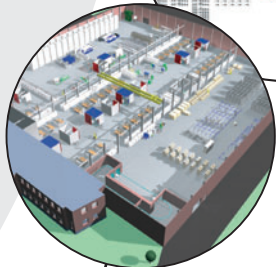
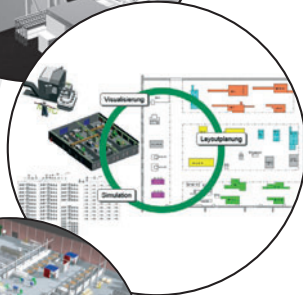




# TU Clausthal

## Simulationswissenschaftliches Zentrum der Technischen Universität Clausthal

Bericht 2007-2008





# **Simulationswissenschaftliches Zentrum der Technischen Universität Clausthal**

Bericht 2007–2008

**Postanschrift**

Simulationswissenschaftliches Zentrum  
Technische Universität Clausthal  
Prof. Dr. Thomas Hanschke  
Institut für Mathematik  
Erzstr. 1  
38678 Clausthal-Zellerfeld  
Telefon: (0 53 23) 72-24 01/-25 67  
Fax: (0 53 23) 72-23 04

**Impressum**

Herausgeber: Simulationswissenschaftliches Zentrum  
der Technischen Universität Clausthal  
Redaktion: Prof. Dr. Gunther Brenner, Prof. Dr. Thomas Hanschke,  
Prof. Dr. Michael Kolonko  
Layout und Satz: Franziska Dannehl  
Druck: Creaktiv GmbH & Co KG, Goslar

ISBN: 978-3-94039467-5



## Vorwort

Die Technische Universität Clausthal hat in ihrer aktuellen Entwicklungsplanung gesellschaftsrelevante Leitthemen in den Vordergrund gestellt und sich wieder – wie seinerzeit im Falle des Bergbaus – funktional aufgestellt. Die beiden Schwerpunkte „Energie und Rohstoffe“ sowie „Materialien und Maschinen“ sind bereits etabliert und in Form der hochschulübergreifenden Zentren „Energie-Forschungszentrum Niedersachsen“ (EFZN) und „Clausthaler Zentrum für Materialtechnik“ (CZM) institutionalisiert worden. Als dritte Säule soll nun der Bereich „Komplexe Systeme und Simulation“ aufgebaut und im Rahmen der geplanten gemeinsamen Einrichtung mit der Universität Göttingen konkretisiert und weiterentwickelt werden.

Im August 2008 hatte sich ein Gutachterteam der Wissenschaftlichen Kommission Niedersachsen (WKN) die Projekte der beteiligten Forschergruppen präsentieren lassen und den 4,6 Millionen Euro schweren Förderantrag evaluiert. In der Begutachtung wurden dem Simulationswissenschaftlichen Zentrum der TU Clausthal und den angeschlossenen Arbeitsgruppen der Universität Göttingen bescheinigt, mit dem geplanten Brückenschlag zu spezifischen Wissenschaftsgebieten ein niedersächsisches, wenn nicht sogar deutschlandweites Alleinstellungsmerkmal zu erreichen. Beide Universitäten freuen sich über das positive Votum der WKN und wollen die noch offenen Auflagen so schnell wie möglich umsetzen. In jedem Fall erwartet man sich von dem Projekt wesentliche Impulse für die Simulationswissenschaft in Niedersachsen. Geplant ist, dass in diesem Projekt mittelfristig mehr als 50 Wissenschaftler fachlich zusammengeführt werden.

Inzwischen wird auch der Einfluss der Niedersächsischen Technischen Hochschule (NTH), die zum 1. Januar 2009 durch ein spezielles Gesetz auf den Weg gebracht worden ist, auf die Forschungslandschaft in Niedersachsen deutlich. Denn die drei durch die NTH organisatorisch verbundenen Universitäten Braunschweig, Hannover und Clausthal organisieren sich arbeitsteilig und konzentrieren ihre Forschung in Zentren. Durch die Einrichtung des Niedersächsischen Energie-Forschungszentrums in Goslar und des Niedersächsischen Zentrums für Fahrzeugtechnik in Braunschweig und Wolfsburg gehen wesentliche Impulse für das Simulationswissenschaftliche Zentrum nun auch hiervon aus, wovon der vorliegende Band Zeugnis

leistet. Parallel zu diesen vielfältigen Forschungsthemen soll das Thema Simulation auch in den fachlich benachbarten Studiengängen „Operations Research“ und „Computational Science and Engineering“ (CSE) an der TU Clausthal vermittelt werden. Ein entsprechender Bachelor-Studiengang „Computersimulation im Ingenieurwesen“ an der Fakultät für Informatik der Fachhochschule Braunschweig/Wolfenbüttel befindet sich in der Akkreditierung und soll zum Wintersemester 2009/2010 eingeführt werden. Absolventen dieses Studiengangs finden im Studiengang CSE eine Möglichkeit, ihre Studien an der TU Clausthal fortzusetzen.

Der vorliegende Bericht 2007/2008 macht deutlich, dass verschiedene Gebiete erfolgreich weiterentwickelt werden konnten (Hierarchische Simulation von Partikelmischungen, Pünktlichkeitsprognosen von Flugplänen, Dynamische Simulation elektrischer Energieverteilnetze) aber auch neue Themen (Mathematische Modellierung flammenloser Verbrennung, Aerodynamische Analyse von Kleinwindanlagen mit vertikaler Achse) hinzugekommen sind. Damit werden erste Effekte einer nachhaltigen Entwicklung sichtbar. Es geht jetzt darum, diese Aktivitäten unter methodischen Aspekten zusammenzuführen.

Prof. Dr. Thomas Hanschke  
Vorstand und Sprecher des  
Simulationswissenschaftlichen Zentrums

# Inhaltsverzeichnis

## Vorwort

## Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Materialien</b> .....	<b>12</b>
1.1	Elektronendynamik und quantenmechanische Effekte in der Streuung von Ionen an Atomen .....	13
	<i>Myroslav Zapukhlyak, Tom Kirchner</i>	
1.2	Monte Carlo-Simulation der radikalischen Ter- und Tetrapolymerisation .....	17
	<i>Marco Drache, Gudrun Schmidt</i>	
1.3	Modellierung und Simulation des Vacuum Assisted Resin Infusion.....	24
	<i>Gerhard Ziegmann, Florian Klunker, Santiago Aranda</i>	
1.4	Hierarchische Simulation von Partikelmischungen.....	31
	<i>Michael Kolonko, Steffen Raschdorf</i>	
<b>2</b>	<b>Produktion, Logistik und Verkehr</b> .....	<b>42</b>
2.1	Unterstützung der Planung und Steuerung großer Werkstattfertigungen durch Ablaufsimulation.....	42
	<i>Uwe Bracht, Johannes Reichert, Christian Kruse</i>	
2.2	Analyse und Optimierung komplexer Inbound-Callcenter-Systeme mittels ereignisorientierter stochastischer Simulation.....	52
	<i>Alexander Herzog, Thomas Hanschke</i>	
2.3	Pünktlichkeitsprognosen von Flugplänen mittels Simulation .....	60
	<i>Alexander Herzog, Thomas Hanschke</i>	
2.4	Das Projekt REMATE: Aufbau einer Revenue-Management-Simulationsumgebung bei der Deutschen Lufthansa .....	66
	<i>Tobias Schröder, Michael Frank, Thomas Hanschke</i>	
<b>3</b>	<b>Energie und Umwelt</b> .....	<b>72</b>
3.1	Simulation des Verbundbetriebs Virtueller Synchronmaschinen (VISMA) .....	73
	<i>Ralf Hesse, Dirk Turschner, Hans-Peter Beck</i>	



3.2	Dynamische Simulation elektrischer Energieverteilnetze – Energiepark Clausthal .....	83
	<i>Oleg Osika, Hans-Peter Beck</i>	
3.3	Dezentrales Energiemanagementsystem Prozessmodell des elektrischen Mittelspannungsnetzes .....	89
	<i>Hans-Peter Beck, Ernst-August Wehrmann, Jens zum Hingst</i>	
3.4	Druckluftspeicherung in Salzkavernen (Compressed Air Energy Storage – CAES).....	96
	<i>Karl-Heinz Lux, Uwe Düsterloh</i>	
3.5	Mathematical Modelling of Flameless Combustion ...	113
	<i>Marco Mancini, Patrick Schwöppe, Roman Weber, Stefano Orsino</i>	
<b>4</b>	<b>Hochleistungsrechnen.....</b>	<b>134</b>
4.1	Numerische Simulation instationärer Strömungsvorgänge in einem Radialverdichter .....	135
	<i>Andreas Lucius, Gunther Brenner,</i>	
4.2	Simulation of Multiphase Flows by using the Lattice Boltzmann Method .....	142
	<i>Ernesto Monaco, Gunther Brenner</i>	
4.3	Aerodynamische Analyse von Kleinwindanlagen mit vertikaler Achse .....	150
	<i>Merim Mukinovic, Ardavan Rahimi, Sayed Ahmadi Gunther Brenner</i>	
4.4	Übertragung von Rosenbrock-Verfahren auf Finite-Elemente Berechnungen für elastomere Strukturen .....	158
	<i>Stefan Hartmann, Ahmad-Wahadj Hamkar</i>	
4.5	Zeitadaptive thermomechanisch gekoppelte Strukturberechnungen mit Hilfe der Methode der finiten Elemente .....	165
	<i>Stefan Hartmann, Karsten Jens Quint</i>	

<b>5</b>	<b>Visualisierung, Datenanalyse und Software Engineering.....</b>	<b>174</b>
5.1	MASSim (Multi-Agent Systems Simulation) Plattform.....	176
	<i>Tristan Behrens, Jürgen Dix, Michael Köster, Peter Novák</i>	
5.2	Visualisierung großer nichteuklidischer Datensätze.....	181
	<i>Barbara Hammer</i>	
5.3	Interaktive Visualisierung zeitabhängiger Oberflächen.....	189
	<i>Kai Hormann, Federico Ponchio, Tim Winkler</i>	
5.4	Combining Aspect-Oriented and Model-Driven Development for Supply Network Monitoring .....	199
	<i>Alexander Hornung, Jörg P. Müller</i>	
5.5	Inner Sphere Trees for Proximity and Penetration Queries.....	216
	<i>Gabriel Zachmann</i>	
5.6	A Benchmarking Suite for Static Collision Detection Algorithms .....	221
	<i>Gabriel Zachmann</i>	
	<b>Mitglieder des Simulationswissenschaftlichen Zentrums .....</b>	<b>224</b>



# 1 Materialien

Materialien spielen ohne Zweifel eine große Rolle für den Fortschritt in Technik und Industrie aber z. B. auch in Medizin, Pharmazie und vielen anderen Gebieten mit unmittelbarem Nutzen für die Gesellschaft. Zunehmend werden dabei Materialien benötigt, die über bestimmte, oft extreme Eigenschaften verfügen. Zur zielgerichteten Entwicklung und Untersuchung derartiger Materialien sind reale Experimente oft zu aufwändig, an ihre Stelle treten zunehmend virtuelle Experimente auf dem Rechner. Dazu müssen Modelle und Algorithmen entwickelt werden, die es erlauben, wesentliche Eigenarten der Materialien und ihrer Bestandteile auf dem Rechner darzustellen. So kann es insbesondere gelingen, die Auswirkung verschiedener Parameter bei Herstellung oder Einsatz der Materialien im Voraus abzuschätzen.

Im Simulationswissenschaftlichen Zentrum werden dazu Arbeiten auf sehr unterschiedlichen Ebenen durchgeführt.

In dem Projekt zur Streuung von Ionen entwickeln Wissenschaftler des Instituts für Theoretische Physik Rechnermodelle, mit denen das Verständnis von Materialien auf der mikroskopischen Ebene verbessert werden kann. Auf einer Skalenebene darüber wird im Bereich der Technischen Chemie die Bildung von Polymeren untersucht. Mit einem auf Monte-Carlo-Simulation basierendem Verfahren können die Vorgänge bei der Polymerisation und die Auswirkungen bestimmter Prozessparameter genau untersucht werden. Auf der makroskopischen Ebene werden in der Kunststofftechnik Herstellungsverfahren für Verbundmaterialien analysiert. Aufwändige Rechnermodelle erlauben es, die Ausbreitung flüssiger Kunststoffe beim Tränken von Faserstrukturen so zu steuern, dass schädliche Lufteinschlüsse vermieden werden können. Im Bereich Mathematik/Informatik werden schließlich Partikelpackungen auf ihre Dichte hin untersucht. Durch Simulation verschiedener Korngrößenverteilungen sollen z. B. Betonmischungen gefunden werden, die eine besondere Festigkeit aufweisen.

Diese Arbeiten zeigen, dass die Simulation für das Thema „Materialien“ eine hervorgehobene Rolle spielt. Auch wenn eine umfassende rechnergestützte Entwicklung von Designer-Materialien mit vorgegebenen Eigenschaften heute noch nicht möglich ist, so können die hier vorgestellten Arbeiten doch als ein Schritt in diese Richtung angesehen werden.

## 1.1 Elektronendynamik und quantenmechanische Effekte in der Streuung von Ionen an Atomen

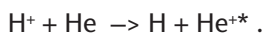
Eines der grundlegenden Probleme in der Theoretischen Physik und Chemie ist die Beschreibung der Struktur und der Dynamik von Vielelektronensystemen. Der Begriff des Vielelektronensystems umfasst die einzelnen Atome als die „elementaren“ Bausteine der gewöhnlichen Materie, alle Arten von molekularen Systemen sowie Festkörperoberflächen und die Festkörper selbst. Ion-Atom-Streusysteme sind sehr gut geeignet, fundamentale Fragestellungen zur Vielelektronendynamik zu untersuchen. Darüber hinaus sind sie anwendungsrelevant: In der Krebstherapie wird beispielsweise seit einigen Jahren die Bestrahlung von Gewebe mit hochenergetischen Ionen mit Erfolg eingesetzt.

*Myroslav Zapukhlyak,  
Tom Kirchner;  
Institut für Theoretische Physik*

Für die Erforschung von Ion-Atom-Streusystemen existieren sehr leistungsfähige experimentelle Methoden. Allerdings lassen sich die experimentell gewonnenen Daten häufig erst in Verbindung mit detaillierten theoretischen Untersuchungen und systematischen Rechnungen physikalisch interpretieren und verstehen. In diesem Projekt haben wir in Zusammenarbeit mit Experimentatoren Beiträge zum Verständnis sehr elementarer Streusysteme leisten können. Für Ionenstöße an Heliumatomen haben wir insbesondere Elektronentransferreaktionen so detailliert wie möglich untersucht und damit grundlegende Information über Quanteneffekte in der Streuung gewonnen.

### Stand der Forschung

Experimentatoren aus den USA hatten 2006 erstmalig Daten zur sogenannten Transfer-Anregung in Proton-Helium-Stößen gewonnen. In diesem Prozess wird ein Elektron in das Projektil eingefangen, während das zweite in ein angeregtes Niveau des zurückbleibenden Heliumions (gekennzeichnet durch einen Stern am Elementsymbol) übergeht. Symbolisch lässt sich die Reaktion folgendermaßen darstellen:



Zwar konnten wir durch Rechnungen zur Interpretation der er-

sten Messergebnisse beitragen [1], jedoch waren einige Fragen offen geblieben. Dies hing insbesondere damit zusammen, dass wir die Elektronendynamik zwar quantenmechanisch, die Streuung der Kerne aber klassisch behandelt hatten. Durch eine Weiterentwicklung unserer numerischen Verfahren wurde es nun möglich, gewisse Strukturen in den gemessenen Spektren durch Rechnungen zu bestätigen und auf bisher nicht betrachtete Quanteneffekte in der Streuung der Kerne zurückzuführen [2]. Abbildung 1 zeigt dieses Resultat: Als Funktion des Streuwinkels ergeben nur Simulationsrechnungen, die diese Quanteneffekte berücksichtigen, eine Struktur, die sich in qualitativer Übereinstimmung mit den Messwerten befindet. Klassische Streurechnungen liefern dagegen strukturlose Kurven.

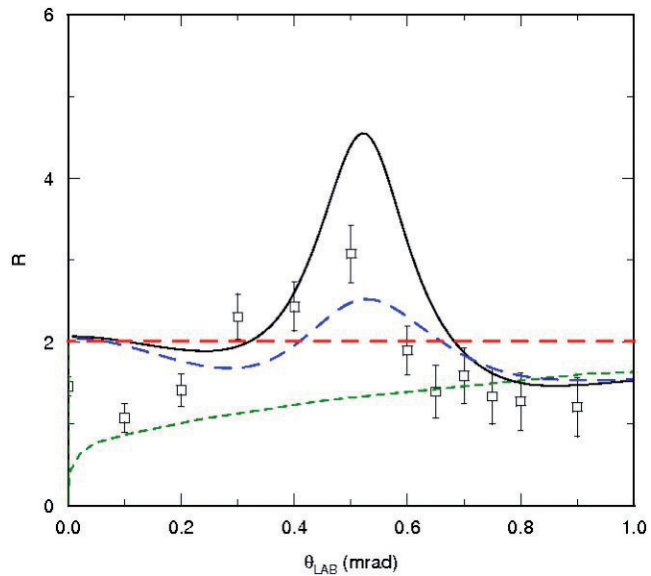


Abbildung 1: Relative differentielle Wirkungsquerschnitte in  $p$ -He Stößen bei 50 keV Stoßenergie als Funktion des Streuwinkels des Projektils. Betrachtet wird das Verhältnis von Transfer-Anregung zu Transfer versus Doppelanregung zu Einfachanregung. Die schwarze und blaue Kurve sind Ergebnisse quantenmechanischer Rechnungen, während für die rote und grüne Kurve die Kernstreuung klassisch behandelt wurde [2].

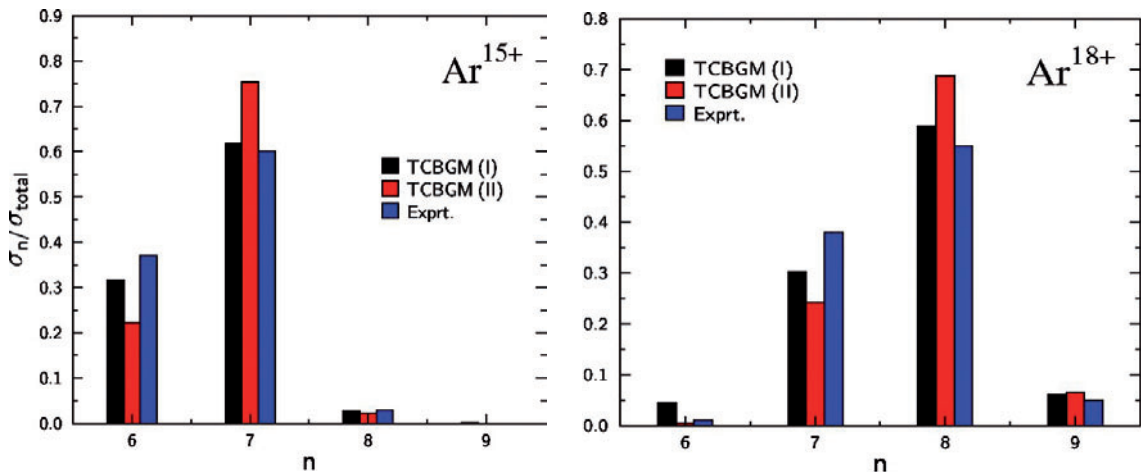


Abbildung 2: Relative Wirkungsquerschnitte für Elektronentransfer in hoch angeregte Zustände (charakterisiert durch deren Hauptquantenzahl  $n$ ) in Stößen von Argonionen an Helium. Die Stoßenergie beträgt 14 keV pro Ladungseinheit des Projektiles. Den experimentellen Daten sind zwei verschiedene Modellrechnungen (bezeichnet als TCBGM (i) und TCBGM (ii)) gegenübergestellt [3].

In einer Kooperation mit Experimentatoren aus Groningen und Heidelberg interessierten wir uns für den Elektronentransfer in hoch angeregte Projektilezustände, die man durch die Hauptquantenzahl  $n$  charakterisiert. Dieser Prozess tritt in relativ langsamen Stößen hoch geladener Ionen mit großer Wahrscheinlichkeit auf. Es ist uns gelungen, wiederum auf der Grundlage – sehr aufwändiger – quantenmechanischer Rechnungen, die  $n$ -spezifischen experimentellen Daten zu bestätigen. Die Abbildung 2 illustriert dies für zwei der vier untersuchten Streusysteme. Man erkennt deutlich, dass mit steigender Projektilladung der Transfer in immer höhere Schalen stattfindet.

## Forschungsaufgaben

Einige der durchgeführten Vergleiche zwischen den Ergebnissen unserer Rechnungen und den Daten unserer experimentell arbeitenden Kooperationspartner deuten an, dass es noch ungelöste Probleme in der theoretischen Beschreibung und numerischen Simulation der Prozesse gibt. Dies betrifft insbeson-

dere Prozesse, in denen mehrere Elektronen simultan aktiv sind und sogenannte elektronische Korrelationseffekte eine wichtige Rolle spielen. Zwar zeigt unsere Analyse auch, dass diese Effekte häufig überbewertet worden sind, jedoch bleibt es eine Aufgabe für die Zukunft, sie auf systematischer Grundlage einzubeziehen, um quantitative Aussagen über ihre Bedeutung machen zu können.

### **Fazit und Ausblick**

Unsere auf der Grundlage der Quantenphysik durchgeführten Simulationsrechnungen haben einige aktuelle experimentelle Befunde auf quantitativem Level bestätigt und eine Interpretation der physikalischen Prozesse ermöglicht. Insbesondere haben sie die Rolle von Quanteneffekten in der Streuung der Kerne verdeutlicht. Dies ist wichtig und zukunftssträchtig für das aktive Forschungsgebiet der interatomaren Stöße. Der Erfolg der Rechnungen legt es nahe, die Methoden weiter voranzutreiben und komplexere Probleme auf ähnlich systematischer Grundlage anzugehen. Derzeit arbeiten wir an einer Ausweitung unseres Formalismus auf die Ionenstreuung an Molekülen. Erste, vorläufige Ergebnisse für das Wassermolekül deuten an, dass wir auch hier wichtige Beiträge zum tieferen Verständnis der Elektronendynamik und der Radiolyse dieses für so viele Prozesse in Natur und Technik relevanten Moleküls leisten können.

### **Beteiligte Partner**

Für die beschriebenen Arbeiten haben wir mit Experimentatoren von der Missouri University of Science and Technology (USA) sowie dem Kernfysisch Versneller Instituut (KVI) der Universität Groningen (Niederlande) und dem Max-Planck-Institut für Kernphysik in Heidelberg zusammengearbeitet.

### **Literatur**

- [1] A. Hasan, B. Tooke, M. Zapukhlyak, T. Kirchner, M. Schulz: Kinematically complete experiment on transfer excitation in intermediate-energy p+He collisions, Phys. Rev. A 74:032703, 2006.
- [2] M. Zapukhlyak, T. Kirchner, A. Hasan, B. Tooke, M. Schulz:



Projectile angular-differential cross sections for transfer and transfer excitation in proton collisions with helium, Phys. Rev. A 77:012720, 2008.

- [3] S. Knoop et al., Single-electron capture in keV Ar<sup>15+</sup>...<sup>18+</sup> +He collisions, J. Phys. B 41 :195203, 2008.

## 1.2 Monte-Carlo-Simulation der radikalischen Ter- und Tetrapolymerisation

Bei der radikalischen Polymerisation mit drei und mehr Monomeren unterschiedlicher Reaktivität können im Polymerisationsverlauf Polymere mit sehr unterschiedlichen Copolymerzusammensetzungen und damit auch Polymereigenschaften entstehen. Zur Beschreibung der umsatzabhängigen Zusammensetzung der Comonomere, der integralen und differentiellen Copolymermischung, der Comonomerumsätze und Sequenzverteilungen der Comonomere wird ein MC-Simulations-Programm vorgestellt und mit experimentellen Untersuchungen zur Ter- und Tetrapolymerisation von Donor-, Acceptor- und Neutralmonomeren in diskontinuierlichen und halbkontinuierlichen Versuchen getestet.

*Marco Drache, Gudrun Schmidt;  
Institut für Technische Chemie*

### Stand der Forschung

Die radikalische Copolymerisation verschiedener funktioneller Monomere vom Acceptor-Donor-Typ wurde in den letzten Jahrzehnten gut untersucht und führte zu funktionalen Polymeren mit interessanten Eigenschaften [1]. Die Addition einer dritten oder vierten Komponente zu einem binären Copolymer kann zu wesentlichen Änderungen der chemischen und physikalischen, z. B. mechanischen Eigenschaften führen. So kann der gleichmäßige Einbau schon kleiner Mengen eines Monomers bestimmte Eigenschaften, wie z. B. die Anfärbbarkeit, die Adhäsion, das Fließverhalten oder die Wärmeformbeständigkeit verändern. Der Einbau größerer Comonomeranteile kann zu Produkten mit ganz neuen mechanischen, rheologischen oder thermischen Eigenschaften führen. Deshalb ist die Multikomponentenpolymerisation mit Monomeren sehr unterschiedlicher Reaktivität und Funktionalität industriell außerordentlich vielseitig nutzbar.

Für den Zusammenhang zwischen Comonomermischung und Copolymerzusammensetzung bei niedrigem Umsatz wurden verschiedene ternäre Copolymerisationsgleichungen [2,3] auf der Basis der Monomerbilanzen der beteiligten Monomere (M1, M2 und M3) abgeleitet.

Basisinformation sind die Copolymerisationsparameter (auch r-Werte: Quotienten der Geschwindigkeitskonstanten der Homo- und Copolymerisation) der binären Teilsysteme. Die Comonomer- und damit auch die Copolymerzusammensetzung ändert sich im Polymerisationsverlauf bei unterschiedlicher Reaktivität der Comonomere oft sehr dramatisch, was zu chemisch sehr uneinheitlichen Produkten führen kann.

Für die Kontrolle der umsatzabhängigen Comonomer- und Copolymerzusammensetzungen kann die klassische analytische Integration der Terpolymerisationsgleichungen mit relativ hohem Aufwand herangezogen werden. In [4] wurde für die Simulation der Kettenwachstumsreaktionen für die Terpolymerisation ein stochastischer Monte-Carlo-Algorithmus vorgeschlagen.

Auf Basis dieser Arbeiten wurde von uns ein erweitertes Monte-Carlo-Programm für Ter- und Tetrapolymere zur umsatzabhängigen Bestimmung der Comonomer- und Copolymerzusammensetzung, der Comonomerumsätze und Sequenzverteilungen der Comonomere erstellt und an ausgewählten Polymersystemen mit experimentellen Daten getestet, um damit seine Leistungsfähigkeit zu untersuchen.

