines „molekularen Heiratsvermittlers“ ausreichen, um eine chemische Reaktion in die gewünschte Richtung zu lenken oder sie überhaupt erst in Gang zu setzen. Eine nachhaltige Chemie hilft auf diesem Wege, neue Rohstoffe zu erschließen und Prozesse effizienter zu gestalten, was wiederum den Energieverbrauch sowie die Emission von CO₂ senken kann. In direkter Nachbarschaft zum Institut für Technische und Makromolekulare Chemie der RWTH, dessen Geschäftsführer ebenfalls Professor Leitner ist, stellt die Hochschule die notwendigen Laborräume auf einer Fläche von insgesamt rund 400 Quadratmetern zur Verfügung. Der Labortrakt wird derzeit mit Unterstützung des Landes Nordrhein-Westfalen und der RWTH umfassend modernisiert und dann gemeinsam mit Bayer MaterialScience ausgestattet.

Hochschulrat bestätigt

Der Senat der RWTH Aachen hat einstimmig die zehn Mitglieder des Hochschulrates der RWTH Aachen bestätigt. Mit Inkrafttreten des Hochschulfreiheitsgesetzes im Januar 2007 wurde die Einführung von Hochschulräten als neues Steuerungsgremium mit Aufsichts- und Entscheidungsaufgaben festgelegt. Zu diesen Aufgaben zählen unter anderem Wahl, Abwahl und Beratung des Rektorates, Fachaufsicht des operativen Geschäftes, Zustimmung zum Hochschulentwicklungsplan, den Zielvereinbarungen sowie dem Wirtschaftsplan. Der Hochschulrat soll Impulse aus der Gesellschaft und der Wirtschaft aufnehmen und diese in die Hochschule übermitteln. Vor diesem Hintergrund wurde seitens des Senats festgelegt, dass der Rat mit drei Vertretern für die Industrie und Wirtschaft und jeweils einem für die Naturwissenschaften, die Hochschulmedizin, die Geisteswissenschaften sowie die strategische Hochschulplanung besetzt werden soll. Darüber hinaus wird eine Persönlichkeit mit europäischem Bezug, sowie ein Mitglied für die RWTH und die Studierenden des Hochschulrats komplettieren.

Andreas Pinkwart, Minister für Innovation, Wissenschaft, Forschung und Technologie des Landes Nordrhein-Westfalen wird die Ernennungsurkunden überreichen.

Einschreibung in BA- und MA-Studiengänge

Die RWTH hat die Umstellung auf Bachelor und Master erfolgreich abgeschlossen. Zum Wintersemester 2007/08 erfolgen keine Neueinschreibungen mehr zu Diplom- oder Magisterstudiengängen. Nach drei Jahren ist damit die phasenweise, nach Fachbereichen strukturierte Umstellung beendet. Die Anpassung an die Vorgaben des Bologna-Abkommens führten einerseits zu einer höheren Transparenz des Lehrbetriebs und -ablaufs, andererseits zu einer deutlichen Verbesserung der Studienbedingungen und -betreuung. Insgesamt hat der aufwändige Prozess Kosten in Höhe von etwa 1 Million Euro verursacht. In enger Abstimmung mit den Fakultäten und unter Federführung von Prorektor Univ.-Prof. Dr.-Ing. Konstantin Meskouris erhielten alle Studiengänge eine neue Struktur. Zur Anerkennung der neuen Curricula wurden umfangreiche Akkreditierungsverfahren durchlaufen. So wurden die jeweiligen Studieninhalte konzentriert und praxisorientierter gestaltet, zusätzliche Lehrformen wie Projektarbeit und Präsentationen verstärkt, die Betreuung durch Kleingruppen intensiviert und die Anzahl studienbegleitender Prüfungen erhöht. Darüber hinaus erfolgt nun von Beginn an eine engere Verknüpfung von Theorie und Praxis. Durch die Modularisierung und die Vergabe von Credits rückt die Arbeitsbelastung der Studierenden in den Vordergrund. Mit der vollständigen Umstellung beginnt gleichzeitig eine differenzierte Qualitätssicherung. Es wird eine studentische Lehrveranstaltungsbeurteilung durchgeführt, es gibt Studiengangsevaluierungen und auch Reakkreditierungen, so dass der Prozess kontinuierlich Optimierungen erfährt. Die Durchfall- und Absolventenquoten werden sorgfältig beobachtet werden. Es geschieht mehrfach eine systematische Überprüfung der Verfahrensabläufe und -ergebnisse bis hin zu einer Befragung der ersten BA- und MA-Absolventen.