## Forschungsaufgaben

### Monte-Carlo-Modell

Voraussetzung für die umsatzabhängige Simulation der Ter- und Tetrapolymerisation sind die r-Werte der binären Teilsysteme ( $r_{ij}$ ) und die molare Zusammensetzung der Reaktionsmischung ( $molR$ ). Für unsere Simulationen verwendeten wir immer  $n_{total} = 10^8$  Moleküle, die bei der Initialisierung der Simulation entsprechend der Zusammensetzung der Reaktionsmischung zu Beginn der Polymerisation auf die konkreten Monomere  $n_i$  verteilt werden:

$$n_{i,0} = \frac{molR_{i,0}}{n_{total}}$$

Ein Monte-Carlo-Schritt der Simulation beinhaltet den Einbau einer Monomereinheit in das Polymer in folgenden Teilschritten:

1. Berechnung der Reaktionswahrscheinlichkeiten ( $P_{ij}$ ) des Monomers am Kettenende:

Homopolymerisationsschritt ( $i=j$ )

$$P_{ij} = \frac{n_i}{n_i + \sum_{j \neq i} \frac{n_j}{r_{ij}}}$$

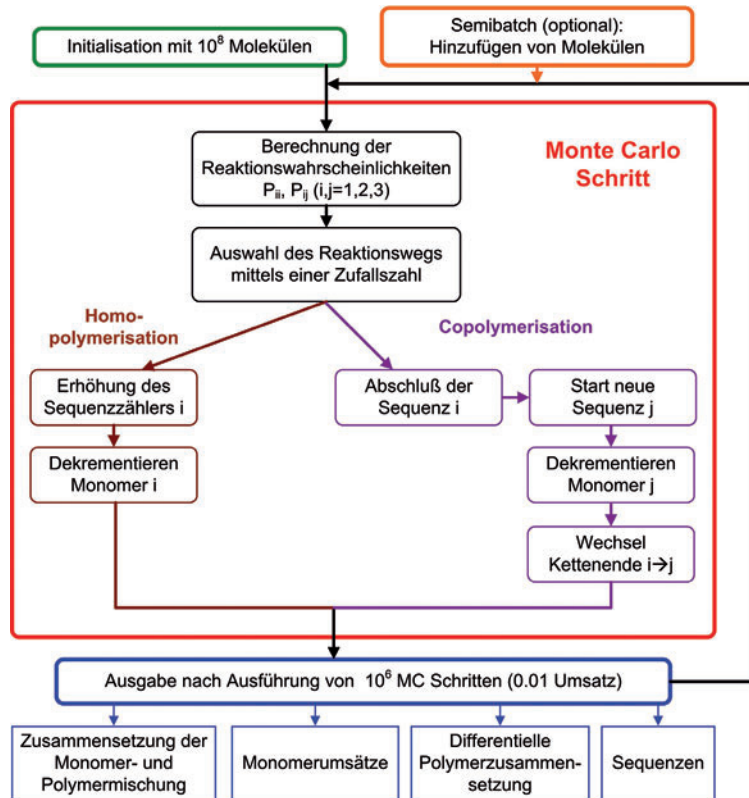
Copolymerisationsschritt ( $i \neq j$ )

$$P_{ij} = \frac{n_j}{n_i r_{ij} + r_{ij} \sum_{j \neq i} \frac{n_j}{r_{ij}}}$$

2. Auswahl eines Reaktionswegs mittels einer Zufallszahl
3. Verringerung der Zahl der Monomermoleküle des konkret eingebauten Monomers um 1
- 4.a Homopolymerisation: Erhöhung des Sequenzzählers
- 4.b Copolymerisation: Wechsel des Monomers am Kettenende, Start einer neuen Sequenz

Nach jeweils  $10^6$  Monte-Carlo-Schritten (0,01 Monomerumsatz) werden alle relevanten Ergebnisse protokolliert. Optional kann eine halbkontinuierliche Reaktionsführung durch Erhöhung der Molekülzahl von Monomeren simuliert werden, dabei ist zu beachten, dass die Zudosierung an einem Umsatz und nicht bei einer vorgegebenen Reaktionszeit erfolgt.

Der schematische Ablauf der Simulation ist in Schema 1 dargestellt. Die Monte-Carlo-Simulation [5, 6] ist als Programm „mcCopolymer“ in C++ mit einem Tcl-Interface implementiert und läuft unter Windows und UNIX. Für die Berechnung einer Terpolymerisation werden ca. 15 s Rechenzeit auf einer AMD Opteron 8216 CPU benötigt. Als Zufallszahlengenerator wurde die „Mersenne-Twister“-Bibliothek [7] verwendet.



Schema 1: Ablauf der Monte-Carlo- Simulation

### Simulation der diskontinuierlichen und halbkontinuierlichen Terpolymerisation

Die Terpolymerisation der Monomere Methylmethacrylat (MMA), Styrol (S) und N-Phenylmaleimid (NPI) wurde bei 60 °C im Lösungsmittel 1,4-Dioxan unter Stickstoffatmosphäre durchgeführt [8]. Die Gesamtmonomerkonzentration betrug 6,6 mol/l und die Konzentration des Initiators AIBN 0,04 mol/l. Aus der Elementaranalyse konnte durch rechnergestützte Optimierung der C, H, N und O Bestimmung die experimentelle Terpolymerzusammensetzung umsatzabhängig ermittelt werden. Für die Simulation der Terpolymerisation benötigt man neben der molaren Zusammensetzung der Reaktionsmischung die Copolymerisationsparameter der binären Teilsysteme, diese sind in Tabelle 1 zusammengestellt.

Monomere	MMA	S	NPI
MMA	---	0,42	1,41
S	0,52	---	0,03
NPI	0,19	0,10	---

Tabelle 1: Verwendete Copolymerisationsparameter [9] ( $r_{ij}$ )

In Abbildung 1 sind die Ergebnisse der MC-Simulation einer diskontinuierlichen Terpolymerisation dargestellt. Die Simulation beschreibt die experimentellen Copolymerzusammensetzungen aus den Elementaranalysen sehr gut. Das Terpolymer MMA/S/NPI ist ein Neutral/Donor/Acceptor-System, wobei Styrol ein starker Donor und NPI ein starker Acceptor ist. Das starke Donor/Acceptor-System S/NPI, das Charge Transfer-Komplexe bildet, bestimmt die Reaktionsgeschwindigkeit am Beginn der Polymerisation, sodass auch die Anteile an Styrol und NPI im Polymer sehr hoch sind. Bei einem molaren Anteil von 10 % NPI in der Reaktionsmischung zu Beginn der Polymerisation findet man einen Anteil von fast 40 % NPI im Terpolymer. Der überproportionale Einbau von NPI führt dazu, dass der Molanteil des Monomers NPI in der Reaktionsmischung schnell abnimmt (dünne grüne Linie). MMA wird erst stärker in das Polymer eingebaut, wenn nur noch wenig NPI verfügbar ist. Das in der Comonomermischung eingesetzte NPI ist schon bei Umsätzen von ca. 40 % vollständig verbraucht. Bei höheren Umsätzen findet nur noch eine Copolymerisation zwischen Styrol und MMA statt. Dies führt zu einer über den Umsatz nicht konstanten Copolymerzusammensetzung (dicke Linien), es werden also chemisch sehr uneinheitliche Produkte gebildet.

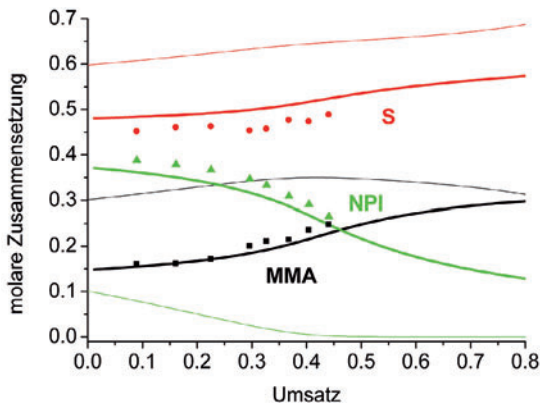
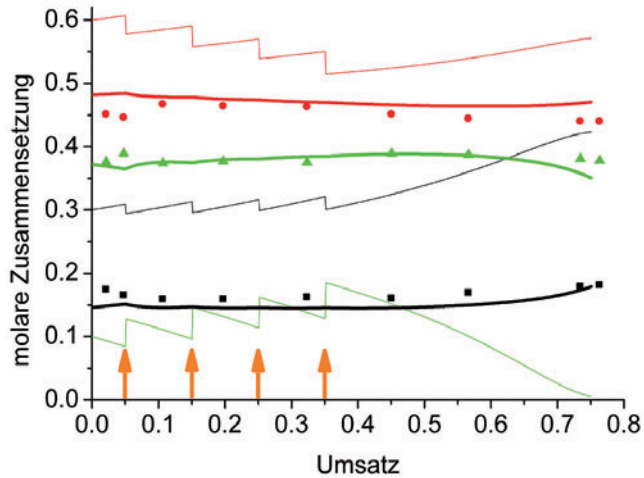


Abbildung 1: Diskontinuierliche Terpolymerisation MMA/S/NPI (30/60/10 mol %), Vergleich der experimentellen Copolymerzusammensetzungen (Punkte) mit den aus MC-Simulationen erhaltenen Restmonomer- (dünne Linien) und Copolymerzusammensetzungen (dicke Linien)

Abbildung 2: Halbkontinuierliche Terpolymerisation MMA/S/NPI (30/60/10 mol%), Vergleich der experimentellen Copolymerzusammensetzungen (Punkte) mit den aus MC-Simulationen erhaltenen Restmonomer- (dünne Linien) und Copolymerzusammensetzungen (dicke Linien), mit Zudosierung des Monomers NPI (orangene Pfeile)



Chemisch einheitliche Produkte können bei radikalischen Multikomponentenpolymerisationen durch halbkontinuierliche Reaktionsführung erhalten werden. Das vorgestellte MC-Programmpaket ermöglicht die Berechnung von Dosierregime, bei denen die reaktiven Komponenten des Systems z. B. stufenweise zudosiert werden. Am Beispiel der Terpolymerisation von MMA/S/NPI (30/60/10 mol%) wurde ein Dosierregime berechnet und experimentell überprüft (Abbildung 2). Die berechnete halbkontinuierliche Rezeptur beschreibt Zugaben von NPI bei 5, 15, 25 und 35 % Umsatz. Die Pfeile markieren die Zugaben, die Monomerzusammensetzung (dünne Linien) ändert sich durch die Zudosierung. Der Anteil des Monomers NPI bleibt im Mittel während des Zugabezeitraumes konstant und sinkt erst nach der letzten Zugabe vergleichbar zum undosierten Versuchsverlauf ab. Das Dosierregime ermöglichte eine nahezu konstante Polymerzusammensetzung bis ca. 55-60 % Umsatz. Die Übereinstimmung von Modellberechnungen und Experimenten ist überraschend gut. Durch die halbkontinuierliche Reaktionsführung werden in Gegensatz zum diskontinuierlichen Versuch (Abbildung 1) über einen weiten Umsatzbereich chemisch einheitliche Terpolymere gebildet.

### Fazit und Ausblick

Die experimentellen radikalischen Polymerisationen von Donor-, Acceptor- und Neutralmonomeren, die sehr unterschiedliche

Reaktivität aufweisen, zeigen die Leistungsfähigkeit des vorgestellten Monte-Carlo-Modells der Ter- und Tetrapolymerisation. Bei zuverlässiger Kenntnis der  $r$ -Werte der beteiligten binären Comonomersysteme lassen sich Copolymer-, Comonomerszusammensetzungen und Monomerumsätze bis zu hohen Umsätzen übereinstimmend mit experimentellen Daten beschreiben. Die umsatzabhängig berechneten (experimentell nur aufwändig zugänglichen) differentiellen (momentanen) Comonomerszusammensetzungen und Sequenzverteilungen ermöglichen ein besseres Verständnis des Zusammenhangs zwischen der Polymerstruktur und Zusammensetzung bei einer Multikomponentenpolymerisation.

Die MC-Simulationen sind auch zur Ausarbeitung von Dosierregimen für die Synthese chemisch einheitlicher Polymere ein wichtiges Hilfsmittel.

Für experimentell wenig untersuchte Polymersysteme lassen sich mit Hilfe der Modellrechnungen wichtige Vorhersagen bis zu hohen Umsätzen treffen, wenn die  $r$ -Werte zugänglich sind.

### **Beteiligte Partner**

- Europäisches Graduiertenkolleg der Deutschen Forschungsgemeinschaft: „Microstructural Control in Free-Radical Polymerization“, TU Clausthal, TU Eindhoven (NL), Universität Amsterdam (NL), Universität Göttingen, TU Braunschweig, Universität Potsdam
- LANXESS Deutschland GmbH, Leverkusen

### **Literatur**

- [1] B.C. Triverdi, B.M. Culbertson, Maleic anhydride, New York: Plenum Press; 1982; Z. M. O. Rzaev, J. Polym. Sci. 1999, A 37, 1095; Prog. Polym. Sci. 2000, 25, 163; Z.M.O. Rzaev, A. Güner, G. Kibare, H.K. Can, A. Asici, Europ. Polymer J. 2002, 38, 1245.
- [2] A. Valvassori, B. Sartori, Adv. Polym. 1967, 5, 28.
- [3] G.E. Ham, J. Macromol. Sci. Chem. 1983, A19, 693.
- [4] B. Bouzou, F. Pflüger, Macromol. Theory Simul. 2003, 12, 243; 2003, 12, 251.
- [5] G. Schmidt-Naake, M. Drache, F. Koppers, Chemie Ingenieur Technik 2007 79, 1155-1164.
- [6] M. Drache, G. Schmidt-Naake Kinetic Studies and Monte-

Carlo-Simulations of radical Ter- and Tetrapolymerisations  
European Congress of Chemical Engineering, Kopenhagen  
2007.

- [7] M. Matsumoto, T. Nishimura, ACM Trans Model Comp. Simul. 1998, 8, 3.
- [8] F. Koppers: Beiträge zur Terpolymerisation – Zeitabhängige chemische Zusammensetzung, Diplomarbeit TU Clausthal, Institut für Technische Chemie, 2006.
- [9] G. Schmidt-Naake, H. Schmidt, B. Litauszki, W. Bieger, Macromol. Chem. 1990, 191, 2963; G. Schmidt-Naake, H. Schmidt, B. Litauski, W. Berger, Macromol. Chem. 1990, 191, 3033; G. Schmidt-Naake, H. Schmidt, B. Litauski, Wiss. Z. Techn. Univ. Dresden 1988, 37, 145; 1989, 38,131.

### 1.3 Modellierung und Simulation des Vacuum Assisted Resin Infusion

*Gerhard Ziegmann, Florian Klunker, Santiago Aranda;  
Institut für Polymerwerkstoffe  
und Kunststofftechnik (PuK)*

Hochbeanspruchte, zu bewegende Strukturen sind heute das Zielgebiet für Faserverbunde, da durch Gewichtseinsparungen ein hohes Energiesparpotential vorhanden ist. Ihr Vorteil gegenüber anderen Materialien liegt in der Möglichkeit, die Fasern in Form einer textilen Struktur anisotrop und damit lastgerecht in eine Matrix einzubetten und somit das Potential der Ausgangswerkstoffe besser auszuschöpfen. Die Einbettung der Fasern kann auf unterschiedlichem Wege erfolgen.

Eine weit verbreitete Produktionstechnik für Faserverbund ist das Liquid Composite Molding (LCM): Trockene textile Strukturen werden in einer Form abgelegt und durch niederviskose Matrixsysteme imprägniert. Für diese Fließprozesse gibt es verschiedene Varianten. Speziell für großflächige Bauteile in kleiner Stückzahl eignet sich das Vacuum Assisted Resin Infusion (VARI), auch Vakuum-Infusionsverfahren genannt. Dabei werden textile Strukturen im trockenen Zustand auf einem Werkzeug abgelegt, mittels Dichtband und Vakuumfolie abgedichtet und evakuiert. Über eine Zuleitung wird ein reaktives Harz-Härter-Gemisch injiziert und breitet sich idealerweise vom Anguss kommend zu einer Absaugung hin aus (siehe Abbildung 1).

Die Aufgabe dieses Prozesses ist es, die Fließfrontausbreitung so zu gestalten, dass die sich im Bauteil befindliche Luft stets entweichen kann, da die sonst auftretenden Lufteinschlüsse das Bauteil schwächen und damit zu Ausschussware machen.



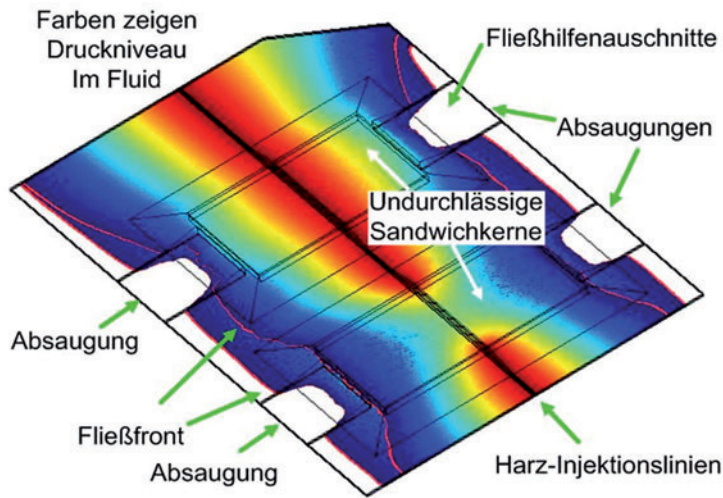


Abbildung 1: Beispiel eines Füllvorgangs

Die textilen Strukturen weisen einen anisotropen Aufbau auf, der das Fließverhalten beeinflusst. Eine Vorhersage des Fließverhaltens ist für komplexe Bauteile ohne weitere Hilfe nur mit sehr viel Erfahrung möglich. In der Regel werden die Prototypen über Trial-and-Error-Methoden gefertigt, die dann in einem zweiten Schritt eine Aussage über Kostenstrukturen, Fertigungsprobleme etc. zulassen.

Ziel des Projektes war es, diese Art des Designs mit Simulation zu unterstützen, indem prozessorientierte Fragestellungen untersucht wurden. Damit konnte die Anzahl der Experimente deutlich reduziert werden. Speziell für das VARI-Verfahren gab es bisher keine Möglichkeit, das Fließverhalten in 3D-Bauteilen effizient zu berechnen. Neben der Aufbereitung von Simulationmethoden zur Darstellung des Prozesses wurden zudem Messmethoden entwickelt, mit denen eine verlässliche Gewinnung der Materialparameter möglich wurde.

### Stand der Forschung

Das Fließen in LCM-Prozessen kann mit Hilfe von Strömungen durch poröse Medien dargestellt werden. Dabei wird die Kontinuitätsgleichung [1]

$$\frac{\partial(\rho\phi)}{\partial t} + \nabla(\rho v) = 0 \quad (1)$$

mit der Gleichung von Darcy

$$\mathbf{v} = -\frac{K}{\mu} \nabla p \quad (2)$$

gekoppelt und es entsteht die Gleichung von Richards [2]

$$\frac{\partial(S\phi)}{\partial t} = \nabla \left( \frac{K}{\mu} \nabla p \right) \quad (3).$$

Dabei ist  $p$  der Druck,  $\mathbf{v}$  die massengemittelte Geschwindigkeit,  $\mu$  die Viskosität und  $\rho$  die Dichte des Fluids,  $\phi$  ist die Porosität,  $K$  der Permeabilitätstensor und  $S(p)$  die Sättigung des porösen Mediums.

Zur Berechnung von Gleichung (3) ist ein Zusammenhang von  $S(p)$  anzugeben. Ist dieser bekannt, so lässt sich Gleichung (3) überführen in [3]

$$C(p) \frac{\partial p}{\partial t} = \nabla \left( \frac{K}{\mu} \nabla p \right) \quad (4),$$

wobei  $C(p)$  eine Feuchtekapazität darstellt. Gleichung (4) wird z. B. zur Beschreibung von Bodenströmungen verwendet. Bekannte Modelle in diesem Zusammenhang sind die von van Genuchten [4] bzw. Corey-Brooks [5].

In der Anwendung in Faserverbundstrukturen kann es aufgrund von hochgradigen Nichtlinearitäten von  $C(p)$  zu Konvergenzproblemen kommen und somit die Berechnung ineffizient werden. Zur Vermeidung dieses Problems wurde die Volume of Fluid Methode (VOF) entwickelt [6]: Das Simulationsgebiet wird in einen voll gesättigten und einen ungesättigten Bereich getrennt. Durch die Annahme, dass sich die Sättigung im voll gesättigten Bereich nicht mehr ändert, reduziert sich Gleichung (4) auf eine stationäre Gleichung. In Kombination mit der Gleichung von Darcy kann der Fließfrontfortschritt in einem separaten Schritt berechnet werden.

Diese Art der Berechnung setzte sich durch und führte zu einer Verbesserung des allgemeinen Verständnisses der LCM-Prozesse.

Zur Anwendung für das VARI-Verfahren wurden diese Methoden weiterentwickelt. Speziell für die Anwendung in großen Bauteilen sind zwei Probleme zu lösen (siehe Abbildung 2):

- Im VARI-Verfahren wird durch die Evakuierung der Laminataufbau kompaktiert, bis sich ein Kräftegleichgewicht aus Druckkräften und den Rückstellkräften der textilen Struktur einstellt. Dringt das Fluid in die textile Struktur ein, so verändern sich durch den Fluidruck die Anteile im Kräftegleichgewicht und die textile Struktur wird deformiert: In Angussnähe (links) weitet sich die Geometrie auf, da der Differenzdruck von Fluid zu Atmosphäre geringer wird. Die Rückstellkräfte der textilen Struktur sind zudem abhängig vom Benetzungszustand: Im benetzten Zustand ist ein höherer Faservolumengehalt erreichbar. Die Berücksichtigung der Deformation und die daraus resultierende Veränderung der Materialparameter sind wesentliche Aspekte für die Darstellung in der Simulation.
- Zur Beschleunigung des Fließverhaltens werden häufig Fließhilfen eingesetzt. Diese hochdurchlässigen Strukturen erlauben eine großflächige, schnelle Verteilung des im Prozess aushärtenden Harzes. Meist an Oberflächen verwendet, zeigt sich an diesen im Vergleich zu einem Bauteil ein starker Vorlauf. Die Darstellung der Fließhilfen und die Parameterbestimmung für diese stellen ein Problem in der aktuellen Forschung dar.

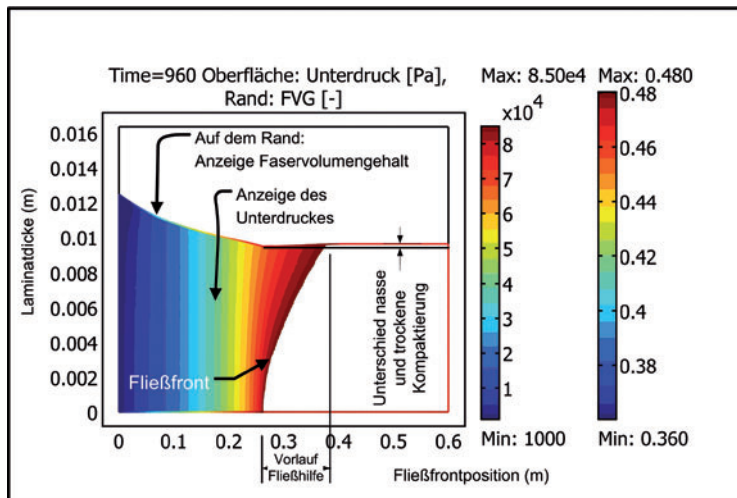


Abbildung 2: Simulation des VARI-Verfahrens

Es gibt bereits Ansätze, die diese Aspekte in der Simulation berücksichtigen [7-12]. Im Rahmen des Projektes wurde diese Problematik aufgegriffen, um eine effiziente Fließsimulation für das VARI-Verfahren durchführen zu können.

### **Forschungsaufgaben**

Ziel der Forschung war es, bestehende Methoden für die LCM-Simulation, insbesondere für das VARI-Verfahren zu evaluieren und zu erweitern.

Im Rahmen des Projektes wurde statt des VOF-Ansatzes ein neuer Ansatz auf Basis der Gleichung von Richard gewählt und evaluiert [13]. Nach erfolgreichem Abschluss dieses Teilaspekts wurde die Analogie zur Wärmeleitungsgleichung genutzt, um mit bestehenden FEM-Programmen die Verformung während der Injektion berechnen zu können [14].

Eine weitere Hürde bildete die Geometriedarstellung und die Parametergewinnung für die Fließhilfe. Die Berücksichtigung der Fließhilfe führte aufgrund ihrer geringen Dicke im Vergleich zu den anderen Dimensionen zu Problemen in der Vernetzung. Diese konnten durch die Verwendung von sogenannten Oberflächenelementen beseitigt werden, welche als 2.5D-Shell-Struktur auf einer 3D-Solid-Struktur abgelegt werden [15]. Für 3D-Bauteile konnte damit die CPU-Zeit für die Simulationen um den Faktor 40 reduziert werden.

Die Messung der Fließhilfenpermeabilität kann durch die Art ihrer textilen Struktur und ihres Einsatzes nicht direkt erfolgen. Es wurde eine inverse Methode entwickelt, bei der aus Daten eines Fließexperimentes mit Hilfe von Computersimulation die Fließhilfenpermeabilität berechnet wurde [16].

Der Einsatz dieser Methoden zeigte eine gute Übereinstimmung mit Vergleichsmessungen aus der Praxis mit einer Abweichung von etwa 5% [14]. Dieser Wert liegt in der üblichen Streuung für die Materialparameter. Es wurde zudem gezeigt, dass die verwendeten Methoden auch auf Fließsimulationen in großen Bauteilen übertragbar sind [17].

### **Fazit und Ausblick**

Es wurde eine Methodik entwickelt, mit der das VARI-Verfahren für großflächige Bauteile auf effiziente Weise simuliert werden konnte. Zudem wurden Messprozeduren definiert, mit denen

die relevanten Parameter für das Fließen von Harz durch textile Strukturen ermittelt werden konnten. Im Vergleich zu Experimenten zeigten die Simulationen nur geringe Abweichungen. Damit kann die Methode für große, dünnwandige Bauteile eingesetzt werden.

In zukünftigen Aufgaben soll die Fließsimulation mit der Wärmebilanz im Werkzeug gekoppelt werden: Die bereits im Prozess aushärtenden Harze setzen Wärme frei und damit verändert sich lokal die Viskosität des Harzes. Mit dem Zusatzmodul wird es möglich sein, für dickwandige Bauteile, bei denen schnell reagierende Harze eingesetzt werden, beliebige Harzzustände zu berücksichtigen und damit die Fließsimulationen durchzuführen.

## Partner

Wir danken der CTC GmbH, die uns durch die Einrichtung von Patenschaftsstellen bei diesem Forschungsvorhaben finanziell unterstützt hat.

## Literatur

- [1] T. C. Lee, Applied Mathematics in Hydrogeology. I. Hydrogeology--Mathematics., I. Title. GB1001.72.M37L44, 1998.
- [2] P. Knabner and L. Angermann. Numerik partieller Differentialgleichungen - eine anwendungsorientierte Einführung, Springer, Berlin, Heidelberg, New York, 2000.
- [3] L. Guarracino, F. Quintana, A third-order accurate time scheme for variably saturated groundwater flow modeling, Communications in Numerical Methods in Engineering, Jg.. 20, 2004, S.379–389.
- [4] M. Th. van Genuchten, A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils, Soil Sci. Soc. Am. J., Jg. 44, 1980, pages 892-898.
- [5] R. H. Brooks, A. T. Corey, Properties of porous media affecting fluid flow, J. Irrig. Drainage Div., Vol. 92, 1966, S. 62–68.
- [6] Hirt, C. W.; Nichols, B. D. : Volume of Fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries, Journal of Computational Physics, Jg. 39, 1981, S. 201–225.
- [7] A. Hammami, B. R. Gebart, Analysis of the Vacuum Infusion Molding Process, Polymer Composites, Jg. 21, 2000, S. 28–40.

- [8] N.C. Correia, F. Robitaille, A.C. Long, C.D. Rudd, P. Simacek, S.G. Advani, Analysis of the vacuum infusion moulding process: I. Analytical formulation, *Composites Part A: Applied Science and Manufacturing*, Jg. 36, 2005, S. 1645–1656.
- [9] E. Ruiz, S. Chatel and F. Trochu. A simplified numerical approach to simulate resin transfer moulding with a dispersion medium. *FPCM8*, July 11-13, Douai, S. 331–340, 2006.
- [10] P. Simacek and S. G. Advani. Desirable features in mold filling simulations for liquid composite molding processes. *Polymer Composites*, 25, S. 355-367, 2004.
- [11] Andersson, H. M.; Lundström, T. S: *Computational Fluid Dynamics Applied to the Vacuum Infusion Process*, *Polymer Composites*, Jg. 26, 2005, S. 231–239.
- [12] J. M. Lawrence, P. Simacek and S. G. Advani. Advances in liquid composite moulding flow simulation: fabric and distribution media compaction and tow saturation. *SEICO07*, 28th International Conference, Paris, 683–691, 2007.
- [13] F. Klunker, C. Elsenhans, S. Aranda, G. Ziegmann, H. Behnke, Modelling the RTM-process with the richard's equation numerical investigation of a simplified van-genuchten-model, in Vorbereitung für die Zeitschrift *Kunststofftechnik*.
- [14] F. Klunker, G. Ziegmann, S. Aranda, P. Baisch, P. Fideu, A. Herrmann, Permeability and Compaction Models for Non Crimped Fabrics to perform a 3D-filling simulation of Vacuum Assisted Resin Infusion, *FCPM 9*, 7.-9. Juli, 2008, Montreal, wird in *Special Issue Composites Part A* veröffentlicht.
- [15] F. Klunker, Y. M. Liu, G. Ziegmann, S. Aranda, Permeability measurement of flow enhancement layers by an indirect measurement technique using flow simulation, *SAMPE EUROPE 28th International Conference (SEICO 08)*“, 31.März - 2.April, 2008, Paris, S.491-496.
- [16] F. Klunker, S. Aranda, G. Ziegmann, Flow simulation for sandwich structures: case studies and modelling of high permeable layers, *8th International Conference on Sandwich Structures (ICSS-8)*, 6.-8.Mai, 2008, Porto, S.1208-1220.
- [17] F. Klunker, Aspekte zur Modellierung und Simulation des Vacuum Assisted Resin Infusion, *Dissertation an der TU Clausthal*, 2008.

## 1.4 Hierarchische Simulation von Partikelmischungen

Partikelmischungen und -packungen spielen eine wichtige Rolle in vielen Bereichen der Materialwissenschaften, der Chemie oder der Pharmazie. Eine grundlegende Eigenschaft solcher granularer Medien ist die Packungsdichte oder auch Raumauffüllung, d. h. das Verhältnis von Nettovolumen der Partikel zu (umhüllendem) Volumen der Packung. Einen Überblick über diese und weitere Eigenschaften bietet Torquato [1].

*Michael Kolonko, Steffen Raschdorf;  
Institut für Mathematik*

Während etwa bei Filtersystemen eine definiert hohe Porosität und somit geringe Packungsdichte benötigt wird, ist bei den meisten Baustoffen, wie etwa den Bindemittelsystemen, eine hohe Raumauffüllung erwünscht. Mit modernem ultrahochfestem Beton beispielsweise können hoch tragfähige und gleichzeitig sehr filigrane Bauteile und Bauwerke ausgeführt werden, wie sie bislang dem Stahlbau vorbehalten waren. Dadurch verbessern sich die Wirtschaftlichkeit und die Nachhaltigkeit der Betonbauweise und es werden ihr neue Anwendungsfelder erschlossen. Die hohe Festigkeit dieses Betons beruht hauptsächlich darauf, dass der Feinstkornanteil wesentlich höher ist als bei normalfestem Beton und der höhere Wasseranspruch des Feinstkorns durch hochwirksame Fließmittel ausgeglichen wird.

In diesem Forschungsprojekt sollen Instrumente entwickelt werden, die Kornzusammensetzung auf simulativem Weg so zu optimieren, dass die Raumauffüllung des Gemisches und damit die Endfestigkeit weiter erhöht werden kann. Hierbei soll nicht nur die Zuschlag-Komponente berücksichtigt werden, sondern es wird eine ganzheitliche Gefügeoptimierung durchgeführt, die ebenfalls den Zement und die Feinststoffe mit einschließt.

Getrieben durch die Politik (Stichwort Emissionszertifikate) macht sich in jüngster Zeit auch eine Sensibilisierung der Zementindustrie für den Klimaschutz bemerkbar. Gerade bei der Herstellung von Zementen und Betonen kann eine deutliche CO<sub>2</sub>-Reduktion erzielt werden, wenn Klinkerstoffe substituiert werden können. Mit Hilfe dieses Vorhabens wird es auch ermöglicht, einzelne Komponenten einer Mischung zumindest

teilweise durch umweltfreundlichere zu ersetzen, ohne dass Einbußen in der Gefügefestigkeit hingenommen werden müssen.

Bevor die Optimierung der Zusammensetzung durchgeführt werden kann, muss zunächst ein Verfahren für die Schätzung der Raumauffüllung einer Mischung vorhanden sein. Dazu wird auf dem Rechner eine dichte, zufällige Kugelpackung erzeugt. Die Durchmesser der virtuellen Kugeln sollen dabei der Korngrößenverteilung der realen Partikel entsprechen. Eine wesentliche Schwierigkeit bildet hier zunächst die enorm große Anzahl von Kugeln, die für eine repräsentative Mischung berücksichtigt werden müssen: Reale Mischungen enthalten Partikel, deren Durchmesser um bis zu 5 Größenordnungen variieren, von weniger als  $0,1 \mu\text{m}$  (Flugasche, Mikrosilika) über  $200 \mu\text{m}$  (Zement) bis zu  $32 \text{mm}$  (Kies). Betrachtet man die relativen Häufigkeiten, so sind diese größten Partikel extrem selten, aufgrund ihres Durchmessers dürfen sie aber für Volumenbetrachtungen keinesfalls vernachlässigt werden. Soll man diese seltenen Kugeln im passenden Verhältnis in der Packung vorfinden, so resultiert daraus eine sehr große Anzahl benötigter Kugeln, die für eine realistische Simulation platziert werden müssen. Da diese Anzahl die heutigen Rechnerkapazitäten bei weitem übersteigt, wurde ein hierarchischer Ansatz entwickelt, der es gestattet, die Korngrößenverteilung in einzelne Intervalle (die Fraktionen) zu unterteilen, welche separat simuliert werden können. Ein passendes Samplingverfahren unterstützt diese Methode und hilft, jeweils eine adäquate Anzahl von Kugeln weiterer Fraktionen in die Simulation mit einzubeziehen, damit auch sogenannte „Wandeffekte“ berücksichtigt werden. Diese Effekte beschreiben die verminderte Raumauffüllung durch nicht befüllbare Lücken an Wänden bzw. deutlich größeren Kugeln in der Packung.

Das Projekt basiert auf der Implementierung eines Simulationssystems [2] von Dipl.-Inf. S. Raschdorf, Institut für Mathematik, und der experimentellen Arbeit [3] von Dipl.-Ing. S. Palm, Institut für Nichtmetallische Werkstoffe. Beide Ansätze werden weiterhin parallel fortgesetzt und ermöglichen u.a. die Validierung der Simulationsergebnisse.



## Stand der Forschung

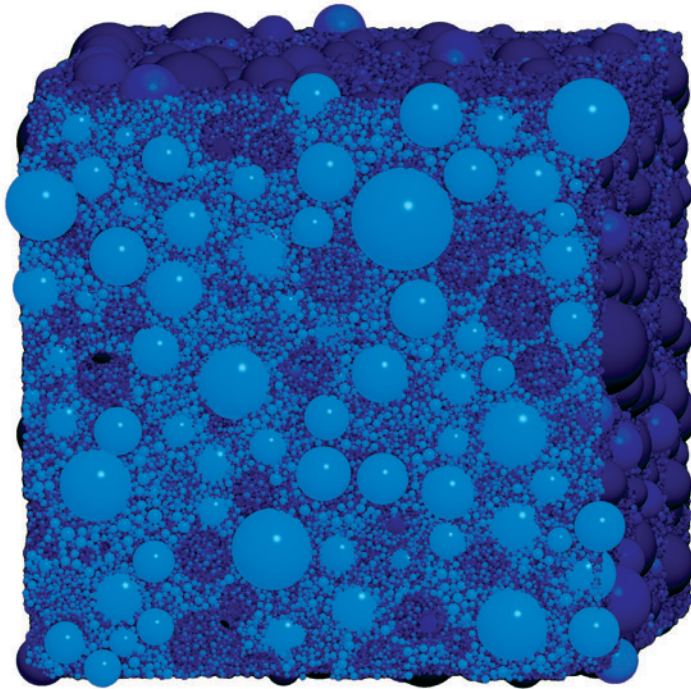
Bereits seit über einem Jahrhundert ist unter der Bezeichnung „Fuller-Kurve“ [4] eine Vorschrift für Korngrößenverteilungen bekannt, welche besonders dichte Packungen ermöglichen. Auch wenn die Fuller-Kurve über die Jahre gute Dienste geleistet hat und in etliche Normen eingeflossen ist, so ist sie für moderne Hochleistungsbetone nicht mehr ausreichend. Arbeiten [5] haben gezeigt, dass sogenannte „Ausfallkörnungen“ eine zusätzliche Steigerung der Raumauffüllung bieten können. Hierbei werden gezielt einzelne (mittlere) Kornfraktionen aus der Mischung weggelassen, damit kleineren Körnern so ein leichter Zugang zu den Lücken zwischen größeren Partikeln geboten wird.

Für die Abschätzung der Raumauffüllung beliebiger Korngrößenverteilungen wurden zahlreiche auf geometrischen Überlegungen basierende Modelle entwickelt [6, 7]. Hierbei handelt es sich meist um mathematische Ansätze, deren Koeffizienten empirisch bestimmt wurden. Für deren Anwendung müssen zahlreiche Informationen über die Mischung vorliegen, etwa die Volumenanteile, mittleren Korndurchmesser und Packungsdichten einzelner Komponenten, welche möglichst monodispers sein sollten. In der Praxis könnte die Korngrößenverteilung an den Siebgrenzen in diese Intervalle eingeteilt werden, jedoch wäre der Aufwand für über 100 Messungen der Packungsdichten jeder einzelnen dieser Fraktionen enorm, sodass meist eine gröbere Fraktionierung vorgenommen wird. Extrem breite Korngrößenverteilungen erschweren aber auch die Arbeit dieser Methoden, da der experimentelle Anteil stark ansteigt.

Eine verbreitete Alternative ist die Erzeugung virtueller Packungen am Rechner. Da sowohl die Partikelvolumina als auch die Containergeometrie bekannt sind, kann die Packungsdichte leicht berechnet werden. Zur Repräsentation der Partikel werden meistens Kugeln benutzt, in den letzten Jahren sind aber auch weitere Partikelformen wie Ellipsoide und Stäbchen simuliert worden. Zur Erzeugung solcher Packungen gibt es zwei grundverschiedene Ansätze: Beim „Random Sequential Addition“ wird ein Partikel nach dem anderen zu einer Packung hinzugefügt. Dies geschieht z. B. durch Fallenlassen des Partikels

über dem Container, wodurch dieser (dank simulierter Gravitation) auf bereits platzierte Partikel trifft und solange abrollt, bis eine stabile Position erreicht worden ist. Da bei dieser Methode einmal platzierte Partikel nicht wieder bewegt werden, kann der Zugang zu Lücken in der Packung versperrt werden, was stark verdichtete Packungen verhindert. Andererseits ermöglicht dies einen höheren Partikeldurchsatz als beim konkurrierenden Ansatz, dem „Collective Rearrangement“. Hierbei sind von Beginn an sämtliche Partikel im Container vorhanden, überlappen sich jedoch. Ausgehend von diesen Überlappungen werden Abstoßungen zwischen den Partikeln simuliert, damit diese in alle verbleibenden Lücken der Packung drängen können. Zugleich wird der Container schrittweise vergrößert, oder aber alternativ jeder Kugelradius mit einem Faktor verkleinert, bis schließlich eine überlappungsfreie, dichte Packung entsteht.

Im vorliegenden Forschungsprojekt wurde ein Algorithmus der „Collective Rearrangement“-Kategorie [8] implementiert und modifiziert. Durch ihn sind dichte, realistische Packungen möglich, wie Vergleiche mit Glaskugelpackungen zeigten. Um mit diesem Algorithmus auch sehr große Partikelanzahlen realisieren zu können (siehe Abbildung 1), müssen effiziente Datenstrukturen zur Verwaltung der Partikel eingesetzt werden, da der Großteil der Rechenzeit für die Suche nach sich überlappenden Kugeln aufgewendet wird. Während die (artverwandten) Simulationen der Molekulardynamik für diese Zwecke auf Gitterstrukturen zurückgreifen, ist dieses Vorgehen für Betonmischungen ungeeignet, da hier das Verhältnis zwischen kleinsten und größten Partikeln zu groß ist, um eine feste Gittergröße effizient nutzen zu können. Stattdessen wird ein „Loose Octree“ benutzt, der sowohl schnelles Einfügen als auch Auffinden benachbarter Kugeln unterstützt, ohne die Liste potenziell überlappender Kugeln zu stark zu überschätzen. Um diese Datenverwaltung noch weiter zu beschleunigen, wird zusätzlich eine „Verlet-Liste“ eingesetzt. Sie arbeitet wie ein Zwischenspeicher und nutzt die Tatsache aus, dass sich die Positionen der Kugeln während aufeinander folgender Iterationsschritte des Algorithmus nur wenig ändern.



*Abbildung 1: Packung einer Zementmischung mit mehr als 1 Million Kugeln. Bild erstellt mit einer modifizierten Version von QuteMol [9].*

Da sowohl mit analytischen Packmodellen als auch mit Packungssimulationen gegenwärtig keine kompletten Korngrößenverteilungen von Betonmischungen verarbeitet werden können, wurde ein hybrides Verfahren entwickelt, das auf eine hierarchische Fraktionierung der Gesamtverteilung setzt. Die einzelnen Fraktionen sind gerade so breit, dass sie durch eine Simulation (mit dem oben erwähnten Algorithmus) realisiert werden können. Dies geschieht separat voneinander, jedoch werden, ausgehend von der feinsten, in jeder Fraktion Kugeln größerer Fraktionen („Randkugeln“) mitberücksichtigt. So ist die Simulation einer korrekten Mischung gewährleistet, in der Interaktionen zwischen kleinsten und größten Partikeln stattfinden können. Für die Berechnung der Raumauffüllung werden aber nur die tatsächlich der betreffenden Fraktion angehörigen Kugeln herangezogen, die übrigen Kugeln bilden gewissermaßen einen inneren, unebenen Containerrand. Über den Kehrwert der Packungsdichte ergibt sich dann das benötigte Volumen der Kugeln dieser Fraktion, welches wiederum mit dem leeren Porenraum der nächstgrößeren Fraktion ver-

rechnet wird. Somit werden die Lücken jeder Fraktion mit einer Mischung aller vorheriger Fraktionen aufgefüllt, bis schließlich mit der letzten Fraktion ein Ergebnis für die Gesamtmischung berechnet werden kann. In Abbildung 2 ist zu sehen, wie der Zwischenraum der größten Kugeln (a) als homogene Packung mittlerer Kugeln angesehen wird, welche zunächst (b) simuliert werden müssen. Dazu wiederum ist die Simulation der Packung kleinster Kugeln Voraussetzung (c), wobei einige Kugeln der anderen beiden Fraktionen mitsimuliert werden.

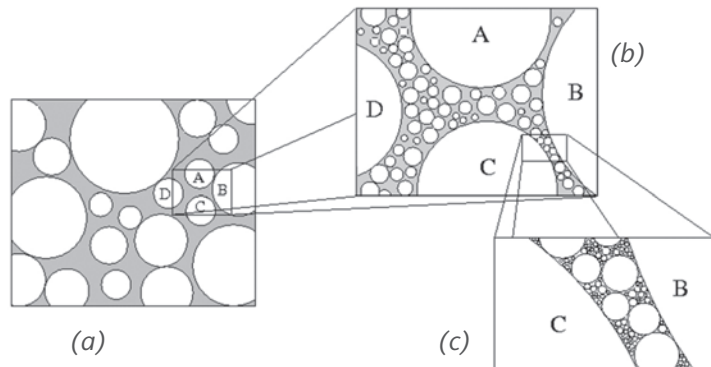


Abbildung 2: Der hierarchische Ansatz behandelt kleine Kugeln als homogene Substanz zwischen größeren.

Um sicherzustellen, dass die Randkugeln auch tatsächlich alle Fraktionen der Mischung bis zu den seltenen, größten Partikeln repräsentieren, wird zur Erzeugung der Kugeldurchmesser das „Systematic Sampling“ verwendet. Dabei wird die Korngrößenverteilung in Durchmesserintervalle gleicher Wahrscheinlichkeit (= Häufigkeit in der Mischung) eingeteilt, und zu jedem Intervall wird exakt eine repräsentative Kugel erzeugt.

Vergleiche der Ergebnisse dieses hierarchischen Ansatzes sowohl mit denen der unfraktionierten Simulation als auch der analytischen Modelle bestätigen die Gültigkeit dieses Verfahrens. Am Beispiel einer Zementmischung zeigt Tabelle 1, dass die geschätzte Raumaufüllung der Modelle CPM [6] und LMPM [7] bei gleichem Aufwand (6 Fraktionen) deutlich höher ausfällt als das Resultat unseres Modells, welches nur knapp über dem Ergebnis der unfraktionierten Simulation liegt. Auch eine deutliche Aufstockung der Fraktionsanzahl hilft der Kon-

kurrenz nicht, das hierarchische Modell zu übertreffen. Somit kann die Raumauffüllung auch für extrem polydisperse Partikelmischungen geschätzt und damit eine Berücksichtigung dieser bei der Optimierung ermöglicht werden.

Methoden	Anzahl der Fraktionen	Raumauffüllung [%]
Unfraktionierte Simulation	1	79,8309
Hierarchisches Modell	6	80,0505
CPM	6	82,6924
CPM	42	82,7020
LMPM	6	81,6694
LMPM	42	79,0546

*Tabelle 1: Vergleich verschiedener Modelle zur Packungsdichtebe-rechnung einer Zementmischung*

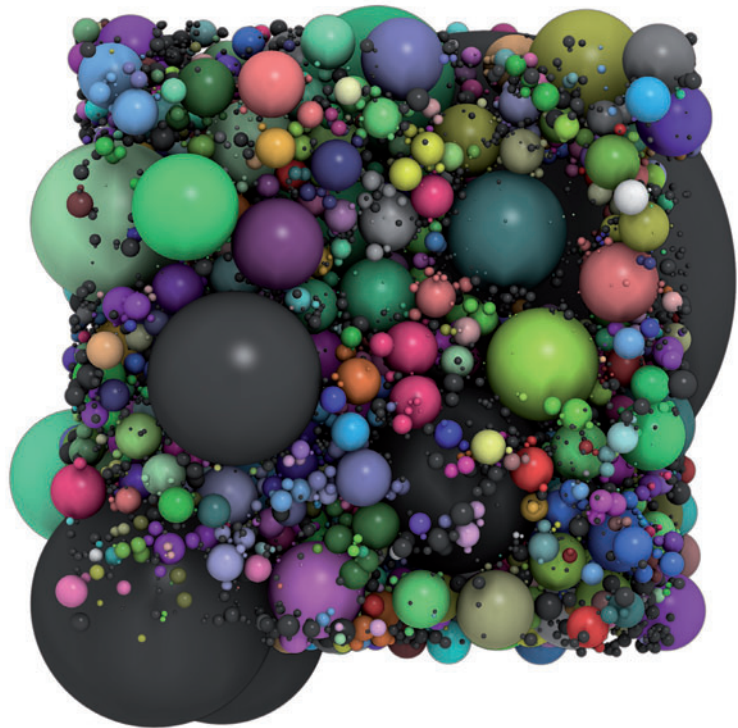
## Forschungsaufgaben

Die Schätzung der Raumauffüllung ermöglicht nun eine Optimierung der Mischungszusammensetzung, sei es, um bestehende Materialien durch Austausch einzelner Komponenten kostengünstiger und umweltfreundlicher herzustellen, oder um gänzlich neue Rezepturen zu ergründen, die zu dichteren und somit festeren Packungen führen. Für solch eine Optimierung bieten sich u.a. Genetische Algorithmen an, die im Vergleich zu anderen Verfahren sehr robust gegenüber der Problemstruktur sind.

Ein noch nicht gelöstes Problem ist die Handhabung der Agglomeration in der Simulation. Reale Partikelmischungen können die simulativ bestimmten Packungsdichten nicht erreichen, wenn Korngrößen im Mikrometerbereich mit einbezogen werden. In diesen Größenordnungen dominieren interpartikuläre Kräfte das Packungsverhalten, sodass sich poröse Agglomerate mit fraktaler Struktur bilden. Diese Clusterbildung verhindert außerdem das Eindringen feinsten Körner in die Zwischenräume mittelgroßer Partikel.

Da das Simulationsmodell ursprünglich keine interpartikulären Kräfte berücksichtigt, wurde bislang ein Verfahren erprobt, Partikelagglomerate durch Kugelcluster abzubilden, die zu Beginn

der Simulation erzeugt werden und nachfolgend unveränderlich sind. Beispielfhaft zeigt Abbildung 3, dass aufgrund des gerade im Feinstkornbereich liegenden Hauptanteils der Partikel enorm viele Agglomerate erzeugt werden, was die Simulationsleistung deutlich herabsetzt. Ein ebenso bedeutendes Problem ist in diesem Zusammenhang jedoch auch die Ermittlung der Agglomerationsparameter (Größenverteilung, Anzahl der Partikel, Kompaktheit, ...) aus den tatsächlichen Mischungen.



*Abbildung 3: Kugelpackung mit Agglomeraten. Benachbarte, gleichfarbige Kugeln gehören demselben Agglomerat an. Bild erstellt mit einer modifizierten Version von QuteMol [9].*

### **Fazit und Ausblick**

Mit dem in diesem Projekt weiterentwickelten Simulationsprogramm steht ein Werkzeug zur Verfügung, mit dem zuverlässig die Packungsdichte von Partikelpackungen ermittelt werden kann. Daneben lässt sich auch die Berechnung weiterer Kennzahlen wie der Koordinationszahl und der spezifischen Oberfläche durchführen. Zur Untersuchung des Wandeffekts in Partikelpackungen wurde als Containergeometrie neben einem Würfel

auch ein Zylinder implementiert; die Raumauffüllung kann in einzelnen Schichten vom Containerrand zur Mitte separat ermittelt werden. Die Kugelkoordinaten erzeugter Packungen lassen sich auf Wunsch abspeichern, ebenso ist der Export zu Visualisierungen umgesetzt. In Kombination mit dem Modell der hierarchischen Fraktionierung lässt sich die Simulation mit beliebigen Mischungen durchführen, insbesondere auch solchen, die bisher aufgrund ihrer breiten Durchmesser-Verteilung der Packungssimulation nicht zugänglich waren.

Zur besseren Validierung der Simulation und realistischen Abschätzung feinkörniger Mischungen soll zukünftig eine verbesserte Integration von Agglomeraten stattfinden. Daneben liegt der Fokus auf der Umsetzung einer Optimierungskomponente, um so den praktischen Nutzen der Forschungsarbeit zu erschließen.

Eine weitere Möglichkeit zur Verbesserung der Simulationsergebnisse in späteren Arbeiten liegt in der Betrachtung weiterer Partikelgeometrien. Dann müsste jedoch mit vergleichenden Simulationen geklärt werden, ob eine genauere Approximation der Kornform den enormen Aufwand rechtfertigt, der mit der Abkehr von der – für die Abstandsberechnungen in der Simulation günstigen – Kugel-Form einhergeht. Ein Kompromiss wäre die Umsetzung bestimmter Geometrien durch in sich starre Kugelkonstrukte, wie etwa die Nachbildung von Stäbchen durch hintereinander aufgereihete Kugeln.

### **Beteiligte Partner**

Dieses Vorhaben wird seit 2005 in einer Zusammenarbeit zwischen dem Institut für Mathematik (Prof. Dr. M. Kolonko) und dem Institut für Nichtmetallische Werkstoffe (Prof. Dr. A. Wolter) an der TU Clausthal betrieben, finanzielle Förderung besteht dabei durch die Dyckerhoff-Stiftung (Projekt-Nummer T218/15631/2006). Insbesondere stellt die Stiftung Stipendien für die seit Frühjahr 2006 laufenden Promotionsvorhaben der Herren Raschdorf und Palm zur Verfügung. Das Projekt wird darüber hinaus im Bereich der Visualisierung durch die Abteilung „Computergraphik“ des Instituts für Informatik (Prof. Dr. K. Hormann, Prof. Dr. G. Zachmann) unterstützt.

An einem weitergehenden gemeinsamen Forschungsantrag zusammen mit Instituten der Materialwissenschaften wird gegenwärtig gearbeitet.

Kugelpackungen, die von dem hier vorgestellten Simulationsprogramm erzeugt wurden, werden inzwischen auch am Institut für Technische Mechanik sowie am Institut für Polymerwerkstoffe und Kunststofftechnik als Ausgangssituation für weitergehende Simulationen (Strömungssimulation, FEM-Simulation) benutzt.

## Literatur

- [1] S. Torquato: Random Heterogenous Materials: Microstructure and Macroscopic Properties, Band 16 von "Interdisciplinary Applied Mathematics", Springer, 2001.
- [2] S. Raschdorf: Simulation der Raumauffüllung von Beton mit vorgegebener Korngrößenverteilung, Diplomarbeit, TU Clausthal, Institut für Mathematik, 2006.
- [3] S. Palm: Messung der Raumauffüllung von trockenen dispersen Systemen, Diplomarbeit, TU Clausthal, Institut für Nichtmetallische Werkstoffe, 2006.
- [4] W. B. Fuller, S. E. Thompson: The laws of proportioning concrete, Transactions of the American Society of Civil Engineers, 59:67-172, 1907.
- [5] P. Stroeven, M. Stroeven, D. D. Bui: On optimum packing density, in: Y. shu Yuan, S. P. Shah, H. lin Lü (Eds.), Proceedings of International Conference on Advances in Concrete and Structures, Rilem Publications SARL:793-800, 2003.
- [6] F. de Larrard, T. Sedran: Mixture-proportioning of high-performance concrete, Cement and Concrete Research, 32(11):1699-1704, 2002.
- [7] A. B. Yu, N. Standish: Estimation of the porosity of particle mixtures by a linear-mixture packing model, Industrial & Engineering Chemistry Research, 30(6):1372-1385, 1991.
- [8] D. He, N. N. Ekere, L. Cai: Computer Simulation of random packing of unequal particles, Physical Review E, 60(6):7098-7104, 1999.
- [9] M. Tarini, P. Cignoni, C. Montani: Ambient Occlusion and Edge Cueing for Enhancing Real Time Molecular Visualization, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 12(5):1237-1244, 2006.





## 2 Produktion, Logistik und Verkehr

Im Bereich der simulativ abgesicherten Fertigungssteuerung und Ressourcenplanung konnte die Forschung im Rahmen von zwei Industrieprojekten erfolgreich fortgesetzt werden. Auf dem Gebiet der variantenreichen, sehr großen Werkstattfertigung bedürfen Aspekte wie die Einsteuerung von Aufträgen und die Ressourcenplanung, insbesondere bei komplexen Qualifikationsstrukturen, im heutigen Wettbewerbsumfeld der Unterstützung durch Methoden und Werkzeuge aus dem Baukasten der Digitalen Fabrik. Der Lösungsansatz für Modelle mit bis zu 800 Maschinen beinhaltet dabei hierarchische Simulationsmodelle, modularisierte Parametrierung und die Verknüpfung zu ERP-Systemen. In der Planungsphase werden dabei konsequent Werkzeuge wie Virtual Reality und 3D-CAD eingesetzt, da nur durch die frühzeitige Abbildung von Maschinen und Fabrikstrukturen in der dreidimensionalen Welt und darauf aufbauend durch Funktions-, Kollisions- und Ergonomieuntersuchungen Potentiale und Engpässe erkannt werden können.

Die Forschungsarbeiten auf dem Gebiet des Pünktlichkeitsmanagements und des Revenue Managements im Luftverkehrsweisen konnten ebenfalls erfolgreich weitergeführt werden. In diesem Zusammenhang wurde auch die Zusammenarbeit mit der Deutschen Lufthansa AG intensiviert. Bei der Deutschen Lufthansa AG werden im Simulationswissenschaftlichen Zentrum Clausthal entwickelte Techniken mittlerweile für weite Bereiche der strategischen und taktischen Flugplanung eingesetzt. Dabei werden auf verschiedenen Planungsebenen sowohl Stabilitäts- als auch Wirtschaftlichkeitsaspekte berücksichtigt. In Zusammenarbeit mit der Deutschen Lufthansa AG und der Arcor AG konnten die Clausthaller Forschungsergebnisse in den Bereichen Verkehrsplanung, Revenue Management und Callcenter Management in zwei neuen Umgebungen angewandt werden.

### 2.1 Unterstützung der Planung und Steuerung großer Werkstattfertigungen durch Ablaufsimulation

Große Werkstattfertigungen mit umfangreichen Maschinenparks und komplexen, variantenreichen Produktionsprogrammen waren bisher für eine umfassende Ablaufsimulation kaum zu bewältigen. Aspekte wie die Einsteuerung von Aufträgen und die Ressourcenplanung, insbesondere bei komplexen Qua-

*Uwe Bracht, Johannes Reichert,  
Christian Kruse;  
Institut für Maschinelle Anlagen-  
technik und Betriebsfestigkeit*

likationsstrukturen, bedürfen im heutigen Wettbewerbsumfeld der Unterstützung durch Methoden und Werkzeuge aus dem Baukasten der Digitalen Fabrik.