Neubau für die Thai-German Graduate School

Die Thai-German Graduate School konnte jetzt einen Neubau in Bangkok beziehen. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Rolf H. Jansen, Leiter des Instituts für Theoretische Elektrotechnik, ist Deutscher Direktor der Thai-German Graduate School in Partnerschaft mit einem thailändischen Kollegen. Jansen initiierte das Projekt vor zwölf Jahren und warb in der Politik, der deutschen Großindustrie und beim Deutschen Akademischen Austauschdienst hierfür Mittel ein. Gleichzeitig knüpfte er ein umfassendes Sponsorennetzwerk, zu dem mittlerweile namhafte Unternehmen aus ganz Deutschland und Thailand zählen. Die administrativen Aufgaben und Lasten werden gleichermaßen von den deutschen und den thailändischen Partnern getragen. Die Thai-German Graduate School will das Aachener Modell der industrieorientierten Ingenieursausbildung langfristig in Thailand etablieren und Studierende der Ingenieurwissenschaften aus dem gesamten asiatischen Raum zum Master-Abschluss beziehungsweise zur Promotion führen.

MATLAB-Campuslizenz

Seit dem 1. Oktober können Studierende und Mitarbeiter der RWTH Aachen jetzt die Software MATLAB der Firma The MathWorks Inc. nutzen. Möglich wird dies durch eine Campuslizenz, die aus den Studiengebühren finanziert wird. Die Software MATLAB wird insbesondere zur Lösung mathematischer Probleme und zur grafischen Darstellung der Ergebnisse eingesetzt. Initiiert wurde das Projekt durch Studierende und Institute der Fakultät für Maschinenwesen sowie der Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik. Cleve Mole, der „Vater von MATLAB“, besuchte im November 2004 die RWTH Aachen. Univ.-Prof. Dr.-Ing. Dirk Abel vom Institut für Regelungstechnik bemühte sich seither um eine Campuslizenz und freut sich jetzt über die erfolgte Vertragsunterzeichnung. Abel betreute hochschulintern die Arbeitsgruppe MATLAB und wird dort auch weiter aktiv sein, um die Weiterentwicklung der Campuslizenz zu begleiten. Geplant ist beispielsweise ein jährlicher MATLAB-Day als Informationsveranstaltung für die Nutzer. Zur Vertragsunterzeichnung begrüßte Rektor Burkhard Rauhut und Professor Abel Andreas Schindler von The MathWorks Inc.

Neues Kompetenzzentrum

Im Rahmen des Exzellenzclusters „Integrative Produktionstechnik für Hochlohnländer“ haben MTU Aero Engines aus München und die RWTH einen Vertrag zur Gründung des Kompetenzzentrums „Verdichter für Flugtriebwerke“ unterschrieben. Die Zusammenarbeit in der Forschung und Entwicklung für die Auslegung, Gestaltung und Fertigung der nächsten Generation von Triebwerken soll hier weiter vertieft werden. „Die ausgeprägte Innovationskraft der RWTH Aachen, ihre kompetente Lehre und hervorragende Ausstattung waren für uns die maßgeblichen Gründe zur Einrichtung eines solchen Kompetenzzentrums“, erläuterte MTU-Vorstand Dr. Rainer Martens anlässlich der Vertragsunterzeichnung in Aachen. Bereits seit Jahren bestehen zahlreiche gemeinsame Forschungsprojekte zwischen MTU und der RWTH Aachen, insbesondere mit dem Laboratorium für Werkzeugmaschinen und Betriebslehre sowie dem Institut für Strahlantriebe und Turboarbeitsmaschinen.