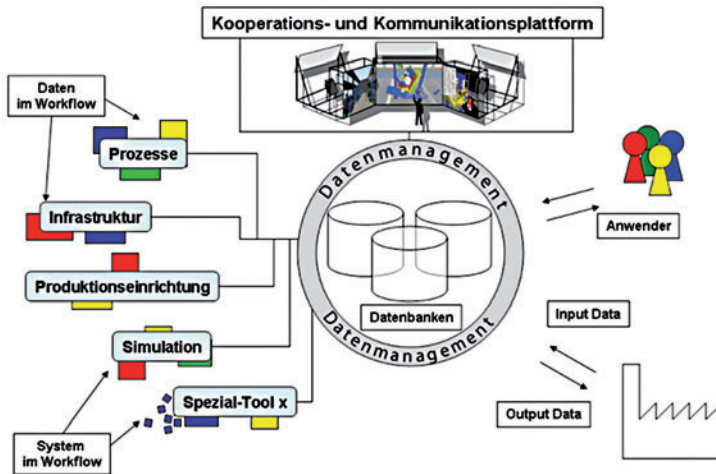
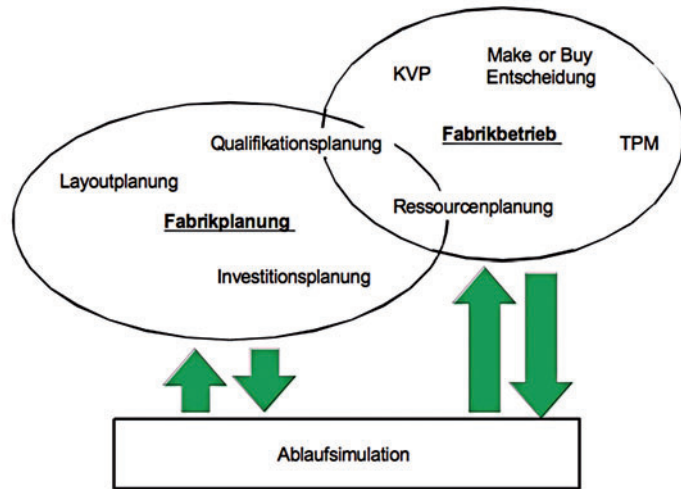


Abbildung 1: Datenmanagement ist die zentrale Herausforderung der Digitalen Fabrik [2].

Im Rahmen mehrerer Industrieprojekte konnte das Institut für Maschinelle Anlagentechnik und Betriebsfestigkeit (IMAB) Bereich Anlagenprojektierung und Materialflusslogistik den Aspekt der simulativ abgesicherten Fertigungssteuerung und Ressourcenplanung auf das Gebiet variantenreicher, sehr großer Werkstattfertigungen übertragen. Die Abbildung von bis zu 800 Maschinen mit bis zu 20 Prozessschritten stellt naturgemäß die Simulation selber, aber insbesondere die Datenverwaltung vor große Herausforderungen (Abbildung 1) [1].

Aus den Anforderungen ergaben sich zunächst zwei primäre Ziele, nämlich die Fabrikplanung sowie den Fabrikbetrieb über die Simulationsmodelle aktiv zu unterstützen. Insbesondere die Fertigungssteuerung sollte in ihrer täglichen Entscheidungsfindung unterstützt und gleichzeitig die Möglichkeit geschaffen werden, auch strategische Ausrichtungen, wie z. B. die Einführung neuer Steuerungsstrategien, beurteilen zu können. Insbesondere beim Einsatz von spezialisiertem Personal in Verbindung mit anspruchsvollen Produkten und Prozessen war es von Interesse, die Planung von Qualifizierungs- und Investitionsmaßnahmen im Voraus, möglichst online und mit realen Daten aus MES und ERP Systemen, abzusichern (Abbildung 2).

Abbildung 2: Primärziele sind Unterstützung von Fabrikplanung und -betrieb

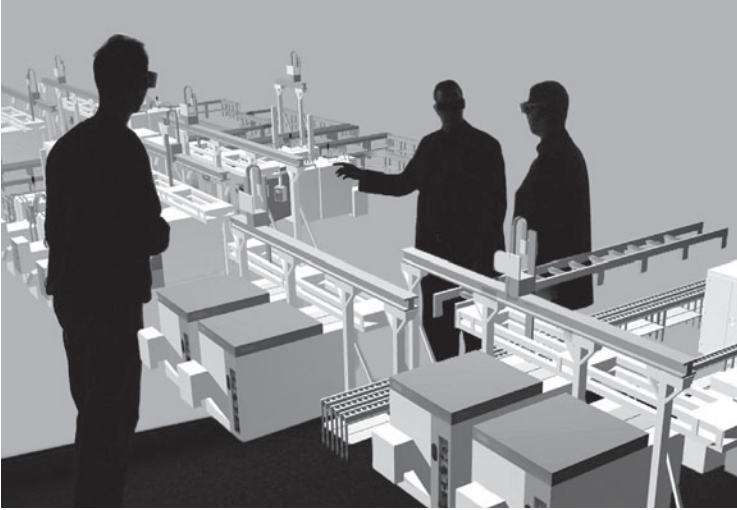


Durch den Einsatz der Methoden und Werkzeuge aus der Digitalen Fabrik, wie sie in der VDI Richtlinie 4499 [9] beschrieben werden, können mit den hier gezeigten Ansätzen und Methoden der modularen Simulation die Herausforderungen angegangen werden.

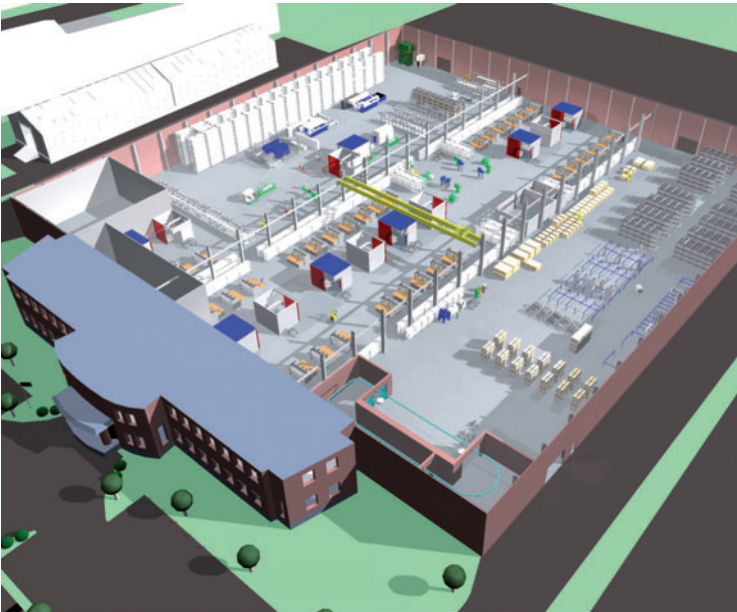
### Verbesserung von Planungsergebnissen durch Simulation

Das grundsätzliche Ziel des IMAB ist es, die unterschiedlichen Disziplinen der Fabrik- und Anlagenplanung durch Methoden der Simulation und Visualisierung zu unterstützen.

Dabei setzt das IMAB auf den Einsatz moderner Werkzeuge wie Virtual Reality im Rahmen von Begehungen im hauseigenen VR-Labor (Abbildung 3) [10]. Der Einsatz derartiger Technologien setzt die konsequente Nutzung von 3D-CAD in den Planungsphasen zwingend voraus [2]. Nur durch die frühzeitige Abbildung von Maschinen und Fabrikstrukturen in der dreidimensionalen Welt lassen sich im Anschluss entsprechend die Potentiale, z. B. bei Funktions-, Kollisions- und Ergonomieuntersuchungen, heben. Werden die Objekte zusätzlich noch mit hinreichenden Metainformationen hinterlegt und z. B. in elektronischen Katalogen gesammelt, lassen sich auch für die Generierung von Simulationsmodellen erhebliche Vorteile erzielen [6].



*Abbildung 3: Begehung einer Anlage in VR am IMAB*



*Abbildung 4: Visualisierung der Planung eines metallverarbeitenden Betriebes*

Die Planungsqualität einer einzelnen Anlage oder einer ganzen Fabrik kann durch den Einsatz moderner Mittel entscheidend verbessert werden [7, 8]. Wie in Abbildung 4 zu sehen, lässt sich so ein schneller Einblick in die geplanten Strukturen gewinnen.

Im Rahmen zweier umfangreicher Industrieprojekte wurde 2007 und 2008 die Verknüpfung der Disziplinen der Digitalen Fabrik an konkreten Planungsaufgaben umgesetzt. Wie in Abbildung 5 dargestellt, wurde durch den Einsatz der Layoutplanung, Visualisierung und Simulation zunächst ein Konzept zur Qualifizierung, Investitionsentscheidung und Betrieb einer überschaubaren mechanischen Fertigung untersucht und unterstützt. Im Rahmen des zweiten Projektes wurden die Verfahren auf einen 800 Maschinen umfassenden Betrieb ausgeweitet und die Skalierbarkeit nachgewiesen.

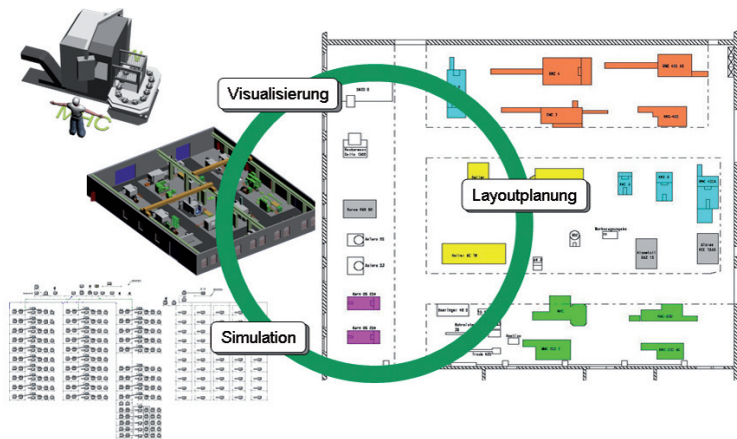


Abbildung 5: Simulation, Optimierung und Visualisierung von Produktionssystemen und Fabrikanlagen

### Modulares Simulationskonzept

Die Forderung nach der Skalierbarkeit des Simulationsmodells sowohl hinsichtlich betrachteter Anzahl der Arbeitsplätze, eingesetztem Personal, als auch insbesondere den zur Verfügung stehenden Datengrundlagen macht den Einsatz eines modularen Konzeptes unumgänglich.

Die Handhabbarkeit der Modellgrößen bei bis zu 800 Maschinen bereitet entsprechende Schwierigkeiten, deren Lösung zumeist über Hierarchisierung und Teilmodellbildung erreicht wird. Die Ansätze hierarchischer Simulationsmodelle wurden unter anderem bereits für die Automobil- und Elektroindustrie auf variantenreiche Serienproduktionen in stark verketteten

Anlagen angewendet [3, 4, 5]. Eine Berücksichtigung von Belangen der Auftragssteuerung und Personalplanung waren bisher für komplexe Werkstattfertigungen jedoch nicht möglich. Hierbei spielten die zumeist unscharfe Datenlage und die deutlichen Unterschiede in den Datenstrukturen einzelner zu betrachtender Betriebe eine entscheidende Rolle.

Zur Abbildung der Ressourcen wird der Ablaufsimulator SIMPRO der Firma SDZ [11] aus Dortmund eingesetzt. Die Aufbereitung und Bereitstellung der für die Betrachtung notwendigen Daten erfolgt über eine MS-SQL-Datenbank. Zur Auswertung der Simulationsergebnisse werden die Simulationsprotokoll-daten ebenfalls in die Datenbank übertragen und mit entsprechenden Programmmodulen analysiert. Das Grundkonzept und die zunächst berücksichtigten Datenquellen zeigt Abbildung 6 im Überblick.

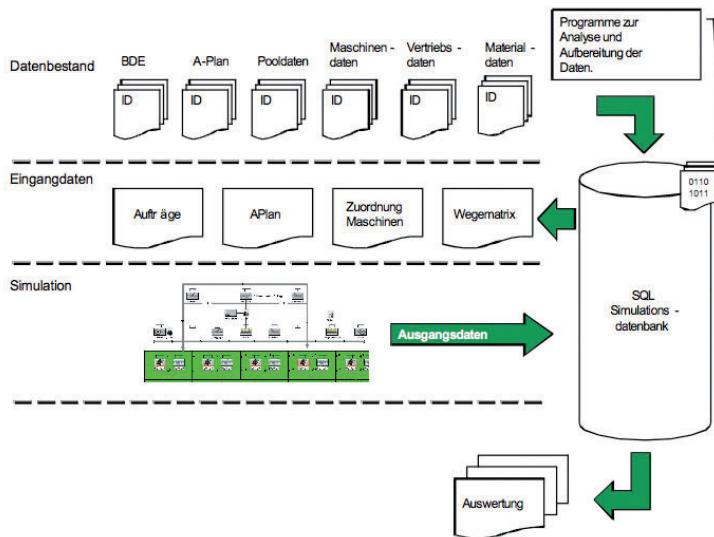


Abbildung 6: Konzept und Datenquellen zur Simulation komplexer Werkstattfertigungen

Das Simulationsgrundmodell ist so gestaltet, dass bis zu 800 Maschinen flexibel hinzuschaltbar sind. Um die Möglichkeiten der werkstattorientierten Fertigung hinreichend abbilden zu können, werden für jede Maschine die Tätigkeiten „Rüsten mit-“ und „-ohne Werker“ sowie „Arbeiten mit-“ und „-ohne Werker“ abgebildet; dies erfordert pro Arbeitsplatz 11 Simula-

tionsbausteine (insgesamt 17.000 Stück). Nur dank einer angepassten Hierarchisierung und eines automatischen Aufbaus der Modelle konnte die bestehende Bausteingrenze des Simulators deutlich erweitert werden. Die einzelnen Arbeitsplätze befinden sich jeweils in eigenen Untermodellen und werden von der zentralen Simulationssteuerung bedarfsorientiert angesprochen (Abbildung 7).

Es werden in den Datenbeständen der Unternehmen gezielt die benötigten Informationsquellen bestimmt und auf Konsistenz geprüft. Unter anderem sind die durch Betriebsdatenerfassungssysteme ermittelten Daten für die vergangenen Geschäftsjahre, Arbeitspläne, Maschinendaten, Vertriebsdaten und Variantenpläne zu berücksichtigen. Das verfolgte Konzept zur Datenaufbereitung und Auswertung ist in Abbildung 8 schematisch dargestellt.

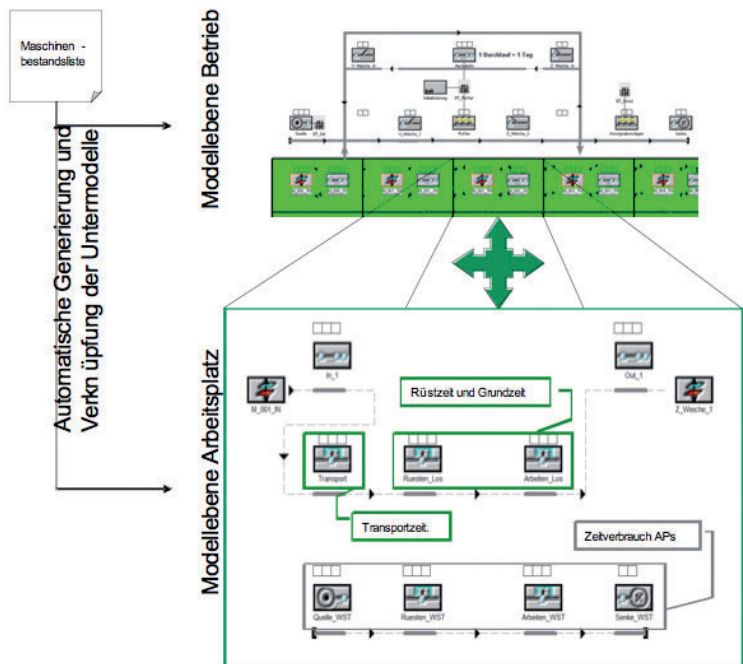


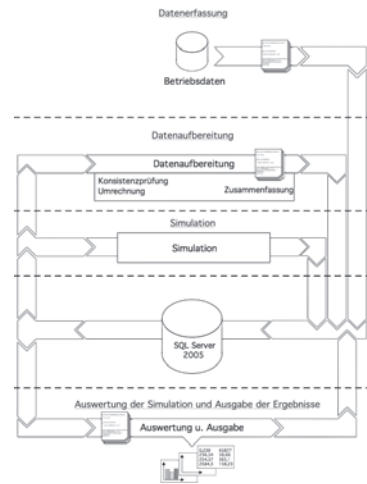
Abbildung 7: Automatisch aufbauendes hierarchisches Simulationsmodell



Um eine schnelle Anpassung des Modells an unterschiedliche Projektpartner, also auch unterschiedliche Eingangsdatenformate zu ermöglichen, wurden nicht nur das Modell, sondern auch weite Teile der Parametrierung modularisiert. Die Bereitstellung der Parametrierung erfolgt somit konsequenterweise ebenfalls über die SQL-Datenbankumgebung. Dies ermöglicht es, das Simulationsmodell selbst so flexibel zu halten, das mit unterschiedlichen Abstraktionsstufen und Informationsqualitäten gearbeitet werden kann, ohne grundlegende Änderungen der Bausteinverknüpfungen oder Parametrierungen vornehmen zu müssen. So werden beispielsweise der Maschinenaufstellungsplan und damit die Transportwege über eine zentrale Wegematrix – aus einem 2D Layout und den Arbeitsplänen abgeleitet – dargestellt. Ist eine Layoutänderung hinsichtlich des Einflusses auf die Fertigung zu beurteilen, z. B. im Rahmen einer Mehrmaschinenbedienung, so kann dies durch Anpassen der Wegematrix schnell realisiert werden. Auch die anderen wesentlichen Teile der Parametrierung, z. B. Maschinenzuordnung zu Werkern und deren Verfügbarkeit, können zentral angepasst werden. Die Verlagerung dieser Informationen in die SQL-Datenbank ermöglicht es, umfassend die unterschiedlichen Datenlandschaften der Betriebe zu berücksichtigen und mit vertretbarem Mehraufwand auch eine Kopplung zu bestehenden Leitständen oder ERP Systemen herzustellen.

Die Abarbeitung der Fertigungsaufträge erfolgt im Rahmen der Simulation analog zur Realität nach den geprüften und mit der BDE abgeglichenen Arbeitsplänen im Zusammenspiel mit den vorgegebenen Strategien für Priorisierungen, alternativen Wegen und der Ressourcenverfügbarkeit entlang der Prozessketten. Die notwendigen Informationen zur Bearbeitung, sowohl Zeiten als auch Prozessschritte und benötigte Ressourcen, werden den Objekten, die Aufträge repräsentieren, mitgegeben bzw. aus Tabellen bedarfsorientiert abgerufen. Um die Auswirkungen der verfügbaren Mitarbeiter auf die Termintreue auch bei der hohen Modellkomplexität beurteilen zu können, mussten zur Modellierung von z. B. Schicht- bzw. Urlaubsplänen eigene Steuerungen und Abbildungsverfahren entwickelt werden.

Abbildung 8: Informationsflussdiagramm zur datenbankbasierten Simulation



Die Gestaltung der zentralen Steuerung und die Anbindung über die SQL-Datenbank erlaubt es darüber hinaus, Strategien wie zum Beispiel Pullprinzip und CONstant Work in Process (CONWIP), mit vertretbarem Aufwand zu realisieren.

Die Validierung der Simulationsmodelle erfolgte anhand der Historie. Dabei wurden die Auftragsdaten mit den Ressourcen und Strategien der vergangenen Jahre nachgefahren und die Systemantwort anhand der Aufzeichnungen ausgewertet. Die Übereinstimmung mit der Realität konnte mit hinreichender Genauigkeit erzielt werden, sodass ein zukünftiges Instrumentarium zur Absicherung und Optimierung der Fertigungssteuerung von variantenreichen Auftragsumfängen zur Verfügung steht.

### **Simulationsstudien**

Untersuchungsgegenstände waren im Wesentlichen Maschinenauslastungen und Durchlaufzeiten für einzelne Fertigungsaufträge. Bei den Betrachtungen unter Einbeziehung des Faktors Mensch wurden auch die Auslastungen der Mitarbeiter gezielt ausgewertet. Der Simulationszeitraum erstreckte sich über einen Zeitraum von vier Jahren auf Basis der historischen sowie aktuellen Betriebs- und Szenariodaten. Der wesentliche Fokus lag auf der Unterstützung der Fertigungssteuerung und dort insbesondere auf dem Bereich der Absicherung der Terminplanungen gegenüber den Kunden. Gerade um Aussagen zur Termintreue zu treffen, sind Durchlaufzeitdiagramme für jeden einzelnen Fertigungsauftrag automatisch generierbar und können bei Bedarf zur Auswertung herangezogen werden.

### **Zusammenfassung und Ausblick**

Mit dem am IMAB entwickelten Konzept zur modularisierten hierarchischen datenbankbasierten Simulation komplexer Werkstattfertigungen konnten an Hand zweier Industrieprojekte die Nutzenpotentiale nachgewiesen werden. Die weitgehende Verlagerung der Parametrierung in die Datenbank und der automatische Aufbau der Modelle führt zu einer deutlichen Verbesserung der Einsatzmöglichkeiten der Ablaufsimulation zur Planung und Steuerung nicht starr verketteter Systeme. So sind z. B. Betrachtungen unterschiedlicher Steuerungsstrategien auf Wochenbasis innerhalb weniger Minuten – in Abhängigkeit

von der gewählten Vorlaufzeit – möglich. Zur Unterstützung von strategischen Entscheidungen mit einem Zeithorizont von einem Jahr und mehr sind aber im Schnitt noch 12 Stunden für Simulationslauf und Ergebnisdarstellung notwendig. Sowohl für die wöchentlichen als auch für die jährlichen Betrachtungen konnten durch Verwendung der Datenbanklösung die Experimentverwaltung und insbesondere die Parallelisierung der Simulationsläufe deutlich verbessert werden.

Im Rahmen der Weiterentwicklung ist es ein Ziel, die Online-Verknüpfung zu den ERP & MES Systemen exemplarisch in Projekten herzustellen und so die Fertigungssteuerung noch besser in ihrer täglichen Entscheidungsfindung zu unterstützen. In diesem Zusammenhang ist es ebenfalls unbedingt wichtig, die benötigten Laufzeiten der Simulationen für Kurzzeitbetrachtungen im operativen sowie im strategischen Bereich deutlich zu senken. Zur Lösung dieser Fragestellungen sollen die Möglichkeiten der Clusterbildung bzw. Virtualisierung untersucht werden.

## Literatur

- [1] U. Bracht, Ch. Schlange, C. Eckert, Th. Masurat: Datenmanagement für die Digitale Fabrik., wt-online, 04/2005.
- [2] U. Bracht, A. Spillner, J. Reichert: Stufenweise Einführung von 3D-CAD-basierter Fabrikplanung im Rahmen der Digitalen Fabrik, S. 16 ff, ZWF 103 (2008) 1-2.
- [3] U. Bracht, M. Hagmann: „Die ganze Fabrik im Simulationsmodell“, S. 345 – 348, ZWF (1998) 7/8.
- [4] A. Ostermann: Neue Ansätze zur gesamtheitlichen Fabrik-simulation - Modellkonzept und wissensbasierte Abstraktion –, Dissertation am IMAB der TU Clausthal, Band 5 der Reihe: Innovationen der Fabrikplanung und -organisation, Shaker Verlag, Aachen 2001.
- [5] J. Bayer, T. Collisi, S. Wenzel: Simulation in der Automobil-industrie, VDI Springer 2002.
- [6] A. Kuhn, S. Turgut, M. Toth: Effektiver Einsatz Elektronischer Kataloge in der Anlagenplanung, S. 71 ff, ZWF 103 (2008) 1-2.
- [7] U. Bracht, C. Eckert: 2.1 Neue Konzepte für Virtual Reality in der Fabrik- und Anlagenplanung, S.52 ff Simulations-wissenschaftliches Zentrum der Technischen Universität

- Clausthal, Bericht 2005-2006.
- [8] C. Eckert: Weiterentwicklung und Nutzung von VR-gestützten Fabrik-planungswerkzeugen für KMU, Dissertation am IMAB der TU Clausthal, Band 16 der Reihe: Innovationen der Fabrikplanung und –organisation, Shaker Verlag, Aachen 2006.
  - [9] VDI – Richtlinie 4499: Blatt 1 „Digitale Fabrik, Grundlagen“, Beuth Verlag 2007.
  - [10] M. Fahlbusch: Einführung und erste Einsätze von Virtual Reality-Systemen in der Fabrikplanung, Dissertation am IMAB der TU Clausthal, Band 4 der Reihe: Innovationen der Fabrikplanung und –organisation, Shaker Verlag, Aachen 2001.
  - [11] <http://www.sdz.de/simpro.0.html> Stand 01.08.2008.

## **2.2 Analyse und Optimierung komplexer Inbound-Callcenter-Systeme mittels ereignisorientierter stochastischer Simulation**

*Alexander Herzog, Thomas  
Hanschke;  
Institut für Mathematik*

Nahezu alle größeren Unternehmen wickeln ihre Kundenkontakte über sogenannte Callcenter ab. Dabei wird zwischen Inhouse-Callcentern, die unmittelbar in das Unternehmen integriert sind, und ausgelagerten Callcentern, die von einem Subanbieter betrieben werden, unterschieden. Außerdem wird zwischen Inbound-Callcenter, die auf eingehende Anfragen warten, und Outbound-Callcenter, die von sich aus Anrufe tätigen, unterschieden. Im Folgenden werden nur Inbound-Callcenter betrachtet. Da bei Unternehmen mit einem hohen Aufkommen an Kundenanfragen (z. B. Versandhäuser und Telekommunikationsunternehmen) täglich zwischen 20.000 und 50.000 Anrufe eingehen, wird häufig auf eine Kombination mehrerer Subanbieter zur Abwicklung der eingehenden Anrufe, E-Mails und Briefe gesetzt. Bei derartig zusammengesetzten Callcentern spricht man auch von virtuellen Callcentern. Werden neben eingehenden Anrufen in dem Callcenter noch E-Mails, Briefe und Faxe bearbeitet, so spricht man von einem Contact-Center. Contact-Center haben den Vorteil, dass die Mitarbeiter auch bei schlecht vorhersagbarem Anrufeingang gleichmäßig ausgelastet werden können.

Da lange Wartezeiten bzw. aufgebende Kunden einen Image-schaden bzw. sogar einen realen Schaden (z. B. bei Bestellhotlines) darstellen, ist es aus Sicht des Unternehmens wünschenswert, dass alle Kunden möglichst schnell bedient werden. Um auch zu Spitzenlast-Zeiten eine reibungslose Abwicklung der Gespräche zu gewährleisten, wird jedoch eine große Anzahl an Agenten in den Callcentern benötigt, d. h. es entstehen hohe Lohnkosten. Über welche Finanzierungskonzepte sich erreichen lässt, dass der Betreiber eines ausgelagerten Callcenters (der häufig pro Anruf bezahlt wird und für den sich folglich kein unmittelbarer finanzieller Vorteil aus einer kurzen Warteschlange ergibt), dennoch hinreichend viele Agenten einsetzt, um die Serviceziele des Unternehmens einzuhalten, wurde u.a. in [1] und [2] untersucht. Eine wesentliche Anreiz-Maßnahme stellt dabei eine Beteiligung an den Betriebskosten der Subanbieter dar. Auf diese Art entstehen dem Subanbieter pro zusätzlich eingestelltem Agenten weniger Kosten und bei einer Bezahlung pro erfolgreich bedientem Kunden ergeben sich so höhere Gewinne für ihn, sodass er eher gewillt sein wird, zusätzliche Agenten einzustellen, damit weniger Kunden das Warten vorzeitig aufgeben und somit mehr Kunden erfolgreich bedient werden können. Anreizsysteme auf Basis von Strafgeldern für Kundenwartezeiten und Warteabbrüche funktionieren hingegen nur, wenn alle Anrufe an ein Callcenter geleitet werden bzw. die Kunden von vornherein einem bestimmten Callcenter zugeordnet werden können.

Ziel der weiteren im Rahmen dieses Projekts vorgenommenen Untersuchungen war es, zu einer vorgegebenen Anzahl an Anrufern und an Agenten die Leistungsgrößen eines Callcenter-Verbundes bestimmen zu können, um somit die Erreichbarkeit und die Wartezeiten der Kunden gegen die entstehenden Kosten abwägen zu können. Als besondere Schwierigkeit erweisen sich dabei Rückkopplungseffekte zwischen einer hohen Systemlast und ungeduldigen Kunden, die das Warten aufgeben, und später durch einen weiteren Anruf die Last noch weiter erhöhen, Abhängigkeiten zwischen verschiedenen Kundengruppen in Bezug auf die Agenten, die sie bedienen können, sowie schnelle zeitliche Änderungen der Anruflast über den Tag.

## Stand der Forschung

Bereits aus den klassischen Erlang-C-Modellen (siehe [3]) geht hervor, dass die mittlere Wartezeit der Kunden bei hoher Auslastung (ohne die Berücksichtigung von Warteabbrechern und Wiederanrufern) überproportional ansteigt. Der Grund für dieses Verhalten liegt darin, dass die Zeit, in der sich keine Kunden im System befinden, von den Bedienern nicht genutzt werden kann und somit verloren geht, wodurch die praktisch nutzbare Bedienzeit geringer als die gesamte Arbeitszeit der Agenten ausfällt. Damit wird bei einer Auslastung nahe 100% evtl. mehr Bedienleistung nachgefragt, als praktisch nutzbare Bedienzeit zur Verfügung steht. Folglich ist eine 100%ige Auslastung der Agenten in den meisten Fällen als Planungsziel nicht anzustreben und es muss vielmehr von vornherein ein gewisses Maß an Überkapazitäten eingeplant werden.

Im Gegensatz zu den aus der Produktionsplanung stammenden klassischen Fragestellungen der Warteschlangentheorie handelt es sich bei einem Callcenter um ein Warteschlangensystem mit Rückkopplungen. Während sich bei einem Produktionsprozess Werkstücke auf einem Fließband bewegen und ggf. dort vor einzelnen Maschinen warten müssen, verlassen Kunden das System, wenn ihnen die Wartezeit zu lang wird, und starten später evtl. einen neuen Anruf. Während also bei Produktionsprozessen ein unmittelbarer Zusammenhang zwischen der Bedienrate der Maschinen und der Anzahl der wartenden Werkstücke besteht, ist dieser Effekt bedingt durch die Ungeduld der Kunden in einem Callcenter nicht sofort ersichtlich: Berücksichtigt man bei der Modellierung zwar Warteabbrecher aber keine Wiederanrufer, so bleiben die Warteschlangen selbst bei einer Überlastung des Systems verhältnismäßig kurz, da mit steigender Warteschlangenlänge auch immer mehr Kunden das Warten vorzeitig aufgeben und somit das Wachstum der Warteschlange gebremst wird. Berücksichtigt man jedoch, dass Warteabbrecher später einen weiteren Anruf tätigen, so erhöht sich gerade bei hoher Last die Anzahl der Anrufe weiter. Das System reagiert damit ab einer bestimmten Auslastung sehr sensitiv auf eine Erhöhung der Erstanruferanzahl. Im Rahmen von [4] wurde ein analytisches Verfahren zur Berechnung der Kenngrößen von Warteschlangenmodellen mit Abbrechern und Wiederholern entwickelt. Die wesentliche

Neuerung gegenüber den bekannten Verfahren besteht dabei in der Modellierung eines Pools von Wiederanrufern, in den sich ungeduldige Kunden begeben, bevor sie einen neuen Anruf tätigen. In den klassischen Modellen verlassen Warteabbrecher hingegen das System, sodass keine Wiederanrufer entstehen können. Mit Hilfe dieses erweiterten Modells lassen sich einige der in der Praxis relevanten Fragestellungen untersuchen.

In einem realen Callcenter-Verbund besteht jedoch noch eine Vielzahl weiterer Abhängigkeiten, die mit den analytischen Modellen nicht abgebildet werden können, so können z. B. meist nicht alle Agenten alle Gesprächsthemen bedienen, sodass ein wartender Kunde nicht zu jedem beliebigen Agenten geleitet werden kann. Man spricht hier von sogenannten Single-Skill-Agenten, die nur Kunden eines bestimmten Typs bedienen können, und Multi-Skill-Agenten, die mehrere oder sogar alle

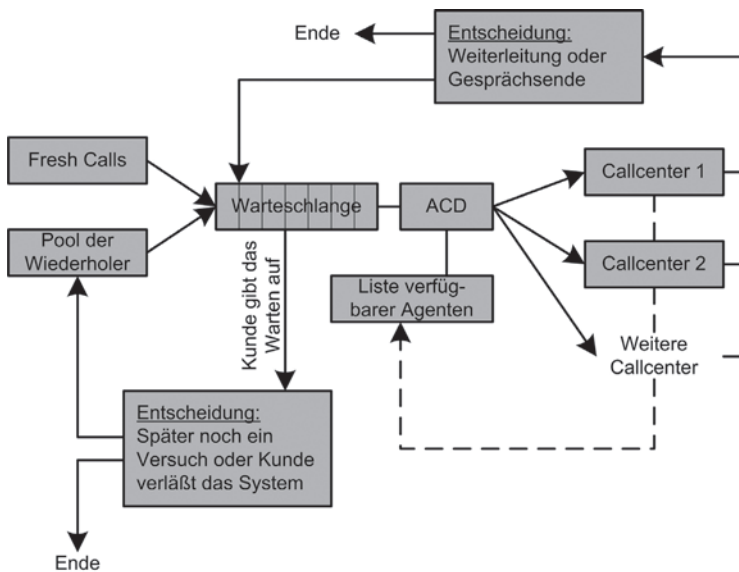


Abbildung 1: Ablauforganisation eines Callcenters

Kundentypen bedienen können. Kunden werden außerdem mit einer gewissen Wahrscheinlichkeit nach dem Gespräch zu einem weiteren Agenten geleitet, um weitere Fragen zu klären, die der erste Agent nicht beantworten konnte (z. B. bei gemischten technischen und kaufmännischen Fragestellungen). Häufig werden auch verschiedene Kundengruppen mit ver-

schiedenen Prioritäten bedient, um z. B. für verschiedene Kundengruppen verschiedene zu unterschreitende mittlere Wartezeiten einzuhalten. Auch können die Kosten pro geführtem Gespräch, die dem Unternehmen entstehen, zwischen den verschiedenen Callcentern variieren. Das Unternehmen wird dann versuchen, das günstigste Callcenter stets maximal auszulasten und die teureren Callcenter nur für die Lastspitzen einzusetzen. Daher werden die eher günstigen Callcenter auch häufig als Last-Callcenter bezeichnet, während die eher teuren Callcenter Peak-Callcenter genannt werden. Meist ergeben sich die geringeren Preise in den Last-Callcentern durch langfristige Verträge zwischen Outsourcer und Callcenter, sodass der Callcenter-Betreiber seinen Personalbedarf besser planen kann. Darüber hinaus ändern sich sowohl die Ankunftsrate der Kunden als auch die Anzahl der verfügbaren Agenten über den Tag gesehen mehrfach. Bei den meisten Inbound-Callcentern sind jeweils eine Vormittags- und eine Nachmittags-Lastspitze mit einem mehr oder weniger stark ausgeprägten Anrufrückgang in der Mittagszeit zu verzeichnen. Bei den Callcentern werden die Planungsmöglichkeiten in Bezug auf die Anzahl an eingesetzten Agenten hingegen durch Schichtplanungsvorgaben begrenzt. Damit existieren meist sowohl Bereiche, in denen eine Agentenunterdeckung vorliegt, als auch Bereiche, in denen eine Agentenüberdeckung vorliegt. Diese Vielzahl an Eigenschaften lässt sich nicht mehr durch ein geschlossenes analytisches Modell abbilden, sodass im Rahmen dieses Projekts ein ereignisorientierter stochastischer Simulator entwickelt wurde.

### **Ereignisorientierte stochastische Simulation**

Mit Hilfe eines ereignisorientierten stochastischen Simulators lassen sich komplexe warteschlangentheoretische Zusammenhänge modellieren und analysieren. Dafür wird ein Satz von Regeln definiert. Für jede Regel wird festgelegt, welche Ereignisse sie auslösen kann und welche Auswirkungen sie hat. Entsprechende Regeln (wie z. B. „Kunde trifft ein“, „Bedienung gestartet“, „Bedienung abgeschlossen“, „Kunde gibt das Warten auf“, „Kunde wird weitergeleitet“ usw.) wurden für ein komplettes Callcenter-System bestehend aus einem Verteiler mit einer gemeinsamen Warteschlange und mehreren einzelnen Callcenter-Betreibern festgelegt. Außerdem wurden konfigurierbare Regeln zur Zuweisung der Kunden zu den



Agenten implementiert, um sowohl bestimmte Kundengruppen auf verschiedene Weisen priorisieren zu können als auch bestimmte, günstigere Callcenter bevorzugt mit Anrufen versorgen zu können.

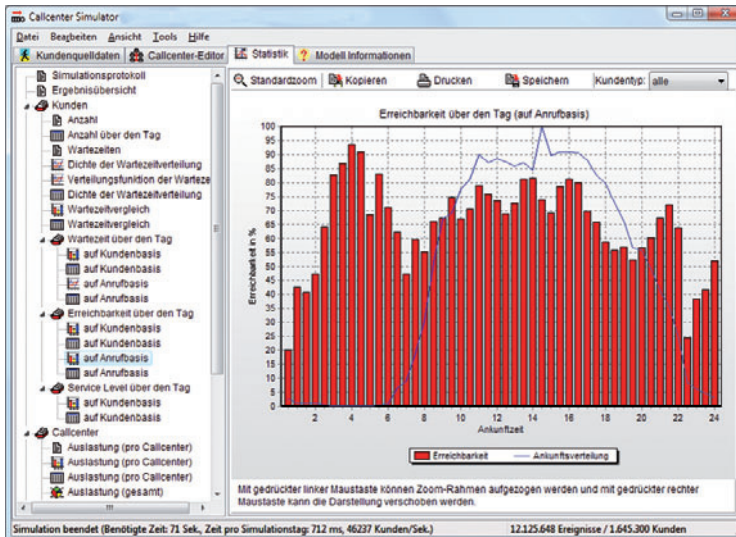


Abbildung 2: Ergebnisansicht des Simulators

Mit Hilfe dieses Simulationssystemes konnten erfolgreich Modelle mit mehr als 500 Agenten und über 35.000 Erstanrufern pro Tag simuliert werden. Als Vergleichsdaten konnte für das Projekt auf reale Anrufer- und Agentendaten der Arcor AG zurückgegriffen werden. Vergleiche mit denen im realen System aufgezeichneten historischen Kenngrößen für Wartezeiten und Erreichbarkeiten zeigen, dass Simulation und Wirklichkeit sehr gut übereinstimmen, d. h. dass der Simulator alle relevanten Daten des tatsächlichen Callcenter-Verbundes gesignet abbildet.

Zusätzlich zu dem Simulationskern wurden Werkzeuge entwickelt, um aus den historischen Rohdaten Kundenankunftsströme zu erzeugen und um aus den jeweils verfügbaren Anzahlen an Agenten auf die Schichtplanung der Agenten rückzuschließen. Damit konnten erfolgreich Untersuchungen zur Anzahl an benötigten Agenten sowie zur idealen Verteilung von Single- und Multi-Skill-Agenten und zur Verteilung der Agenten zwischen verschiedenen Callcentern (mit verschiedenen Preisen) durchgeführt werden.

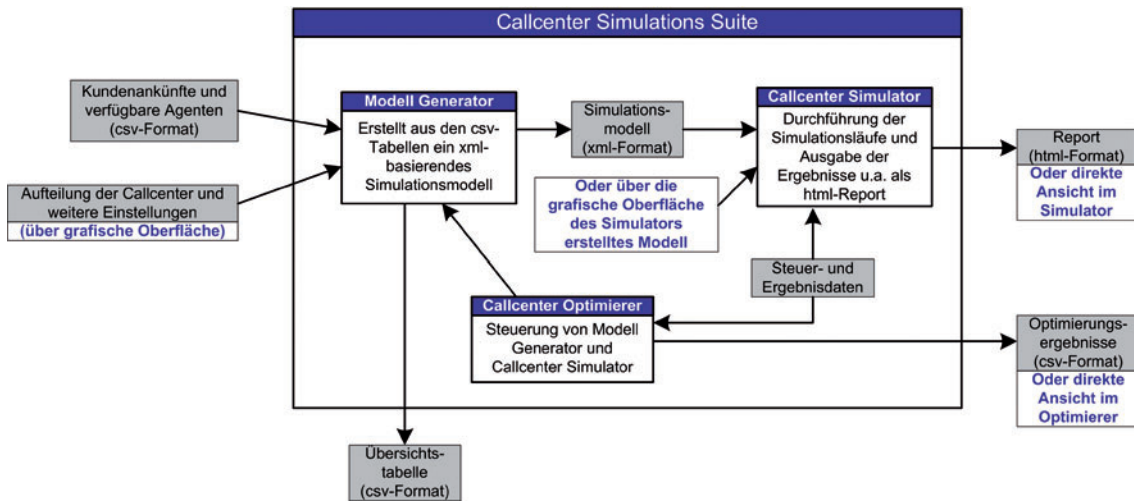


Abbildung 3: Komponenten des Callcenter-Simulators

## Forschungsaufgaben

Mit Hilfe des vorliegenden Simulationssystems kann eine Vielzahl an Fragestellungen untersucht werden. Für viele Probleme gibt es bisher nur erfahrungsbasierte Heuristiken. Mit Hilfe von ereignisorientierter stochastischer Simulation lassen sich die Auswirkungen von Änderungen nun unmittelbar untersuchen, ohne dafür das reale System modifizieren zu müssen.

So gilt z. B. bisher die Aussage, dass der optimale Anteil an Multi-Skill-Agenten umso kleiner sein sollte, je größer das Callcenter ist (siehe [3]). Da Multi-Skill-Agenten meist langsamer arbeiten und zugleich höhere Lohnkosten aufweisen als Single-Skill-Agenten, aber auf der anderen Seite das Risiko von Weiterleitungen verringern, lässt sich der tatsächlich optimale Anteil an Multi-Skill-Agenten nur per Simulation ermitteln.

Gleiches gilt für die optimalen Routing-Strategien: Ob ein neu eintreffender Kunde bevorzugt zu einem Single-Skill- oder einem Multi-Skill-Agenten geroutet wird, beeinflusst sowohl die Anzahl an Weiterleitungen als auch die Wahrscheinlichkeit, dass neueintreffende Kunden (aufgrund unpassender Skills der verbleibenden freien Single-Skill-Agenten) warten müssen. Da

die optimale Routing-Strategie stark von den Parametern der Kunden und Agenten abhängig ist, gibt es hierzu kaum allgemein nutzbare Aussagen.

Bei der Priorisierung bestimmter Kundengruppen wird meist auf sogenannte Score-Werte zurückgegriffen. In den Score-Wert können Kundentyp, bisherige Wartezeit, Anruferherkunft (Handy, Festnetz) usw. einbezogen werden. Als nächstes bedient wird jeweils der Kunde mit dem höchsten Score-Wert. Eine scorebasierende Bedienung hat den Vorteil, dass niedrig priorisierte Kunden auch bei hoher Last nicht gänzlich vom Service abgeschnitten werden. Mit welchen Faktoren jedoch die einzelnen Parameter in die Berechnung der Score-Werte einfließen müssen, um bestimmte Qualitätsstandards für bestimmte Kundentypen zu gewährleisten, lässt sich nur per Simulation bestimmen.

## **Beteiligte Partner**

Das Projekt wurde zusammen mit der Arcor AG durchgeführt. Die Modellierung und Entwicklung des Simulators erfolgten dabei an der TU Clausthal. Die Arcor AG stellte historische Daten ihrer realen Callcenter zur Verfügung und ermöglichte so die Kalibrierung des Simulationssystems. Außerdem erfolgte die Validierung der Simulationsergebnisse in Zusammenarbeit mit Arcor. Arcor nutzt den Simulator zurzeit zur Bewertung verschiedener Zuweisungsstrategien von Kunden zu verschiedenen Callcenter-Betreibern.

## **Literatur**

- [1] Z. J. Ren und Y.-P. Zhou: Call Center Outsourcing: Coordination Staffing Level and Service Quality, Working paper, Boston University School of Management/University of Washington Business School, 2005.
- [2] C. Grotjohann: Outsourcing-Strategien bei Call Centern, Diplomarbeit, TU Clausthal, 2007.
- [3] S. Helber und R. Stolletz: Call Center Management in der Praxis - Strukturen und Prozesse betriebswirtschaftlich optimieren, Springer-Verlag, Berlin, 2004.
- [4] A. Herzog: Warteschlangensysteme mit ungeduldgigen Kunden und Wiederholern, Dissertation, TU Clausthal, 2008.

## 2.3 Pünktlichkeitsprognosen von Flugplänen mittels Simulation

Alexander Herzog, Thomas Hanschke;  
Institut für Mathematik

Der weltweite Flugverkehr nimmt beständig zu. Bereits heute arbeiten die großen Flughäfen an ihren Kapazitätsgrenzen. Auch der verfügbare Platz auf den Luftverkehrswegen nimmt durch den ansteigenden Verkehr ständig ab, sodass bereits heute beträchtliche Verzögerungen während der Flüge entstehen. Unter diesen Bedingungen wird es immer schwieriger, einen wirtschaftlichen Flugplan, d. h. einen Flugplan mit einer möglichst hohen Produktivität der Flugzeuge, aufzustellen, in dem sich die auftretenden Verspätungen dennoch unter möglichst allen äußeren Einflüssen in Grenzen halten.



Abbildung 1: Bedingt durch Wirbelschleppen müssen größere Abstände eingehalten werden, die die mögliche Anzahl von Starts und Landungen reduzieren.

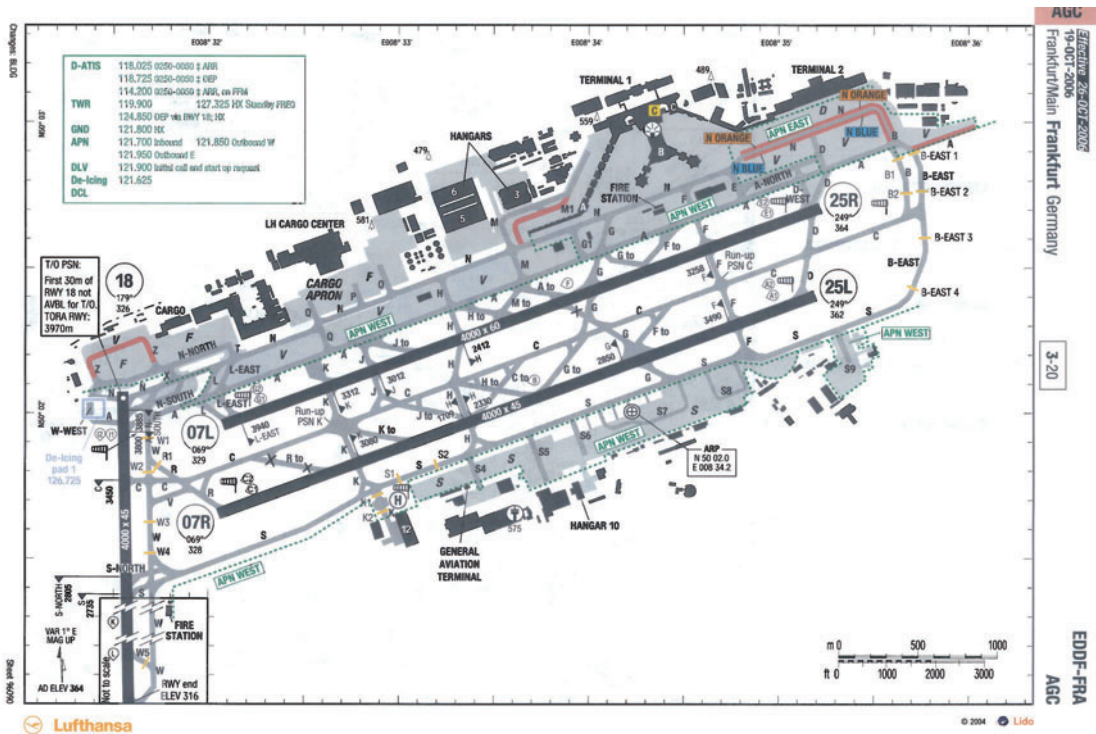
Die Flotten großer Fluggesellschaften wie der Lufthansa AG umfassen teilweise über 500 Flugzeuge, die jeweils täglich bis zu 7 Flüge absolvieren. Die Flugplan- und Netzwerk-Optimierung einer großen Fluggesellschaft mit vielen Umsteigeverbindungen stellt daher ein komplexes Problem mit vielen stochastischen Größen dar. Die Flugzeiten hängen von den Witterungsbedingungen auf der Flugstrecke ab, die jeweils gewählten Start- und Landebahnen werden u. a. durch die Windrichtung bestimmt und Verzögerungen während Start und Landung hängen von der Last auf den Flughäfen ab. Darüber hinaus sind die Flüge noch durch umsteigende Passagiere und Crews miteinander verbunden.

## Stand der Forschung

Da zur Bewertung der erwarteten Pünktlichkeit eines neuen Flugplanes bzw. zur Identifizierung der Flüge, die bedingt durch ihre Vernetzungen (umsteigende Passagiere und Crews) viele Verspätungen nach sich ziehen, eine Vielzahl an Eigenschaften und Verknüpfungen berücksichtigt werden müssen, gibt es bisher nur wenige praktische Ergebnisse auf diesem Gebiet. Dazu kommt noch, dass sich die meisten bisherigen Aussagen jeweils nur auf einige wenige Teilaspekte des gesamten Netzwerkes beziehen.

Mit dem in Zusammenarbeit mit der Deutschen Lufthansa AG entwickelten SimOps Simulator wurde erstmals versucht, ein integriertes Simulationssystem zu erstellen, welches alle für die Bewertung eines Flugplanes notwendigen Eigenschaften abbildet. Als Basis bildet der Simulator alle Flughäfen und Flüge eines Flugplanes ab. Die Flugzeiten der einzelnen Flüge werden dabei über Wahrscheinlichkeitsverteilungen modelliert.

Abbildung 2: Start- und Landebahnen des Frankfurter Flughafens



Aufgrund der Tatsache, dass Verspätungen nicht unabhängig voneinander entstehen, sondern, wenn schlechtes Wetter an einem Flughafen herrscht, alle Flüge an diesem Flughafen mit einer erhöhten Wahrscheinlichkeit Verspätungen aufweisen werden, werden die Flugzeitverteilungen für verschiedene Tagestypen hinterlegt. Die Wahrscheinlichkeiten, mit denen die verschiedenen Tagestypen auftreten, werden dabei aus historischen Aufzeichnungen gewonnen. Die entstehenden Bodenzeiten und damit die möglicherweise entstehenden Verspätungen bei einer Überschreitung der geplanten Bodenzeit bzw. das Potential, bestehende Verspätungen wieder zu kompensieren, hängen neben der Zeit für den reinen Bodenprozess (Cleaning, Catering, Fueling, Boarding) auch von den Roll- und Wartezeiten ab. Daher werden die Flughäfen, auf denen viele Flugbewegungen stattfinden, vollständig inklusive der verschiedenen Rollbahnen und aller möglichen Parkpositionen simuliert. Welche Rollbahn in welcher Richtung verwendet wird, hängt von der vorherrschenden Windrichtung und dem jeweiligen Start- bzw. Zielflughafen ab. In Verbindung mit der gewählten Parkposition (die wiederum vom Flugzeugtyp abhängt) ergeben sich so maßgeblich verschiedene Rollzeiten.

Die Verknüpfung der Flüge untereinander erfolgt durch umsteigende Crews und Passagiere. Zu diesem Zweck wurden die historischen Crew-Einsatzpläne der Lufthansa ausgewertet. Außerdem wurden, basierend auf historischen Buchungsdaten etwa 30.000 Umsteigergruppen für einen Wochenflugplan erfasst. Mit Hilfe eines Regelsatzes, auf wie viele Passagiere jeweils wie lange gewartet werden soll, ergeben sich so Crew- und Passagier-bedingte Verzögerungen im Flugnetz. Durch diese Abhängigkeiten lassen sich die netzartigen Auswirkungen einzelner Verspätungen auf die folgenden Flüge untersuchen. Auch lässt sich an dieser Stelle bereits bewerten, welche Auswirkungen die Einführung von Zeitpuffern haben: Fügt man eine Pufferzeit zur Kompensation von Verspätungen bereits morgens in den Plan für eine Flugzeug-Rotation ein, so lässt sich damit eine in den Morgenstunden entstandene Verspätung sofort vollständig kompensieren, sodass sie keine nachteiligen Auswirkungen auf den Rest des Flugplanes hat. Allerdings lassen sich dann im weiteren Verlauf des Tages auftretende Verspätungen nicht mehr kompensieren. Fügt man die Pufferzeit hingegen zu einem späteren Zeitpunkt in den Flugplan ein, so

lassen sich damit die über einen längeren Zeitabschnitt aufsummierten Verspätungen kompensieren, allerdings erfolgen in diesem Fall auch zunächst erst eine Reihe von verspäteten Flügen.

Einen weiteren wesentlichen Einfluss auf die Pünktlichkeit der Flüge hat die Kapazität der Flughäfen und des Luftverkehrsnetzes. Ist ein Flughafen überlastet, so können Flugzeuge nicht mehr planmäßig starten und es entstehen Verspätungen. Genauso wird Flugzeugen der Start verweigert bzw. werden Flugzeuge aufgefordert, das Tempo zu reduzieren, wenn bestimmte Abschnitte des Luftverkehrsnetzes überlastet sind. Beide Eigenschaften werden in SimOps abgebildet. Zum einen können Regeln definiert werden, zu welchen Zeiten auf welchen Strecken jeweils eine hohe Last vorherrscht; der Start von Flugzeugen, die diese Strecken fliegen wollen, wird dann gemäß einer definierbaren Verteilung verzögert. Zum anderen kann auf jedem Flughafen jeder Rollbahn eine Kapazität zugeordnet werden. Je mehr Flugzeuge pro Stunde auf einer Rollbahn starten bzw. landen wollen, desto größer wird die dabei auftretende Verzögerung.

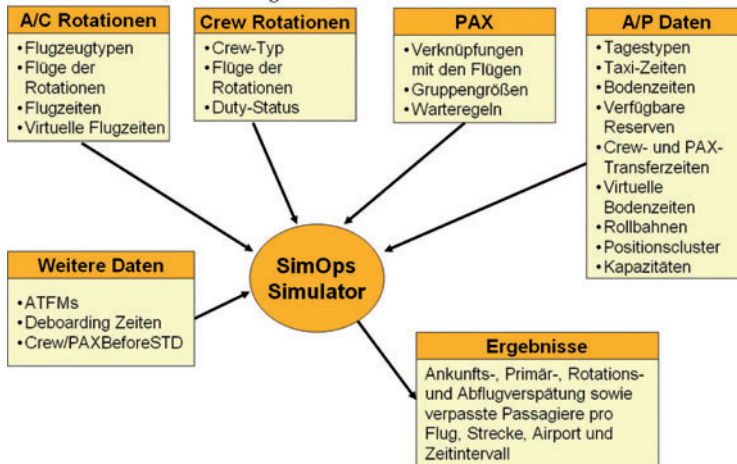


Abbildung 3: Komponenten von SimOps

Ein komplettes Szenario wird dabei durch eine XML-Datei beschrieben, die typischer Weise für einen Wochenflugplan der Kontinentalflotte der Lufthansa (bestehend aus etwa 300 Flugzeugen) etwa 16.000 Zeilen umfasst. Die Daten für ein solches Szenario stammen zum einen aus den Planungswerkzeugen,

die zur Erstellung neuer Flugpläne verwendet werden. Zum anderen werden historische Daten über Flugzeiten, Bodenzeiten, Umsteigergruppen, Tagestypen, Windrichtungen für die Landebahnzuweisungen usw. aus historischen Daten gewonnen.

## Implementierung



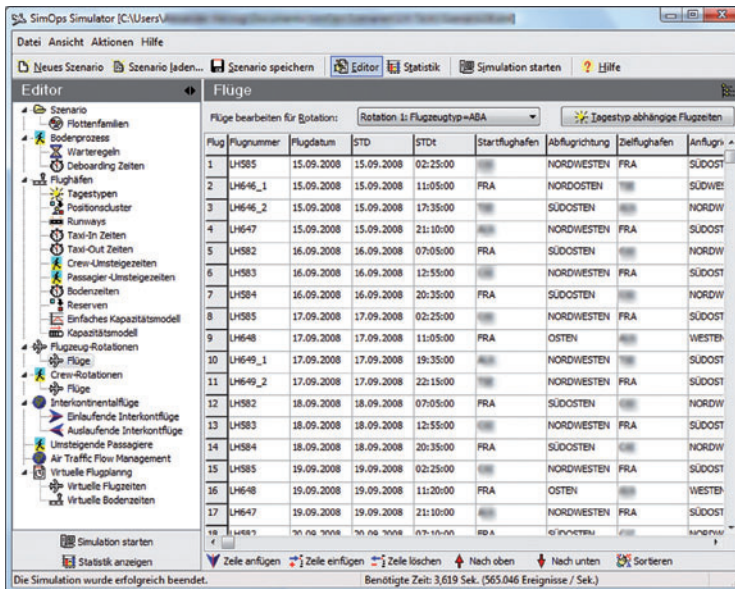
SimOps ist ein ereignisorientierter stochastischer Simulator. Auf Basis einer XML-Szenariodatei kann in SimOps ein vollständiger Flugplan simuliert werden. Dabei werden wie oben beschrieben alle für die Entstehung von Verspätungen relevanten Eigenschaften in Form von Ereignissen abgebildet. Durch die Verknüpfungen dieser Ereignisse untereinander lassen sich die Beziehungen der verschiedenen Einflussfaktoren untereinander abbilden. Während der Simulation werden durch SimOps alle relevanten Verspätungsinformationen (Ankunftsverspätung, Primärverspätung, Rotationsverspätung, Abflugverspätung und verpasste Anschlüsse) jeweils pro Flug, pro Flugstrecke, pro Flughafen und pro Halbstundenintervall erfasst. Auf diese Weise ist es möglich, Engpässe und deren Auswirkungen in einem Flugplan zu erkennen und Möglichkeiten zur Vermeidung dieser Probleme zu ermitteln. Tests mit realen Flugplänen der Lufthansa AG aus den Jahren 2007 und 2008 haben hierbei eine gute Übereinstimmung von Realität und Simulationsergebnissen ergeben.