AllemaniACs verteidigen Weltmeistertitel

Die „AllemaniACs“, das Roboterteam der RWTH Aachen, verteidigten bei den RoboCup-Weltmeisterschaften in Atlanta, USA, ihren Weltmeistertitel. Diesen hatten sie im Jahr 2006 in Bremen errungen und konnten den Erfolg bei den zweiten Weltmeisterschaften jetzt wiederholen. Das Team wird geleitet von Dipl.-Inform. Stefan Schiffer vom Lehr- und Forschungsgebiet Informatik 5.

Bauingenieure ausgezeichnet

Zum 15. Mal wurde in diesem Jahr in der Fakultät für Bauingenieurwesen der F.C. Trapp-Preis vergeben. Dieser Preis wird an junge Bauingenieure und Bauingenieurinnen verliehen, die sich in kurzer Studienzeit ein breit angelegtes Fachwissen für den Beruf angeeignet haben. Darüber hinaus werden überdurchschnittliche Prüfungsergebnisse und herausragende Themen der Diplomarbeiten, die von besonderem Interesse für die Bauwirtschaft sind, erwartet. Praktische Erfahrungen sind zudem Voraussetzung dafür, den Preis zu erhalten. Die diesjährigen Preisträger Dipl.-Ing. Dirk Geschwind, Dipl.-Ing. Ruth Menge, Dipl.-Ing. Peter Gautier, Dipl.-Ing. Ilko Hartung und Dipl.-Ing. Christiane Mester nahmen im Beisein von Prodekan Rainard Osebold und Rektor Burkhard Rauhut die Preise von Stifter Dr.-Ing. Friedrich Carl Trapp entgegen.

Vodafone Förderpreis für Anke Schmeink

Der Förderpreis der Vodafone-Stiftung für Forschung wurde im Bereich Natur- und Ingenieurwissenschaften an Dr.-Ing. Anke Schmeink vergeben. Schmeink studierte an der RWTH Aachen Mathematik mit Nebenfach Medizin und promovierte anschließend mit Auszeichnung in Elektrotechnik und Informationstechnik. In ihrer Dissertation mit dem Thema „Capacity Analysis and Resource Allocation in Wireless Communication Systems“ hat sie einen interdisziplinären Lösungsansatz zur optimalen Ausnutzung der Kapazitäten in mobilen Kommunikationsnetzen vorgelegt. Die erarbeiteten Lösungen garantieren die faire Zuweisung von Mindestqualitäten für alle Mobilfunknutzer und bieten gegebenenfalls sogar eine bessere Zuweisung der Ressourcen. Mit dem Innovationspreis sowie den Förderpreisen, die seit 1997 vergeben werden, prämiiert die Vodafone-Stiftung für Forschung in der Mobilkommunikation herausragende, innovative Forschungsergebnisse auf diesem Gebiet. Schmeink ist nach Dr.-Ing. Jörg Habetha bereits der zweite Preisträger des Förderpreises der Aachener Hochschule. Darüber hinaus erhielten die RWTH-Professoren Heinrich Meyr im Jahr 2000 und Rudolf Mathar im Jahr 2002 für ihre bahnbrechende Forschung zur digitalen Mobilfunktechnik den angesehenen Innovationspreis.

Namen

Auszeichnung für Stefanie Angel

Die Gesellschaft für Wissenschaft und Leben hat in diesem Jahr erstmals einen Wissenschaftspreis verliehen. Die Auszeichnung im Bereich Ingenieurwissenschaften ging an Dipl.-Ing. Stefanie Angel, die am Institut für Eisenhüttenkunde promovierte. Den mit 1.000 Euro dotierten Preis erhielt sie für ihre Dissertation, die sich mit der Herstellung und Charakterisierung metallischer Schäume befasst. Angel studierte an der RWTH Bauingenieurwesen und ist seit 2003 Wissenschaftliche Mitarbeiterin im Institut für Eisenhüttenkunde. Sie beschäftigt sich in ihrer Dissertation mit metallischen Schäumen, die Strukturen aus der Natur zum Vorbild haben und zu einer relativ jungen Werkstoffgruppe gehören. Die Stärken von Schäumen liegen in ihrer niedrigen Werkstoffdichte sowie ihren definierten strukturellen und funktionellen Eigenschaften. Mit einem speziellen Verfahren stellen die Aachener Wissenschaftler einen offenporösen Schaum her, der je nach den späteren Einsatzgebieten mit bestimmten Merkmalen im Hinblick auf Dichte, Druckfestigkeit eingestellt werden kann. Die wissenschaftliche Arbeit von Stefanie Angel findet im Rahmen des Projektes „Entwicklung von offenporigen Schäumen aus Nickelbasislegierungen und intermetallischen Phasen“ statt. Es ist Teil des an der RWTH angesiedelten interdisziplinären Sonderforschungsbereichs 561 „Thermisch hochbelastete, offenporige und gekühlte Mehrschichtsysteme für Kombikraftwerke“.