## Forschungsaufgaben

Mit Hilfe von SimOps ist es möglich, bestehende Probleme zu identifizieren und mögliche Lösungen zu bewerten, ohne dafür den realen Flugplan ändern zu müssen. Als Lösungen für bestehende Pünktlichkeitsprobleme können geplante Block- und Bodenzeiten verlängert werden, Flüge aus den Lastspitzenzeiten, an denen starke Verzögerungen aufgrund zu geringer Rollbahnkapazitäten auftreten, in Nebenzeiten verlagert werden, andere Warteregeln verwendet werden und auch Veränderungen des Crew-Einsatzplanes und damit verbunden den notwendigen Crew-Umsteigevorgängen überprüft werden. In einem ersten Schritt könnte im Folgenden untersucht werden, unter welchen Bedingungen sich welche Maßnahmen als besonders geeignet erweisen. Die Wahl eines Lösungsansatzes zur Vermeidung von Pünktlichkeitsproblemen erfolgt bisher



außerdem manuell. Daher bestünde eine mögliche Weiterentwicklung des bisherigen Simulationssystems darin, Heuristiken zur automatischen Wahl von Änderungen an einem Flugplan zu entwickeln. SimOps befindet sich mittlerweile im Einsatz im Pünktlichkeitsmanagement bei der Lufthansa AG. In einem nächsten Schritt soll die Anbindung an die sonstige Lufthansa-Softwarelandschaft dahingehend erweitert werden, dass auch die Flugplanerstellung SimOps unmittelbar in ihren Prozessen einsetzen kann.



## Beteiligte Partner

Das Projekt wurde in Zusammenarbeit mit der Deutschen Lufthansa AG durchgeführt. Die Eigenschaften des Modells wurden dabei maßgeblich durch die Lufthansa festgelegt. Die Implementierung des Simulationssystems erfolgte durch die TU Clausthal. Im Anschluss daran wurde SimOps gemeinsam durch die Lufthansa und die TU Clausthal mit Hilfe von historischen Flugplänen und aufgezeichneten Pünktlichkeitsinformationen validiert und befindet sich mittlerweile im Regeleinsatz bei der Lufthansa zur kontinuierlichen Verbesserung und Anpassung der Flugpläne an neue Gegebenheiten.

## 2.4 Das Projekt REMATE: Aufbau einer Revenue-Management-Simulationsumgebung bei der Deutschen Lufthansa

*Tobias Schröder, Michael Frank;  
Deutsche Lufthansa AG;  
Thomas Hanschke;  
Institut für Mathematik*

Die Revenue Management-Systeme der Lufthansa Passage (LH) haben die Aufgabe, zum richtigen Zeitpunkt den richtigen Platz auf dem richtigen Flugzeug an den richtigen Passagier zum richtigen Preis zu verkaufen und damit eine ertragsoptimale Vergabe der Plätze auf den ca. 700.000 Flügen, die LH pro Jahr anbietet, zu ermöglichen.

Hierzu sind umfangreiche Prognose- und Optimierungssysteme verschiedener Hersteller im Einsatz, die auf komplexen Algorithmen beruhen:

- Ein Prognosesystem, das in sehr hohem Detaillierungsgrad die Nachfrage für bestimmte Produkte auf Basis von historischen Buchungsdaten voraussagt. Ein Produkt entspricht hierbei einer Buchungsklasse auf einem bestimmten Reiseweg für einen bestimmten Verkaufsursprung an einem bestimmten Tag. Das Prognosesystem sagt also z. B. voraus, wie viele Passagiere in der X-Klasse den Reiseweg von Berlin über Frankfurt nach New York am 14. Juni 2009 mit den Flügen LH123 und LH400 in den USA buchen. Jeden Tag werden mehrere Millionen dieser Prognosen aktualisiert.
- Ein Optimierer, der anhand der Passagierprognosen netzwerkoptimale Steuerungseinstellungen erzeugt. Die wesentlichen Ausgaben des Optimierers sind für jeden Flug Mindestverkaufspreise (Bid Prices), die in Abhängigkeit von der Anzahl der freien Restplätze angeben, wie viel ein Passagier auf diesem Flug mindestens bezahlen muss, um einen Platz zu bekommen. Hierbei ist zum einen zu berücksichtigen, dass sich Reisewege überschneiden (die LH123 von Berlin nach Frankfurt ist z. B. sowohl Zubringer für die LH400 von Frankfurt nach New York als auch für die LH440 von Frankfurt nach Houston), zum anderen, dass für meist spät buchende Geschäftsreisende mit hoher Zahlungsbereitschaft Plätze vorgehalten werden sollen, die nicht schon an früh buchende Touristen billig verkauft werden dürfen. Zur Bestimmung dieser Einstellungen sind große lineare Programme und große dynamische Programme zu lösen.

Täglich werden mehr als hunderttausend neue Steuerungseinstellungen erzeugt.

- Ein Inventar, das die Buchungen auf den einzelnen Flügen verwaltet und Verfügbarkeitsanfragen („Ist ein Platz in der X-Klasse auf der Verbindung LH123-LH400 am 14. Juni frei?“) sowie Buchungsanfragen („Ich möchte einen Platz der X-Klasse auf der Verbindung LH123-LH400 am 14. Juni buchen!“) anhand der Steuerungseinstellungen aus dem Optimierer beantwortet. Jeden Tag muss das Inventar mehrere Millionen dieser Anfragen beantworten, und jede dieser Anfragen muss innerhalb einer Sekunde beantwortet sein.
- Quelle der Verfügbarkeits- und Buchungsanfragen sind sowohl die traditionellen Global Distribution Systems (GDSe) als auch Webseiten wie Expedia oder Opodo. Wenn ein potentieller Passagier Interesse an einer Reise hat, fragt er über eines dieser Systeme Verfügbarkeiten und Preise an und bucht, falls ihm eine seinen Präferenzen und seiner Zahlungsbereitschaft entsprechende Option angeboten wird.

Abbildung 1 gibt eine Übersicht über das Zusammenspiel dieser Systeme.

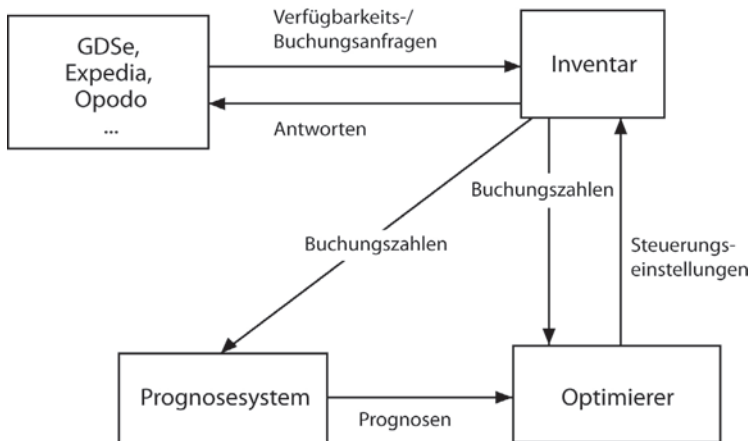


Abbildung 1: Zusammenspiel der Systeme

## **Notwendigkeit einer Simulationsumgebung im Revenue Management: Entscheidungsunterstützung und Schulung**

Verantwortlich für den Steuerungserfolg der LH – und damit für etliche hundert Millionen EUR pro Jahr – sind die ca. 50 Endnutzer von Prognosesystem, Optimierer und Inventar, die in allen drei Systemen weitreichende Eingriffsmöglichkeiten haben, mit Hilfe derer sie z. B. die Prognosen verändern, die Bid-Preise beeinflussen und die Verfügbarkeiten einzelner Produkte erhöhen oder verringern können. Dies geschieht zum einen, um Expertenwissen in die Systeme einzubringen, über das die Systeme selbst nicht verfügen – z. B. über Messen, die zusätzliche Nachfrage erzeugen –, zum anderen zum Erreichen geschäftspolitischer Ziele, wie der Erzeugung zusätzlicher Verfügbarkeiten für Werbeaktionen.

Durch die hohe Komplexität der Realsysteme und die vielfältigen Eingriffsmöglichkeiten ist es für die Endnutzer zum einen schwierig, im Vorfeld das richtige Eingriffsmittel zum Erzielen einer bestimmten Wirkung auszuwählen, zum anderen im Rückblick kaum möglich, den Erfolg oder Misserfolg des ausgewählten Mittels zu beurteilen. Die bisherige Schulung der Endnutzer konzentriert sich auf die Bedienung der Realsysteme und eine theoretische Einführung in die Methoden, es fehlt aber eine praktische Ausbildung, die es den Nutzern ermöglicht, ohne Auswirkungen auf die Realsysteme Steuerungsstrategien ausprobieren zu können.

Beide Lücken – die fehlende Entscheidungsunterstützung und die fehlende Trainingsmöglichkeit – ließen sich mit einer Simulationsumgebung mildern. In einer solchen würden Szenarien durchgespielt, definiert durch eine Angebots- und eine Nachfragestruktur. Das Angebot besteht aus den zur Verfügung stehenden Flugverbindungen (einer oder mehrerer Fluggesellschaften, die alle über ein Prognosesystem, einen Optimierer und ein Inventar verfügen) und Preisen, die Nachfrage aus einer Anzahl von Passagieren verschiedener Typen, die bestimmt sind durch ihre Präferenzen, ihre maximale Zahlungsbereitschaft und die Reise, die sie vornehmen wollen. Grundschema einer solchen Simulation ist:

- Die Prognosesysteme, Optimierer und Inventare erzeugen initiale Verfügbarkeiten.
- Ein Nachfragemodul erzeugt aus den Parametern des Szenarios Passagiere.
- Die Passagiere erfragen bei einem Marktmodul mögliche Reiseoptionen und Preise.
- Das Marktmodul konsolidiert aus den Verfügbarkeitsinformationen der Inventare die Reiseoptionen und Preise und gibt diese Informationen an das Nachfragemodul zurück, das die für den Passagier beste Option auswählt und sie bucht, falls sie seine maximale Zahlungsbereitschaft nicht übersteigt.
- Auf Basis der Buchungsdaten aktualisieren die Prognosesysteme, Optimierer und Inventare ihre Prognosen, Steuerungswerte und Verfügbarkeiten.

Besonderes Augenmerk verlangt die Kalibrierung der Nachfrageströme. Denn während die Prognose- und Optimierungsverfahren und das Verhalten des Inventars gut bekannt sind, liegen im Realsystem keine Informationen über Passagiere vor, die nicht gebucht haben, die sich also für eine andere Fluggesellschaft entschieden haben oder ganz zuhause geblieben sind, weil ihnen das Angebot der LH nicht zusagte. Damit lässt sich keine Kalibrierung anhand von Ist-Nachfrageströmen vornehmen, sondern nur anhand der aus den Nachfrageströmen entstehenden Buchungsdaten und von Experteneinschätzungen kalibrieren.

### **Existierende Simulationsumgebungen**

Bei der LH wurden schon eine Reihe von Simulationsumgebungen eingesetzt. Die älteste ist PODS („Passenger O&D Simulation“), die am MIT in Boston erstellt wurde und seit über 10 Jahren kontinuierlich weiterentwickelt wird. Hauptthema von PODS ist der Vergleich verschiedener Optimierungsverfahren in einem konkurrenzten Markt. Unter Verwendung der Resultate von PODS sind bei LH und vielen anderen Fluggesellschaften in den letzten Jahren Erweiterungen der Revenue-Management-Systeme durchgeführt worden.

Im Rahmen von Dissertationen sind bei der LH in den letzten Jahren die Simulationsumgebungen REMIGIUS (von Martin Friedemann, TU Clausthal) und ARC (von Catherine Cleophas, Paderborn) entstanden. Während der Schwerpunkt von REMIGIUS im Bereich Netzwerkoptimierung liegt, konzentriert sich ARC stärker auf die Modellierung des Kundenverhaltens.

Alle drei Simulationssysteme bieten wertvolle Bausteine und Ideen für den Aufbau einer LH-Simulationsumgebung. Da alle drei mehr für die Verifikation von Methoden und weniger für die Schulung von Endnutzern gedacht sind, hat man sich bei der LH entschieden, eine eigene Simulationsumgebung aufzubauen.

### **Das Projekt REMATE**

Im Herbst 2008 ist bei LH das Projekt REMATE („Revenue Management Training for Experts“) angelaufen. Im Rahmen dieses Projektes wird innerhalb von zwei Jahren mit einem externen Software-Anbieter eine komplexe Revenue-Management-Simulationsumgebung aufgebaut, die sowohl für die Schulung von Nutzern als auch für die Entscheidungsunterstützung in konkreten Revenue-Management-Simulationen verwendbar ist. Hierbei trägt LH das Revenue-Management- und Simulations-Knowhow bei, der externe Anbieter das Wissen um professionelles Software Engineering. Die in REMIGIUS und ARC schon vorgebildeten Algorithmen bilden wesentliche Bausteine dieses neuen Systems, die dort gemachten Erfahrungen fließen in die Spezifikation von REMATE wesentlich ein.

Innerhalb des Simulators wird die LH Revenue-Management-Welt nachempfunden, d. h. es werden die grundlegenden bei LH verwendeten Verfahren und Nutzer-Eingriffsmöglichkeiten nachgebildet, um eine realitätsnahe Simulation zu ermöglichen. Zusätzlich werden auch einige andere Prognose- und Optimierungsverfahren implementiert, um z. B. das Steuerungsverfahren einer Low-Cost-Fluggesellschaft wie Ryanair in der Simulation nachvollziehen zu können.

Besonderen Wert wird im Projekt auf die Flexibilität des Simulators gelegt: Die zu simulierenden Szenarien lassen sich umfassend parametrisieren, sowohl was die Angebotsdefinition als

auch die Nachfragedefinition angeht. Weitere Flexibilität wird dadurch erzielt, dass für jede im Szenario beteiligte Fluggesellschaft die verwendeten Prognose- und Optimierungsverfahren separat auswählbar sind.

Als weiterer entscheidender Erfolgsfaktor des Projektes wird die Qualität der Benutzeroberfläche angesehen – denn im Gegensatz zu einem Realsystem, das jeder Anwender benutzen muss, ist es für die Akzeptanz des Simulators entscheidend, dass er sich intuitiv bedienen lässt und die Anwender gerne mit ihm arbeiten. Deshalb wurde im Projekt ein Rapid-Prototyping-Ansatz für die Erstellung der Benutzeroberfläche gewählt, in dem der externe Anbieter und die Anwender zusammen die Benutzeroberfläche schrittweise verbessern, und den Anwendern schon in frühen Phasen ein funktionstüchtiger Prototyp zur Verfügung steht.

Die LH erhofft sich durch die bessere Schulung der Anwender und bessere Möglichkeiten der Simulation von Nutzereinflüssen eine deutliche Ertragssteigerung.

### 3 Energie und Umwelt

Aus gesellschaftlicher Sicht ist die Beschäftigung mit dem Thema Energie von kaum zu überschätzender Relevanz. Energieverbrauch bedeutet Ressourcenverbrauch und nicht selten die Belastung von Umweltmedien. Da ohne die angemessene Bereitstellung von Energie in einem hoch industrialisierten Land wie der Bundesrepublik Deutschland ein angemessener Lebensstandard nicht möglich wäre, kommt es darauf an, die Energiebereitstellung zu sichern und den Energieeinsatz zu optimieren, also auf der einen Seite einen möglichst hohen Nutzen zu erzielen und auf der anderen Seite die damit verbundenen negativen Effekte möglichst gering zu halten. Die Einbeziehung des wachsenden Anteils fluktuierender erneuerbarer Energien stellt hierbei eine besondere Herausforderung insbesondere für den elektrischen Energieanteil dar.

Fachleute sind sich darin einig, dass die Energiebereitstellung in den nächsten Jahren eine weitere Verwendung von fossilen Rohstoffen sowie Kernbrennstoffen erfordert, gleichzeitig aber der regenerative Anteil anwachsen muss. Inwieweit der politisch beschlossene Kernkraft-Ausstieg in der geplanten Konsequenz vollzogen wird, bleibt der Zukunft überlassen. Klärungsbedürftig ist in jedem Fall die sichere Entsorgung der radioaktiven Abfälle.

Bei den fossilen Brennstoffen ist eine Zunahme des Erdgasanteils zu erwarten, was dem Trend entspricht, den Kohlenstoffanteil in den verwendeten Energierohstoffen zugunsten des Wasserstoffanteils (weniger  $\text{CO}_2$ ) zu verringern. Auch die Einspeisung von Synthesegas und regenerativ erzeugtem Biogas und/oder Wasserstoff in vorhandene Erdgasleitungen zur Wärme- und Stromerzeugung ist eine mittelfristige Option auf dem Weg zu nachhaltigen Energiesystemen.

Vor diesem Hintergrund hat die TU Clausthal in ihrer vom Senat verabschiedeten Entwicklungsplanung die Einrichtung des Energie-Forschungszentrums Niedersachsen beschlossen. In diesem in Goslar angesiedelten Zentrum werden in Zusammenarbeit mit dem Simulationswissenschaftlichen Zentrum Fragestellungen zur Energie- und Umweltwissenschaft behandelt. Im Vordergrund stehen derzeit die Dezentralisierung der Energiesysteme mit dem Ziel zunehmender Einbindung von regenerativen Energiequellen und der Schließung der Stoffkreisläufe. Für die dezentrale Einspeisung relevanter Mengen elektrischer Energie sind heutige Strom- und Gasnetze nicht ausgelegt. Ein möglicher Weg zur Beseitigung von Netzengpässen und Sicherstellung der Netzstabilität ist ein Online-



Netzmanagement von Stoff- und Energieflüssen sowie ein gezielter Netzausbau mit neuen Speicherkapazitäten. Beide Maßnahmen erfordern u. a. die Nutzung der Simulationstechnik. Je nach Anforderungen sind Lösungen in Echtzeit oder Maschinenzeit (Planungsaufgaben) mit und ohne Prozessanbindung erforderlich. Für derartige Aufgabenstellungen werden im Folgenden einige Lösungsbeispiele angeboten.

Neben der oben beschriebenen Aufgabenstellung ist die Steigerung der Energieeffizienz ein energie- und umweltrelevantes Thema. Ein Beispiel hierfür ist die Verbesserung der Betriebsdaten von Gasbrennern für Industrieöfen. In einem Beitrag wird mit Hilfe von Simulation und Experiment gezeigt, auf welche Weise der Schadstoffausstoß bei verbesserter Wärmeleitung verringert und damit umweltfreundlicher gestaltet werden kann. Besonders hervorzuheben ist hierbei, dass es heute möglich ist, aufgrund sehr leistungsfähiger Simulationssysteme einen Abgleich mit dem experimentellen Ergebnis herbeizuführen. Dies ist eine große Hilfe bei der Konstruktion und Auslegung neuer verfahrenstechnischer Geräte und Anlagen.

### **3.1 Simulation des Verbundbetriebs Virtueller Synchronmaschinen (VISMA)**

Das am Institut für Elektrische Energietechnik der TU Clausthal entwickelte Konzept der Virtuellen Synchronmaschine ist Teilprojekt des Forschungsverbundes Energie Niedersachsen, der sich mit den dringender werdenden Fragen des strukturellen und systemtechnischen Wandels im Bereich der Energieversorgung auseinandersetzt.

Das Konzept der Virtuellen Synchronmaschine leistet hierbei einen Beitrag zur Lösung der Problematik der dezentralen Einspeisung zunehmender Mengen regenerativ erzeugter Elektroenergie in Netze mit eingeschränkter energetischer Aufnahmefähigkeit.

*Ralf Hesse, Dirk Turschner,  
Hans-Peter Beck;  
Institut für Elektrische Energie-  
technik*

#### **Stand der Forschung**

Dem VISMA-Konzept liegt der Gedanke der Überführung der vielfältigen, den Netzbetrieb positiv beeinflussenden Eigenschaften der elektromechanischen Synchronmaschine als gegenwärtig noch netzdominierende, großtechnische Ener-

gieerzeugungseinrichtung auf die Technologie der vollelektronischen Einspeisewechselrichter zugrunde. Die systemtechnische Erweiterung der Einspeisewechselrichter zur VISMA lässt diesen schließlich am Netz dynamisch und statisch wie eine elektromechanische Synchronmaschine wirken. Als wichtigste, hieraus hervorgehende Eigenschaften gelten die elektrisch exakt nachgebildete und damit netzstabilisierende Wirkung der virtuellen Masse der VISMA sowie der netzweite, solidarische Energieausgleich zwischen den VISMA-Systemen bei netzlokalen Energieüberträgen oder -defiziten infolge von Netzfrequenz- und -spannungsänderungen.

Zu Beginn der Forschungsaktivitäten wurden aus der theoretischen Analogiebetrachtung heraus [1, 2] die grundsätzliche Funktion und die Identität des elektrischen Verhaltens im Vergleich zur elektromechanischen Synchronmaschine für ein einzelnes VISMA-System untersucht [3, 4, 5, 6]. Im Mittelpunkt der gegenwärtigen Aktivitäten steht die Betrachtung des Netzverbundbetriebs mehrerer VISMA-Systeme unter besonderer Berücksichtigung der statischen und dynamischen Energieausgleichsmechanismen. Zu diesem Zweck wurden einerseits simulative Voruntersuchungen durchgeführt, deren Ergebnisse hier auszugsweise vorgestellt werden sollen, sowie Vorbereitungen für den Aufbau einer entsprechenden Experimentalumgebung getroffen. Zusätzlich befinden sich aktuell VISMA-Systeme der Leistungsklassen 5 kVA und 50 kVA nach gerätetechnischer Realisierung im Rahmen von Technologietransfermaßnahmen in der Inbetriebnahmephase.

## **Forschungsaufgaben**

Globales Ziel des Vorhabens ist der Existenznachweis eines Einspeisewechselrichters mit dem Verhalten einer elektromechanischen Synchronmaschine. Das Ergebnis bilden Vorserienmodelle für VISMA-Systeme im o. g. Leistungsbereich.

## **Fazit und Ausblick**

Zur Einordnung der im Folgenden vorgestellten Simulationsergebnisse der Untersuchung des Verbundbetriebs von Virtuellen Synchronmaschinen ist in Abbildung 1 die Grundstruktur eines VISMA-Systems wiedergegeben. Ein dynamischer IGBT -Wechselrichter dient der energetischen Anbindung be-

liebiger Gleichspannungserzeuger und -speicher an das Netz, wobei hier vorwiegend dezentral installierte, regenerative Generatoren im Mittelpunkt stehen, die ihren Ertrag in elektrisch schwache Netze speisen.

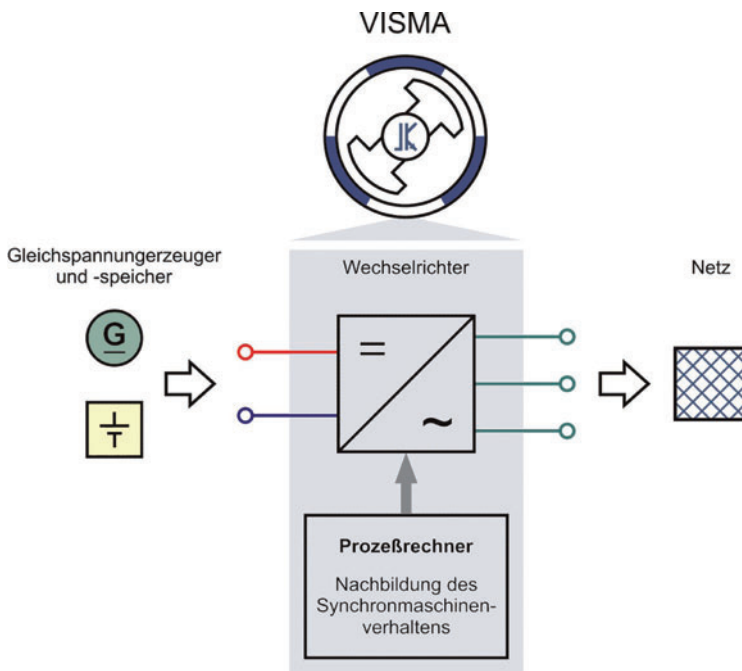


Abbildung 1: Bestandteile einer Virtuellen Synchronmaschine

Ein eingebetteter Prozessrechner nimmt den Verlauf der Netzspannung am Anschlusspunkt der VISMA mit hoher Abtastrate auf und führt das Netzspannungssignal dem in Abbildung 2 gezeigten, algorithmischen Modell einer elektromechanischen Synchronmaschine zu, welches als Programm auf dem Prozessrechner zyklisch mit hoher Frequenz ausgeführt wird. Ergebnis der Berechnung ist der echtzeitige Verlauf des Netzstromes der je nach variabler Parametrierung gewählten, spezifischen Synchronmaschine. Ein schneller Modulator, der als Bestandteil des Wechselrichters in Abbildung 1 nicht wiedergegeben ist, setzt dieses errechnete Maschinenstromsignal in Schaltimpulse für die leistungselektronischen Schalter im Wechselrichter um, sodass das errechnete Maschinenstromsignal nur mit unbedeutender Verzögerung physisch am Netz wirksam wird. Diese Wirkungskette hat zur Folge, dass die beschriebene Vorrichtung

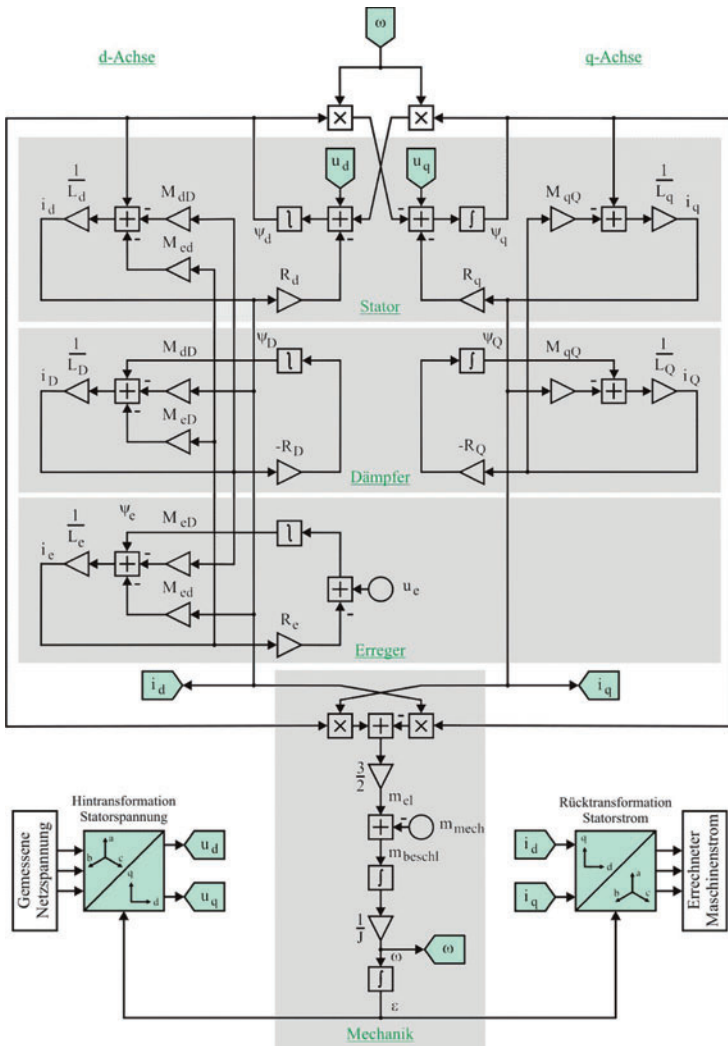


Abbildung 2: Auf dem Prozessrechner nach Abbildung 1 gleichzeitig ausgeführtes Maschinenmodell der Virtuellen Synchronmaschine

am Netz exakt wie eine elektromechanische Synchronmaschine arbeitet und aus Netzsicht – von wechsellichterspezifischen Netzzrückwirkungen abgesehen – kein Unterschied zwischen dem Verhalten der VISMA und einer elektromechanischen Synchronmaschine festgestellt werden kann. Die gegenwärtigen Untersuchungen zum Verbundbetrieb mehrerer VISMA-Einheiten am Netz weisen darauf hin, daß die für den Einzelbetrieb eines Systems ermittelten funktionalen Analogien auch für den Parallelbetrieb mehrerer VISMA-Systeme gelten.

Die im Folgenden diskutierten Ergebnisse gingen aus der Überführung der in Abbildung 3 gezeigten, beispielhaften elektrischen Topologie zum Parallelbetrieb zweier VISMA-Einheiten an einem elektrisch schwachen Netz mit zuschaltbarer Starklast in ein numerisches Modell hervor, welches in der Umgebung Matlab®/Simulink® ausgeführt wurde. Das in der Simulation verwendete Maschinenmodell entspricht unterschiedslos dem, welches auf dem eingebetteten Prozessrechner eines realen VISMA-Systems ausgeführt wird und ist daher zielsystemunabhängig.

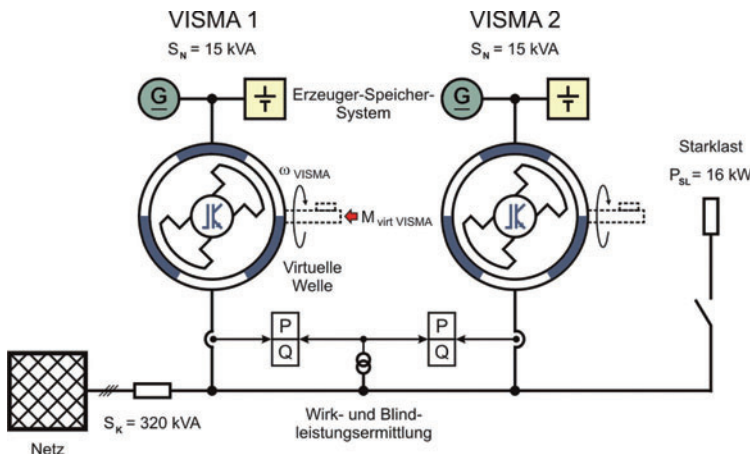


Abbildung 3: Beispielhafte elektrische Topologie zur Untersuchung des Netzparallelbetriebs mehrerer VISMA-Einheiten

Das erste Simulationsszenario sah die Beaufschlagung der beiden VISMA-Einheiten mit den in Abbildung 4 aufgetragenen, virtuellen mechanischen Momenten zu willkürlich gewählten Zeitpunkten vor.

Aus der Analogiebetrachtung zur elektromechanischen Synchronmaschine geht hervor, dass ein negatives Wellenmoment die Maschine in den generatorischen Betrieb, ein positives Wellenmoment dieselbe entsprechend in den motorischen Betrieb überführt. Bezogen auf die VISMA wird dem generatorischen Betrieb die Einspeisung elektrischer Energie aus dem Gleichspannungs-Erzeuger-Speichersystem in das Netz und dem motorischen

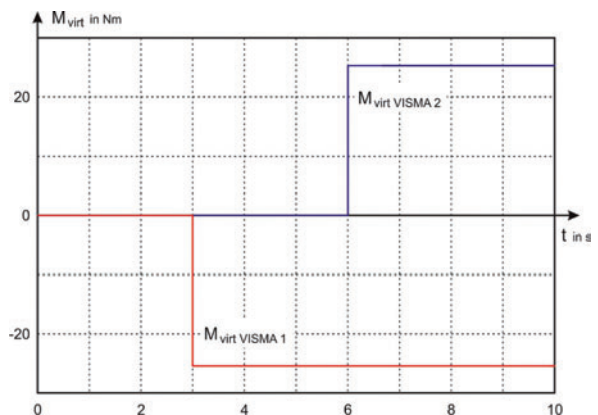


Abbildung 4: Zeitschema der Aufschaltung der virtuellen mechanischen Momente

Betrieb das Laden der Speicher gleichgesetzt. Zusätzlich steht die vollständige und ebenso aus der funktionalen Analogie zur elektromechanischen Synchronmaschine hervorgehende Blindleistungsfunktionalität zur Verfügung, die hier allerdings nicht betrachtet werden soll.

Das generatorische Moment an der VISMA 1 zur Simulationszeit  $t = 3$  s sowie das motorische an der VISMA 2 bei  $t = 6$  s setzen statische und aufgrund der sprunghaftigen Verläufe der Momente dynamische Prozesse in den jeweiligen virtuellen Maschinen in Gang, die über das koppelnde Netz wechselwirken.

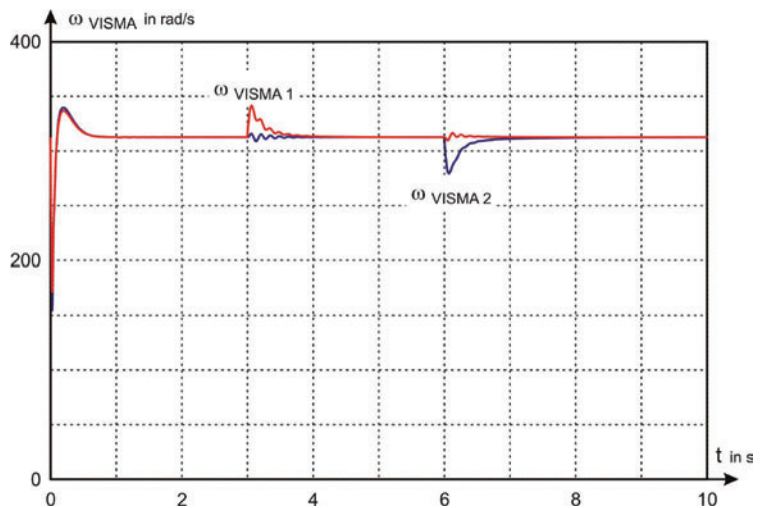


Abbildung 5: Veränderungen der virtuellen Drehzahlen der VISMA-Einheiten nach Momentenbeaufschlagung entsprechend Abbildung 4

Abbildung 5 verdeutlicht die dynamischen Prozesse innerhalb der virtuellen Mechanik der beiden VISMA-Systeme. Während das generatorische Moment die VISMA 1 transient auf über-synchrone Drehzahl beschleunigt, wird die Kopplung der virtuellen Maschinen durch das Netz anhand der zwar geringfügigen aber deutlich sichtbaren Drehzahlreaktion der VISMA 2 erkennbar. Der Grund hierfür liegt in der Anregung von Polrad-schwingungen, die durch das stoßförmige, generatorische Moment an der virtuellen Welle der VISMA 1 herbeigeführt wer-

den. Der Ausbreitungsmechanismus der dynamischen Störung über das hier vorgestellte Modellnetz wird im Wesentlichen durch die Spannungsveränderungen während der betrachteten Vorgänge charakterisiert, die in Abbildung 8 aufgetragen ist. Aufgrund der absichtlich niedrig angesetzten Kurzschlussleistung des Modellnetzes führt die beschriebene Handlung an der VISMA 1 zur Spannungsanhebung im Netz. Da die Netzspannung allgemein die kollektive Größe für alle installierten VISMA-Systeme darstellt, werden auch die fernen, ggf. auch unbeeinflussten Maschinen von den Ausgleichsprozessen erfasst. In diesem Beispiel antwortet die VISMA 2 auf den Netzspannungshub mit geringem Polradpendeln. Am Ausklingen der Polradpendelungen an beiden Maschinen wird zusätzlich deutlich, dass im allgemeinen Falle von Netzpendlungen alle am Netz befindlichen Maschinen zur gemeinschaftlichen Dämpfung beitragen. Zur Simulationszeit  $t = 6$  s ist in Abbildung 5 eine vergleichbare Situation aufgezeigt, in der im Unterschied der VISMA 2 ein motorisches Moment beaufschlagt wird.

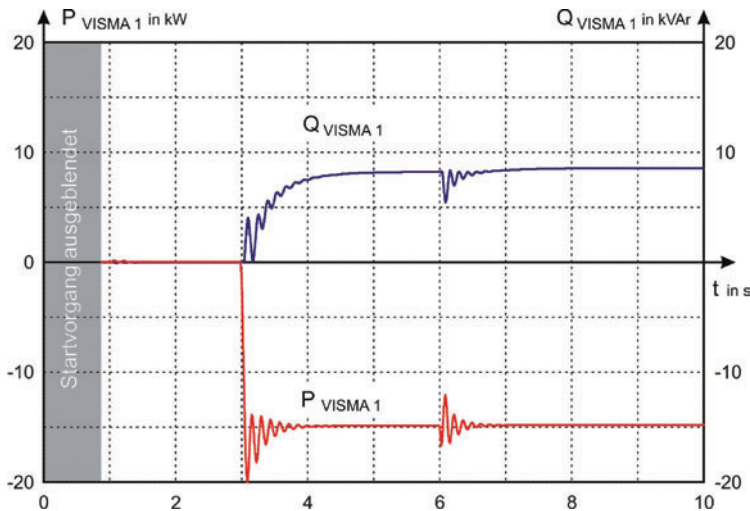


Abbildung 6: Wirk- und Blindleistung der VISMA 1 während der Momentenbelastung beider virtueller Maschinen

Während der geschilderten Simulation wurde zusätzlich die Wirk- und Blindleistung der VISMA 1, aufgetragen in Abbildung 6 sowie der VISMA 2, sichtbar in Abbildung 7 errechnet und aufgezeichnet.

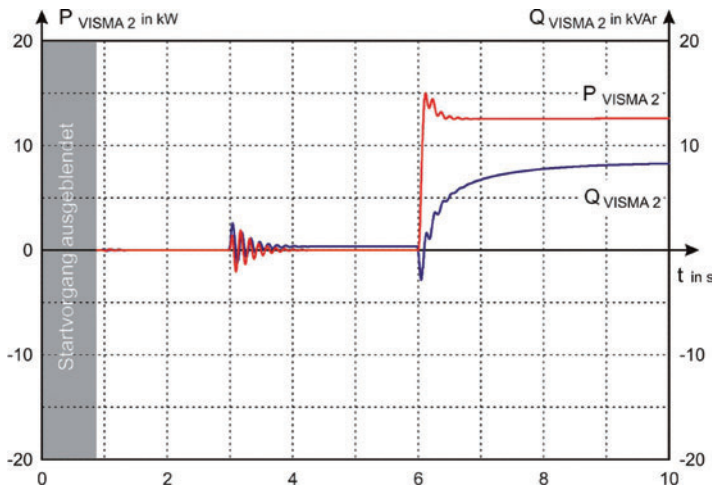
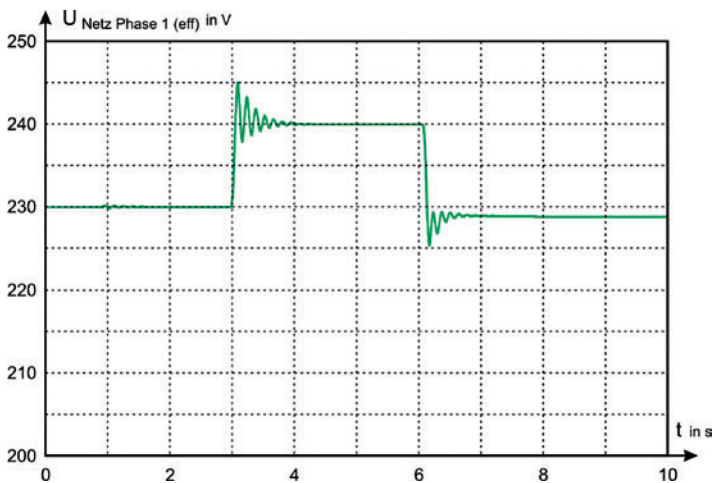


Abbildung 7: Wirk- und Blindleistung der VISMA 2 während der Momentenbelastung beider virtueller Maschinen

Abbildung 8: Verlauf der Spannung im Modellnetz nach Abbildung 3 während der Beaufschaltung der Virtuellen Maschinen mit virtuellen Momenten



pelnde Netz infolge der angeregten Polradpendelung geringfügige Leistungsfluktuationen auf. Zum Simulationszeitpunkt  $t = 6$  s wird deutlich, dass diese Art von Beeinflussung über das Netz auch in umgekehrter Richtung und unabhängig vom stationären Grundzustand der benachbarten Maschine erfolgt.

In einem zweiten Simulationsszenario laufen beide VISMA-Systeme ohne Beaufschaltung von Momenten leistungsneutral am Netz. Zum Simulationszeitpunkt  $t = 5$  s wird die in Abbildung 3 eingetragene Starklast zugeschaltet, um eine in diesem Fall netzweite Beeinflussung eines Netzparameters zu bewirken.

Mit der Aufschaltung des generatorischen Momentes stellt sich an der VISMA 1 nach Abbildung 6 die beabsichtigte Netzrückspeisung von Wirkleistung bei auspendelndem Polrad ein. Das sekundäre Entstehen von Blindleistung ist bei Synchronmaschinen prinzipbedingt und soll nicht weiter betrachtet werden. Es besteht allerdings die Möglichkeit, die Blindleistung durch Einfluss auf den virtuellen Erregerkreis zurückzufahren.

Zeitgleich mit der Leistungsreaktion der VISMA 1 treten auch an der VISMA 2 bedingt durch das kop-

pelnde Netz infolge der angeregten Polradpendelung geringfügige Leistungsfluktuationen auf. Dabei muss berücksichtigt werden, dass Synchronmaschinen allgemein sowohl auf Frequenz- als auch Spannungsänderungen reagieren, Spannungsänderungen jedoch nur lokale, Frequenzänderungen aber netzglobale Erscheinungen sind.

Der betrachtete Fall soll zeigen, dass netzparallele VISMA-Systeme auftretende Leistungsdefizite im Netz durch solidarischen Aufbringen von Defizitkompensationsleistung entgegenwirken. Daneben ist, wie hier hingegen nicht ausgeführt wird,



die solidarische Aufnahme von Leistungsüberschüssen möglich, die insbesondere bei fluktuierenden regenerativen Energieerträgen eine effektive Verteilung von Übererträgen erlaubt.

Die Zuschaltung der Starklast zum angegebenen Zeitpunkt führt zu einem erheblichen Spannungseinbruch von 20 V im simulierten Netz. Während die VISMA-Systeme prinzipbedingt nahezu wirkleistungsneutral bleiben, führt die netzgeführte Untererregung zu einer sofortigen Blindleistungsreaktion aller Maschinen am Netz. Dabei wird zunächst hohe transiente und nach Ausklingen der nichtstationären Vorgänge statische kapazitive Blindleistung am Netz bereitgestellt. Jede gleichkonfigurierte virtuelle Maschine gibt dabei automatisch ein gleichgroßes Leistungskontingent ab. Solche Prozesse erfordern keine Kommunikationsverbindungen zwischen den einzelnen VISMA-Systemen.

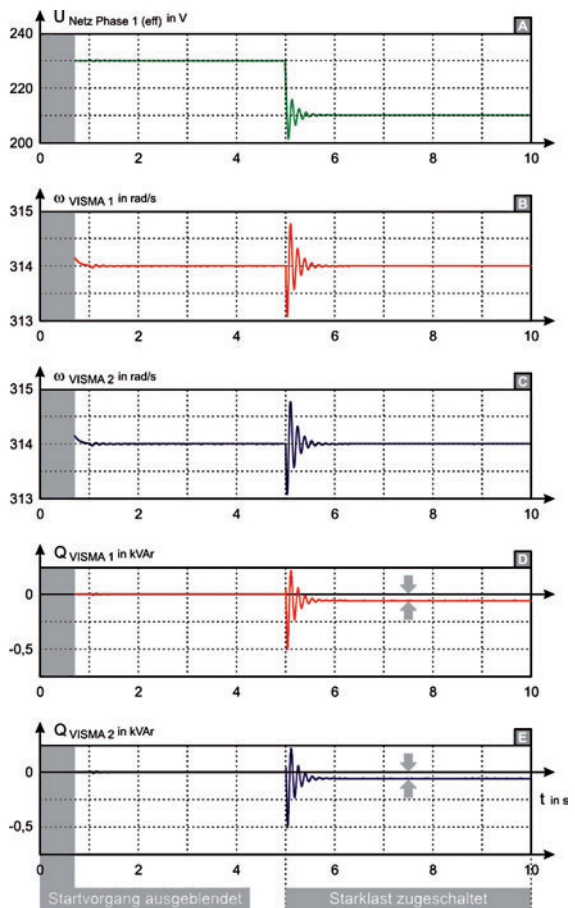
Da auch die der Simulation zugrundeliegenden VISMA-Systeme für dieses Beispiel völlig identisch parametrisiert sind, laufen selbst die Polradpendelungen synchron ab.

Der von den VISMA-Einheiten bereitgestellte statische Blindleistungsbetrag ist in den Teilabbildungen D und E durch Pfeile gekennzeichnet.

### Zusammenfassung

Die gezeigten Simulationsergebnisse vermitteln einen Eindruck über die Netzinteraktivität parallel arbeitender VISMA-Systeme. Die frei konfigurierbaren virtuellen Maschinen erlauben allein durch die Bereitstellung variabler virtueller Massen und variabler elektromechanischer Maschinenzeitkonstanten eine große Zahl interessanter Fallanalysen. Die vorgestellten Resultate veranschaulichen daher nur einen sehr begrenzten Bereich des Funktionspektrums Virtueller Synchronmaschinen.

Abbildung 9: Netzspannung (A), Drehzahlen (B, C) sowie Blindleistungen (D, E) der beiden VISMA-Systeme bei Zuschaltung einer Starklast



## Beteiligte Partner

Forschungskooperation:

- TU Braunschweig: Untersuchung von Speichersystemen für die Virtuelle Synchronmaschine
- Uni Hannover: Untersuchung der Integration Virtueller Synchronmaschinen in Netze durch Nutzung der Lastflussanalyse
- CUTEC-Institut GmbH Clausthal: Untersuchung der Virtuellen Synchronmaschine als konfigurierbare Dämpfungseinrichtung zur Kompensation von Netzschwingungen

Technologietransfer:

- Sieb & Meyer AG: Aufbau einer VISMA mit einer Leistung von 5 kVA für Brennstoffzellen-BHKWs
- Inensus GmbH und dbr consult ingenieuresellschaft: Aufbau von VISMA-Systemen zur Netzeinspeisung vorwiegend regenerativ erzeugter Energie
- Siemens AG: Bau von VISMA-Prototypen

## Literatur

- [1] R. Hesse: Virtuelle Synchronmaschine, Diss. TU Clausthal 2007, Papierflieger-Verlag Clausthal, ISBN-13: 978-3897209190.
- [2] R. Hesse, H.-P. Beck, D. Turschner: Die virtuelle Synchronmaschine, etz Elektrotechnik + Automation, Heft Motion & Mechatronics S2/2007, S. 38-44, VDE Verlag Berlin, ISSN 094-873-87.
- [3] D. Turschner, R. Hesse: Power electronic substitution of a classical synchronous machine for power conditioning in decentralized energy supply, 3rd French-German conference Renewable and Alternative Energies, University of Le Havre, PFT Fécamp, France, Tagungsband S. 39-46, 12/2005.
- [4] D. Turschner, R. Hesse, H.-P. Beck: Virtual Synchronous Machine, 9th International Conference Electrical Power Quality and Utilisation, Barcelona, 9-11 October 2007.
- [5] H.-P. Beck, R. Hesse, D. Turschner: Virtuelle Synchronmaschine in stromrichterdominierten schwachen Netzen, Zwölftes Kasseler Symposium Energie-Systemtechnik und

Regelungstechnik für dezentrale Energiesysteme  
22.-23. November 2007.

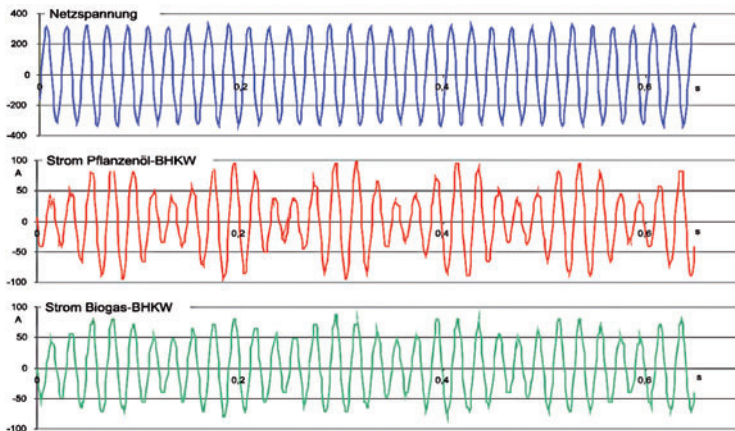
- [6] D. Turschner, R. Hesse, H.-P. Beck: Einsatzpotential der Virtuelle Synchronmaschine zur Verbesserung der Netzqualität, Kolloquium des ETI der TH Karlsruhe, 14. Januar 2008.

### 3.2 Dynamische Simulation elektrischer Energieverteilnetze – Energiepark Clausthal

Die heutige Entwicklung von Arealnetzen betrachtet man unter zunehmender Durchdringung von dezentralen Stromerzeugungsanlagen. Es wird auch verlangt, dass Arealnetze eine Inselnetzbildung unterstützen (Microgrids). Allerdings hat sich bereits jetzt gezeigt, dass die Zusammenführung regenerativer Erzeuger unterschiedlichster Wandlungsprinzipien die Qualität, Zuverlässigkeit und Sicherheit von Netzen ungünstig beeinflusst. Im Inselbetrieb wird die Problematik der Netzstabilität und der Netzqualität durch die sehr große Netzimpedanz ( $R_{\text{netz}} \rightarrow \infty$ , „weiches“ Netz) und kleine Kurzschlussleistung des Netzes noch mehr verschärft.

Im Inselbetrieb sind Netzstörungen besonders stark ausgeprägt und die schwingungsfähigen Komponenten werden deutlich erkennbar. Das sieht man im folgenden Beispiel (siehe Abbildung 1). Starke Schwabungen in den Ausgangsströmen der Maschinen und starke Schwankungen der Netzspannung führen zur Netzinstabilität.

*Oleg Osika, Hans-Peter Beck;  
Institut für Elektrische Energietechnik*



*Abbildung 1: Netzspannungsverlauf und die Ausgangsströme vom Biodiesel-BHKW mit TDI-Motor und Biogas-BHKW im Inselbetrieb (Energiepark Clausthal, Messung) [1]*

Im Rahmen des FEN-Projektes werden Messungen im Energiepark durchgeführt und das Modell des Energieparks in der Simulationsumgebung weitergehend untersucht. Das Ziel ist, Ursachen und Auswirkungen von transienten und stationären Störeinflüssen zu finden und störungsverhindernde Maßnahmen zu erarbeiten.

## Stand der Forschung

### Aufbau des CUTEC-Netzes auf Basis von Matlab-Simulink

Auf Basis von Messungen wird das Simulationsmodell vom Energiepark mit der Hilfe der Matlab-Plattform erstellt (Abbildung 2). Das Modell stellt das Niederspannungsnetz dar und besteht aus dem Energiekonditionierer und Blockheizkraftwerken (BHKW). Die BHKW können mit Asynchron- und Synchrongeneratoren ausgestattet werden. Dabei werden die wichtigsten elektrischen und elektromechanischen Parameter der Generatoren berücksichtigt. Jedem Generator wird ein eigenes Momentenstörungsspektrum (entsteht durch den Betrieb der Verbrennungsmaschinen) zugewiesen, das aus früheren Messungen bestimmt wurde. Das Kabel und die Ersatzlast des CUTEC-Institutes [4] sind durch den ohmschen Widerstand abgebildet. Wichtigster Beitrag zur Netzsimulation ist das Modell des Energiekonditionierers, über ihn wird unten noch ausführlicher gesprochen. Dieses Teilmodell ermöglicht den Parallelbetrieb des Energiekonditionierers mit dem TDI-BHKW mit Asynchrongenerator (Abbildung 2).

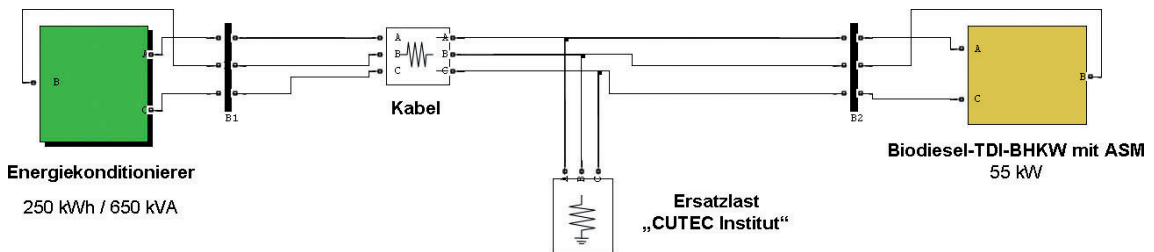


Abbildung 2: Das Simulationsmodell vom Energiepark Clausthal (Teilmodell)

## Das Simulationsmodell des Energiekonditionierers

Der Energiekonditionierer ist die netzbildende Einheit, die im Inselbetrieb die Frequenz und die Spannung des Netzes vorgibt. Er besteht aus einer Gleichspannungsbatterie mit innerer Impedanz, einem PWM-Umrichter, einem Anpassungstransformator, einer Glättungsdrossel, einem Filter und einer Kompensationseinrichtung (Abbildung 3). Der PWM-Generator erzeugt die Signale zur Steuerung der Schaltelemente des Umrichters. Die netzseitige Anschlusschiene wird auch als „Point of common coupling“ (PCC) bezeichnet. Die Spannung am PCC-Knoten steuert der Spannungsregler. Die existierende Regelung des Energiekonditionierers stammt aus der Antriebstechnik und ist vermutlich zu langsam und nicht optimal eingestellt, was die Netzausfälle und Resonanzerscheinungen im Bereich 8 Hz erklären kann.

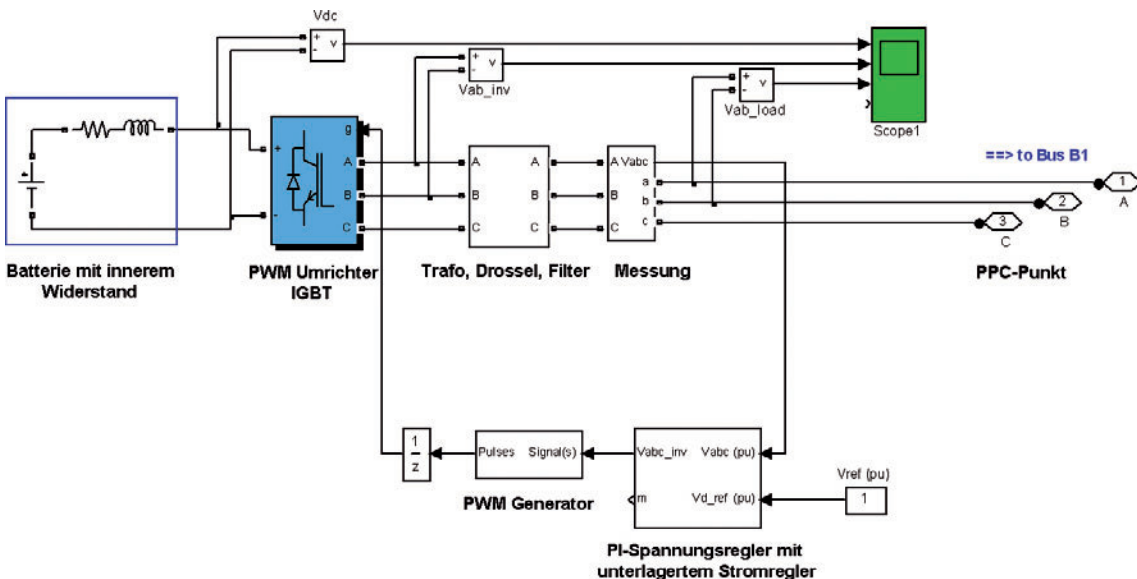


Abbildung 3: Erweitertes Simulationsmodell des Energiekonditionierers in Matlab-Simulink

Zur detaillierten Untersuchung der Resonanzphänomene wird die Regelstrecke des Energiekonditionierers nachgebildet und auf die Eigenfrequenz von 8 Hz eingestellt (Abbildung 4).