Auszeichnung für Dr. Björn Lüssem

Mit dem VDE-Promotionspreis Nordrhein-Westfalen 2007 wurde Dr. Björn Lüssem im Rahmen eines Festaktes ausgezeichnet. Er begann zum Wintersemester 1997 sein Studium der Elektrotechnik und Informationstechnik. Im Wintersemester 2003 beendete er dieses mit Auszeichnung und erhielt für seine Diplomarbeit die Springorum-Denkmünze der Freundesgesellschaft proRWTH. Anschließend promovierte Lüssem am RWTH-Lehrstuhl für Werkstoffe der Elektrotechnik II bei Univ.-Prof. Dr. Rainer Waser. Die Arbeit fertigte er am Forschungszentrum Jülich an und wurde auch mit einem Günther Leibfried-Preis des Forschungszentrums Jülich dafür ausgezeichnet. Mit seiner Arbeit steht Dr. Lüssem beispielhaft für die Kooperation zwischen Aachen und Jülich im Bereich künftiger Informationstechnologien, welche in diesem Jahr mit zur Gründung der Jülich Aachen Research Alliance (JARA) geführt hat. Der Preisträger hat im Rahmen seiner Promotion Methoden entwickelt, mit denen man die Leitfähigkeit von einzelnen elektronisch aktiven Molekülen messen kann, er arbeitet hier in einem Grenzbereich zwischen Informationstechnik, Physik und Chemie. Die Ergebnisse der Arbeit sind von großer Bedeutung für die langfristige Entwicklung der so genannten Molekularelektronik. Dies ist ein Konzept, in dem elektronische Funktionen wie das Schalten und Speichern von digitaler Information auf einzelne organische Moleküle reduziert werden soll.

MOGAM-Gebäude eingeweiht

Nach nur zehn Monaten Bauzeit wurde von der Aachener Niederlassung des Bau- und Liegenschaftsbetriebs NRW das so genannte MOGAM-Gebäude an die RWTH übergeben. Rund 800 Quadratmetern stehen den Studierenden jetzt zum Lernen und Arbeiten zur Verfügung. An etwa 130 Arbeitsplätzen können sie zwischen den Lehrveranstaltungen des benachbarten Kármán-Auditoriums und der nahe liegenden Institute im MOGAM lesen, an Laptops arbeiten oder diskutieren. Die vier Geschosse und eine Empore sind als Atelier ausgebaut und von einer Fassade aus Kunststoff und raumhohen Glasflächen umgeben. Das MOGAM-Atelier hat rund 1,8 Millionen Euro gekostet. Der größte Teil des Betrages, nämlich eine Million Euro, wurde von Dr. Young-Sup Huh, CEO der Green Cross Corp. in Seoul, Süd-Korea, sowie Absolvent und Ehrensator der RWTH Aachen, gespendet. Erst diese Spende machte die Realisierung des lange gewünschten studentischen Lern- und Arbeitszentrums möglich. Als Referenz an dieses großzügige Engagement ist das neue Gebäude nach dem Lebensmotto von Young-Sup Huh „MOGAM“ benannt, was so viel bedeutet wie „die Erde zum Blühen bringen“.

Auszeichnung für Jochen Hahnen

Jochen Hahnen erhielt jetzt den Convergators Award in der Kategorie Mobile Content. Der Convergators Award wird unter der Schirmherrschaft des Bundesverbands Informationswirtschaft, Telekommunikation und neue Medien, kurz BITKOM, für vier Kategorien verliehen. Im Mittelpunkt stehen dabei allerdings nicht die Technologien, sondern die Menschen, die sich als Vorreiter gezeigt haben. Die Preisträger der Kategorien haben anschließend die Möglichkeit, einen von drei weiteren Preisen zu gewinnen. Hahnen begann sein Studium im Wintersemester 2000 und ist seit 2006 am Fraunhofer-Institut für Angewandte Informationstechnik (FIT) in St. Augustin als Wissenschaftlicher Mitarbeiter tätig. Er entwickelte während seines Studiums erste Ideen für das System Mobota, das auch heute noch im Mittelpunkt seiner Arbeit steht. Univ.-Prof. Dr. Matthias Jarke vom RWTH-Lehrstuhl für Informatik 5 (Informationssysteme und Datenbanken) und Leiter des Fraunhofer-Instituts für Angewandte Informationstechnik freut sich mit dem RWTH-Absolventen über seinen Erfolg: „Die Auszeichnung für Jochen Hahnen ist ein schöner Beweis für innovative Anwendungen multimedialer Mobilkommunikation.“ Der Mobile Outdoor Training Assistant, kurz Mobota, verwandelt GPS-fähige Mobiltelefone eines Sportlers in mobile Trainingspartner. Er unterstützt den Sportler beispielsweise bei der Navigation in unbekanntem Gelände oder ermöglicht es, virtuelle Kämpfe gegen einen anderen Sportler aus dem Community-Portal von Mobota auszuführen.

In der nächsten Ausgabe:

Bionik –
Schnittstelle zwischen Natur
und Technik

Biologisch inspirierte
Prothesen und Implantate

Vorbilder der Natur
in metallische
Gussteile umgesetzt

Nanofasern für
die Nervenregeneration

Bionische Venenklappen

Bessere Textilien
dank neuronaler Netze

Werkstoffe mit
Licht funktionalisieren

*Das Editionsmodell Ford Fiesta Black Magic auf Basis der unverbindlichen Preisempfehlung von € 13.980,-: € 89,- monatl. Finanzierungsrate, 2,99 % effektiver Jahreszins, € 5.059,62 Anzahlung (Ihr Ford Händler rechnet Ihnen gerne Ihren Gebrauchtwagen als Anzahlung an) bei 48 Monaten Laufzeit und jährlicher Laufleistung von 10.000 km, € 5.592,- Restrate. Ford Auswahl-Finanzierung, ein Angebot der Ford Bank, zzgl. Überführungskosten. Ford Protect Garantie-Schuttbrief inkl. Ford Assistance Mobilitätsgarantie auch für das 3. und 4. Jahr und die ersten 3 Inspektionen/Wartungen (Lohn- und Materialkosten) lt. Serviceplan und Wartungsumfang bis max. 80.000 km Gesamtfahrleistung. **Am Beispiel des Editionsmodells Ford Fiesta Style. Ergibt sich aus dem Preisvorteil gegenüber der unverbindlichen Preisempfehlung eines vergleichbar ausgestatteten Basismodells und den genannten Leistungen im Einzelpreis. Ein Angebot für Privatkunden und gewerbliche Einzelabnehmer aller teilnehmenden Ford Händler. Weitere Informationen erhalten Sie dort. Abbildung zeigt Wunschausstattung gegen Mehrpreis. Kraftstoffverbrauch (in l/100 km nach 80/1268/EWG): 6,1-6,2 (kombiniert), 8,1-8,3 (innerorts), 4,9-5,0 (außerorts). CO₂-Emission: 144-177 g/km (kombiniert).

Wie Sie Garagen geschmackvoll einrichten.



Der Ford Fiesta Black Magic

Das Editionsmodell mit vielen Extras und einem Preisvorteil von mindestens **€ 3.100,-**** schon für

€ 89,-* monatlich mit der Ford Flatrate

Informationen beim
FordHändler





Computational Engineering Science – Ein neues Ingenieurprofil