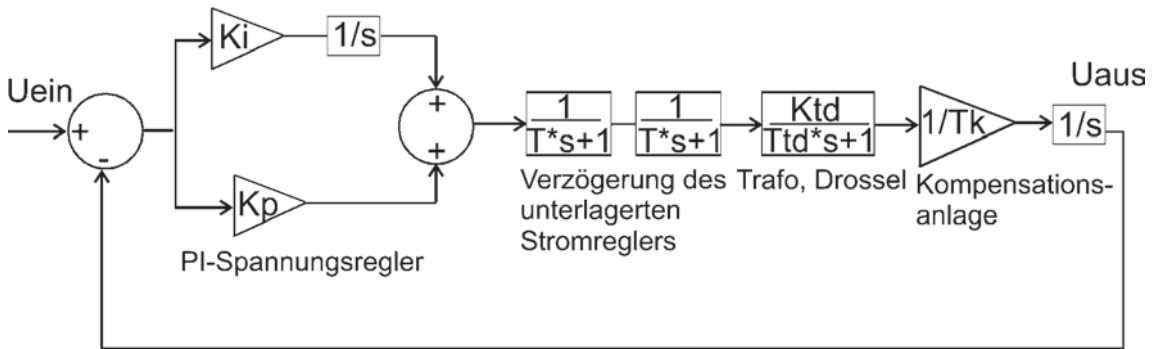


Abbildung 4: Regelstrecke des Energiekonditionierers mit PI-Spannungsregler

Die Einstellung der Eigenfrequenz von 8 Hz erfolgt durch die Parametrierung des PI-Spannungsreglers, da die anderen Parameter von Trafo, Drossel und Kompensationseinrichtung fest eingestellt sind. Dafür müssen die Koeffizienten des Spannungsreglers variiert werden. Daraus ergibt sich folgende Pol-Null Karte (Abbildung 5) mit den Polpaaren, die die Dynamik der Strecke bestimmen und auf 8 Hz Eigenfrequenz eingestellt sind.

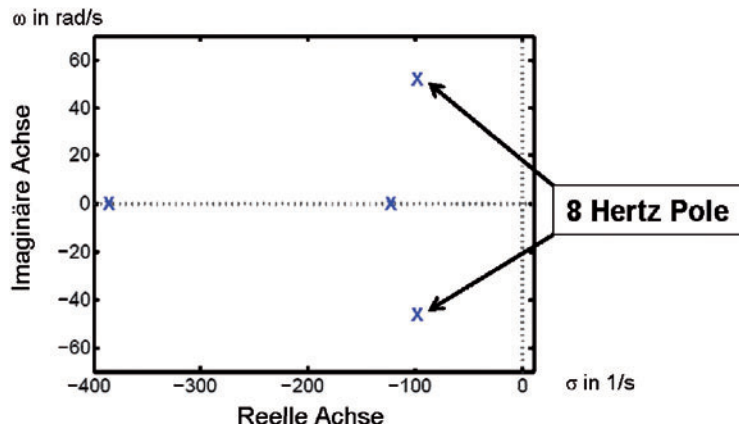


Abbildung 5: Pol-Nullstellen Karte der Regelstrecke des Energiekonditionierers mit der Eigenfrequenz der Polpaaren bei 8 Hz

Die Einstellung der Eigenfrequenz wird durch die Einschwingung des Energiekonditionierers im Zeitbereich verdeutlicht (Abbildung 6a). Danach wird die Anregung der Asynchronmaschine in Form eines Störmoments mit einer kleinen Am-

plitude aktiviert. Sofort wird die Amplitude der Störung der Ausgangsleistung des Energiekonditionierers fast verdoppelt (siehe FFT-Transformation, Abbildung 6b), was die Resonanzerscheinung im Netz bestätigt. Dadurch ist die Verstärkung der Schwingungen durch die ungünstig ausgelegte Spannungsregelung des Energiekonditionierers verifiziert.

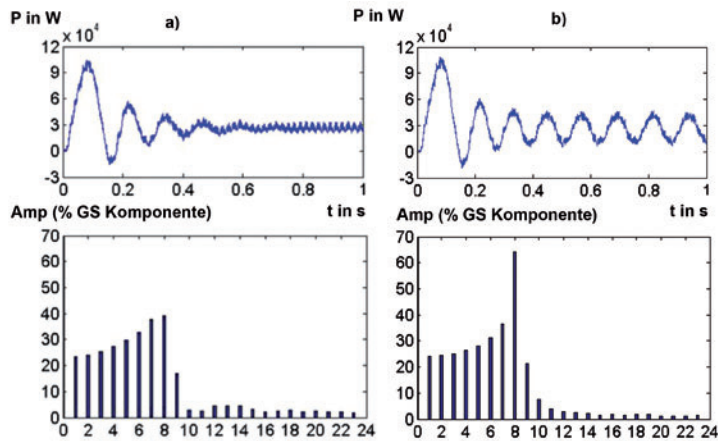


Abbildung 6: Energiekonditionierer und Biodiesel-BHKW im Inselbetrieb ohne (a) und mit (b) 8 Hz Anregung (Simulation)

## Fazit und Ausblick

Die Ergebnisse der Untersuchung lassen erkennen, dass schwache Netze sowie Inselnetze sehr störungsanfällig sein können. Deswegen wird es schwierig, im Inselnetz den Netzqualitätsanforderungen zu entsprechen und die Netzstabilität zu sichern. Schwingungsanfällige Komponenten werden sehr schwach gedämpft, was zusätzliche Hilfsmaßnahmen verbessern müssen.

Eine optimale Lösung ist der Einsatz der Virtuellen Synchronmaschine (VISMA) [3]. Die VISMA ermöglicht einerseits die selektive Unterdrückung der subfrequenten Schwingungen, andererseits übernimmt der Umrichter auch das Maschinenverhalten der Synchronmaschine, was das Netz bezüglich der Stabilität stützen würde. Dies wurde bereits simulationstechnisch belegt (siehe Beitrag R. Hesse zur VISMA).

## Literatur

- [1] Forschungsverbund Energie Niedersachsen: Dezentrale Energiesysteme, 1 Statusseminar, Tagungsband, Goslar 2007, ISBN: 978-3-9811720-1-0.
- [2] Beck, H.-P.; Clemens, M.: Konditionierung elektrischer Energie in dezentralen Netzabschnitten. ETZ Heft 5/2004 S16-25. (ISSN 0948-7387).
- [3] Hesse, R.; Beck, H.-P.; Turschner, D.: Die Virtuelle Synchronmaschine. etz Motion & Mechatronics Sonderausgabe S2/2007 S38-44. (ISSN 0948-7387).
- [4] Clausthaler Umwelttechnik-Institut GmbH, Clausthal-Zellerfeld: [www.cutec.de](http://www.cutec.de).



### 3.3 Dezentrales Energiemanagementsystem Prozessmodell des elektrischen Mittelspannungsnetzes

Im Rahmen eines Verbundforschungsprojekts der EWE AG in Oldenburg zum Thema „Dezentrales Energiemanagementsystem“ ist eine Simulation des Mittelspannungsnetzes der EWE durchzuführen.

*Hans-Peter Beck, Ernst-August Wehrmann, Jens zum Hingst;  
Institut für Elektrische Energietechnik*

Der Schwerpunkt liegt bei der Untersuchung des Systemverhaltens von dezentralen kleinen und mittleren Anlagen, die in das Mittelspannungsnetz einspeisen. Gegenwärtig stellt die Windenergie den größten Anteil dieser dezentralen Einspeisungen dar. Die maximale Leistung der installierten Windenergieanlagen liegt dabei in der Größenordnung der maximalen Last, die in diesem Netz auftritt. Zukünftig ist damit zu rechnen, dass weitere dezentrale Erzeugungsanlagen in das Netz einspeisen. Dies sind zum einen weitere Windenergieanlagen, darüber hinaus aber auch Blockheizkraftwerke (z. B. Biogasanlagen oder kleinere Anlagen, die als Heizungsanlagen in Einfamilienhäusern eingesetzt werden).

Diese vermehrte Einspeisung in das Mittelspannungsnetz, das ursprünglich als Verteilnetz geplant wurde, kann zu Problemen im Bereich Auslastung und Spannungshaltung führen. Bei der Einsatzplanung der beeinflussbaren Erzeugungsanlagen im Rahmen des Gesamtprojekts sind daher die Vorgänge im Mittelspannungsnetz zu beachten. Weiterhin stellt die Netzsimulation erweiterte Erkenntnisse für die Entscheidung über den Netzausbau bereit.

Als neuer Schwerpunkt ist die prozessbegleitende (online) Simulation in das Projekt aufgenommen worden. Dabei steht insbesondere die Generierung eines konsistenten Datensatzes der zur Simulation erforderlichen Eingangsdaten der Knotenwirk- und blindleistungen im Vordergrund. Zur Bestimmung dieser Größen auf Basis von Messwerten wurde in diesem Projekt der systemtheoretische Ansatz eines Beobachters auf das System eines elektrischen Netzes übertragen.

## Aktueller Stand der Technik

Einerseits erfolgt die Prozessführung über das vorhandene Leitungssystem, andererseits wird eine Offline-Planungssoftware zur Netzberechnung für stationär vorgegebene Netzsituationen im Mittelspannungsnetz eingesetzt.

Softwaresysteme zur dynamischen Netzsimulation kommen derzeit typischerweise nur im Hoch- und Höchstspannungsnetz zum Einsatz.

## Forschungsaufgaben

Die Aufgabe des Teilprojekts „Prozessmodell des elektrischen Mittelspannungsnetzes“ besteht darin, die Vorgänge im elektrischen Netz für eine geplante bzw. prognostizierte Last- und Einspeisesituation zu simulieren und ggf. auftretende Verletzungen von Netzrestriktionen zu detektieren. In Abbildung 1 ist ein fiktives Netz dargestellt, das die Situation in einem typischen Mittelspannungsnetz mit dezentraler Erzeugung widerspiegelt.

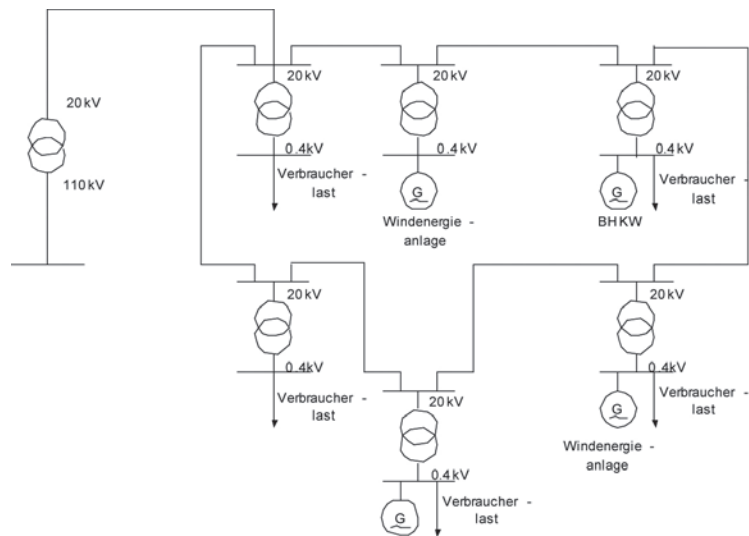


Abbildung 1: Typisches Mittelspannungsnetz mit dezentraler Erzeugung

In einem derartigen Netz können neben den vorhandenen Verbrauchern verschiedene dezentrale Erzeuger angeschlossen sein. Bei diesen Erzeugern ist zwischen nichtbeeinflussbaren Erzeugern, wie Windenergie- oder Photovoltaikanlagen und Erzeugern wie Blockheizkraftwerken oder Biogasanlagen, bei denen hier eine Beeinflussbarkeit vorausgesetzt wird, zu unterscheiden.

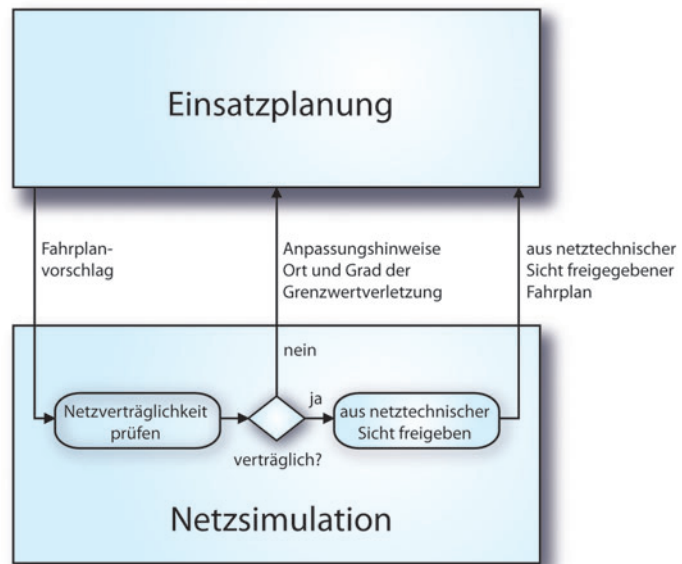
Derartige Mittelspannungsnetze wurden üblicherweise so ausgelegt, dass die angeschlossenen Verbraucher sicher versorgt werden können. Die Einbindung dezentraler Erzeugungsanlagen hat erst in jüngster Zeit aufgrund gesetzlicher Regelungen (EEG und KWKG) an Bedeutung gewonnen und wurde bei der Netzplanung daher typischerweise nicht berücksichtigt.

Bei vermehrter dezentraler Einspeisung kann sich jedoch eine völlig andere Situation im Netz ergeben, als bei der Auslegung vorausgesetzt wurde. Bei starker dezentraler Einspeisung insbesondere durch Windenergieanlagen kommt es bereits heute in einigen Mittelspannungsnetzen zu einer Umkehrung des Lastflusses mit Rückspeisungen in das vorgelagerte Hochspannungsnetz. Auch Überlastungen einzelner Betriebsmittel sowie das Verletzen von Spannungsgrenzen ist bei starker dezentraler Einspeisung möglich und muss bei der Einsatzplanung der dezentralen Erzeugungsanlagen berücksichtigt werden.

Eine solche Überprüfung der von der Einsatzplanung generierten Fahrpläne für dezentrale Erzeugungsanlagen erfolgt bei diesem Ansatz durch die Simulation des Mittelspannungsnetzes für den folgenden Planungszeitraum (typischerweise 24 Stunden). Der Ablauf dieses Überprüfungsprozesses ist in Abbildung 2 zu erkennen.

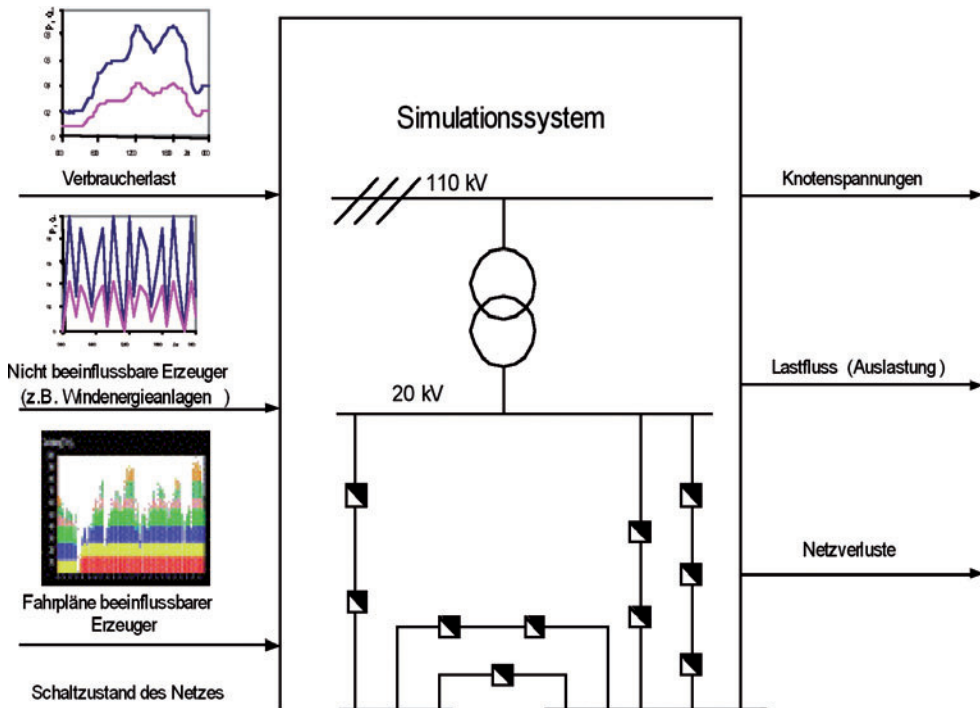
Als Eingangsdaten für diese Simulation dienen einerseits die generierten Fahrpläne der beeinflussbaren Erzeugungsanlagen als Zeitreihen für Wirk- und Blindleistung. Darüber hinaus ist eine Lastprognose (ebenfalls

Abbildung 2: Prozessablauf



Wirk- und Blindleistung) für sämtliche Ausspeisungen aus dem Mittelspannungsnetz und eine Prognose der Einspeisung aus nichtbeeinflussbaren Erzeugern erforderlich, die von externen Modulen geliefert werden. Somit stehen für die Simulation als Eingangsdaten Zeitreihen für Wirk- und Blindleistung an sämtlichen Ein- und Ausspeisungen des Mittelspannungsnetzes zur Verfügung. Weiterhin ist zur Simulation die Kenntnis des aktuellen Schaltzustandes des Netzes erforderlich, der sich zur Optimierung des Netzes gegebenenfalls innerhalb des Planungszeitraums ändern kann. Neben diesen dynamischen Daten sind im Simulationssystem auch die statischen Daten wie die Netztopologie und die Betriebsmittelparameter hinterlegt. Im Simulationssystem werden nun mit einem Lastflussrechner, der auf dem Newton-Raphson-Verfahren beruht, der Lastfluss und die Knotenspannungen im Mittelspannungsnetz berechnet. Weitere Größen, wie Auslastung der Betriebsmittel und die Netzverluste können ausgehend von diesen Ergebnissen ebenfalls berechnet werden. In Abbildung 3 sind diese Ein- und Ausgangsdaten des Simulationssystems dargestellt.

Abbildung 3: Ein- und Ausgangsdaten des Simulationssystems



Auf Grundlage der Simulationsergebnisse erfolgt dann eine Bewertung der vorgeschlagenen Fahrpläne. Treten keine Verletzungen von Netzrestriktionen, wie Auslastung der Betriebsmittel und Spannungshaltung im Netz auf, kann der Fahrplan freigegeben werden. Bei Grenzwertverletzungen können an die Einsatzplanung Informationen zum Ort und Grad der Verletzung von Netzrestriktionen zurückgegeben werden. Auf Grundlage dieser zusätzlichen Informationen erfolgt dann eine neue Planung der Fahrpläne für die dezentralen Erzeugungsanlagen. Eine weitere Möglichkeit, die die Netzsimulation bietet, besteht darin, verschiedene Szenarien mit geänderten Schaltzuständen bei konstanter Last- und Einspeisesituation und verschiedene Einspeiseszenarien der beeinflussbaren dezentralen Erzeugungsanlagen zu simulieren. Bei diesen Einspeiseszenarien können verschiedene Anlagen an verschiedenen Orten im Netz eingesetzt werden, um die Vorgaben der Disposition an die Einsatzplanung zu realisieren. Auf Basis dieser Informationen kann dann ebenfalls eine Optimierung des elektrischen Netzes vor dem Hintergrund der Minimierung der Netzverluste erfolgen.

Im neu definierten Schwerpunkt des Projekts ist eine prozessbegleitende Simulation des elektrischen Netzes bei nur geringer Messinfrastruktur das Ziel, das durch den systemtheoretischen Ansatz eines Beobachters erreicht werden soll. Grundlage dieser Untersuchungen ist die bekannte Beobachtertheorie für lineare Systeme, die für Differentialgleichungssysteme gilt und hier auf das komplexe algebraische Netzmodell des elektrischen Netzes angewendet werden soll.

Das elektrische Netz wird für die betrachteten quasistationären Zustände in den diskreten Zeitschritten nicht durch ein derartiges Differentialgleichungssystem beschrieben, sondern im Frequenzbereich durch das System der Strom- und Spannungszeiger. Die Rückführung der Messwerte kann aus Stabilitätsgründen daher nicht wie beim klassischen Beobachter über eine proportionale Verstärkung (vgl. [7]) erfolgen. Es wird daher ein Mehrgrößenregler mit Zeitverhalten eingeführt, der dynamisch aus den Abweichungen der gemessenen zu den beobachteten Vergleichsgrößen (Knotenspannungen, -ströme oder Leitungsströme) eine Korrektur der beobachteten Eingangsgrößen (Knotenwirk- und Blindleistungen) vornimmt und diese zur Steuerung des Beobachters nutzt.

Die Struktur des entwickelten Beobachters für elektrische Netze

ist in Abbildung 4 zu erkennen. Als Vergleichswerte können alternativ die komplexen Knotenspannungen, -ströme oder Leitungströme im elektrischen Netz herangezogen werden. Hier sind als Vergleichsgrößen die komplexen Knotenspannungen dargestellt. Eine erkannte Abweichung zwischen den Messwerten aus dem realen Prozess (hier: UK) und einer Simulation (hier: UK,Beo) des entsprechenden elektrischen Netzes im Rahmen des Beobachters wird dabei als Eingangsgröße (hier:  $\Delta U_K$ ) auf den Regler des Beobachters geführt. Mit dem Regler werden die Eingangsgrößen der Simulation, das sind die beobachteten Wirk- und Blindleistungen an den einzelnen Netzknoten, nachgeführt, bis die Abweichung ausgeregelt ist.

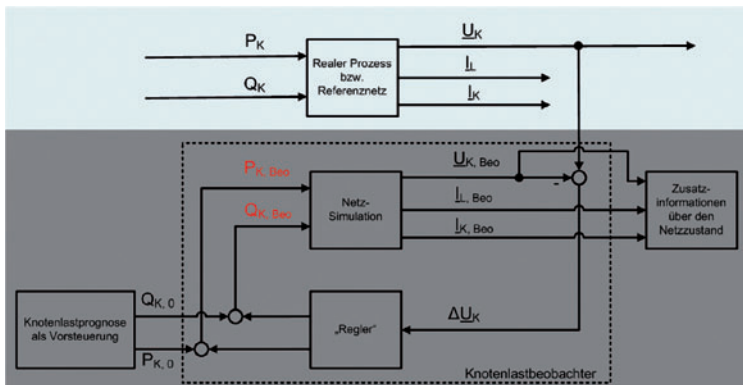


Abbildung 4: Blockschaltbild des Beobachters für elektrische Netze (Vergleichsgröße: komplexe Knotenspannungen)

Das Modell des elektrischen Netzes für die Simulation besteht dabei im Kern aus der Admittanzmatrix  $Y$ , die die Verknüpfung der Leitungen und Knoten sowie die Leitungsparameter beinhaltet. Die Lösung des Gleichungssystems der Netzgleichungen liefert als Ergebnis die Knotenspannungen  $U_{K,Beo}$ . Als Startwerte für die Knotenlasten  $P_k(0)$  und  $Q_k(0)$  werden die Ergebnisse einer vorgeschalteten Knotenleistungsprognose eingesetzt, die somit dem Beobachter als Vorsteuerung dienen. Wenn die Abweichungen zwischen den Messwerten aus dem realen Prozess und der internen Simulation des Beobachters ausgeregelt sind, können dem Beobachter die aktuellen Knotenleistungen an den einzelnen Netzknoten entnommen werden. Neben diesen Größen sind damit auch sämtliche weiteren

aktuellen Netzzustandsgrößen, wie die (komplexen) Knotenspannungen und Leitungsströme sowie alle daraus zu berechnenden Größen des elektrischen Netzes als Zusatzinformationen über den Netzzustand bekannt (vgl. Abbildung 4).

## **Beteiligte Partner**

Die Simulation des elektrischen Mittelspannungsnetzes wird als ein Teilprojekt des Gesamtprojekts „Dezentrales Energiemanagementsystem“ im Auftrag der EWE AG durchgeführt. Als weiterer Industriepartner ist in diesem Projekt die BTC AG vertreten. Die einzelnen Teilprojekte werden von den Forschungspartnern an der Uni Hannover, der TU Clausthal, der Fachhochschule Oldenburg/Ostfriesland/Wilhelmshaven, dem Zentrum für Windenergieforschung der Universitäten Oldenburg und Hannover –ForWind– und dem An-Institut OFFIS der Universität Oldenburg erledigt.

## **Literatur**

- [1] H.-P. Beck, A. Dowrueng, J. zum Hingst, M. A. J. M'Buy; Dispatcher Support System in Decentralised Renewable Energy Supply – Clausthal Energy Park -; Enviro Info, 2006, Graz.
- [2] Beck, H.-P.; zum Hingst, J.; Wehrmann, E.-A.: Identifizierung von Knotenlasten zur prozessbegleitenden Lastflusssimulation von Mittelspannungsnetzen, In: Beck, H.-P.; Brandt, E.; Salander, C.; (Hrsg.); Handbuch Energiemanagement, Band 2 / 7345, 2000-2008, (Dezember 2007).
- [3] R. Bitsch, G. Gjardy, T. Woldt; Systemintegration großflächig verteilter dezentraler Energieerzeugung großer Leistung; ew Jg. 103 (2004), Heft 26.
- [4] R. Bitsch, G. Gjardy, T. Woldt; Systemintegration großflächig verteilter dezentraler Energieerzeugung kleiner Leistung; ew Jg. 104 (2005), Heft 1-2.
- [5] D. Blümel, H. Nätisch; Programmdokumentation Programmsystem PROLEIF; Institut für Energieversorgung Dresden; 1991.
- [6] R. Flosdorff, G. Hilgert; Elektrische Energieverteilung; B.G. Teubner; 2000.
- [7] Föllinger, O.: Regelungstechnik. 8., überarbeitete Aufl. Heidelberg: Hüthig Buch Verlag.

- [8] Lunze, J.: Regelungstechnik 2, 2., neu bearbeitete Aufl. Berlin Heidelberg New York: Springer-Verlag.
- [9] B. Oswald; Netzberechnung, Berechnung stationärer und quasistationärer Betriebszustände in Energieversorgungsnetzen; VDE Verlag; 1992.

### 3.4 Druckluftspeicherung in Salzkavernen (Compressed Air Energy Storage – CAES)

*Karl-Heinz Lux, Uwe Düsterloh;  
Institut für Aufbereitung, Depo-  
nietechnik und Geomechanik*

Zentrale energiepolitische Zielsetzungen des 21. Jahrhunderts sind neben der sparsamen Nutzung von Energierohstoffen ihre effiziente Wandlung und der verstärkte Einsatz sogenannter erneuerbarer Energien. Zu den erneuerbaren Energien zählt neben Biomasse, Geothermie, Wasserkraft und Fotovoltaik/Solarthermie insbesondere die Windenergie. Durch die konsequente und nachhaltige Förderung der Windenergie in Deutschland wird ihr Beitrag am Gesamtstromverbrauch (540 Mrd. kWh) für das Jahr 2006 zu 5,6 % (30,5 Mrd. kWh) ausgewiesen [1]. Der potentielle Anteil der Windenergie beträgt gemäß Datenblatt 2006 des BWE (Bundesverband Windenergie e.V.) sogar 7 % des Bruttostromverbrauches bzw. 37,81 Mrd. kWh. Erzeugt wurde diese Energie in 2006 durch 18685 Windenergieanlagen mit einer insgesamt installierten Leistung von 20622 Megawatt. Eine graphische Darstellung der durch Windenergieanlagen im Zeitraum zwischen 1990 und 2006 in Deutschland bereitgestellten Energie zeigt Abbildung 1 [2].

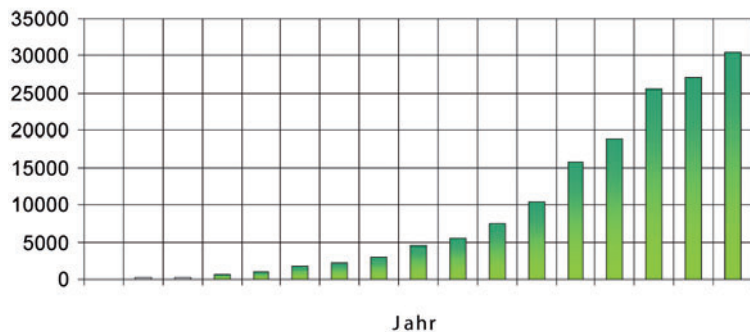


Abbildung 1: Zeitliche Entwicklung der in Deutschland durch Windenergie bereitgestellten Strommenge



Gemäß Abbildung 2 sind Deutschland mit ca. 45 % und Spanien mit ca. 25 % die Hauptträger der in Europa installierten Windleistung.

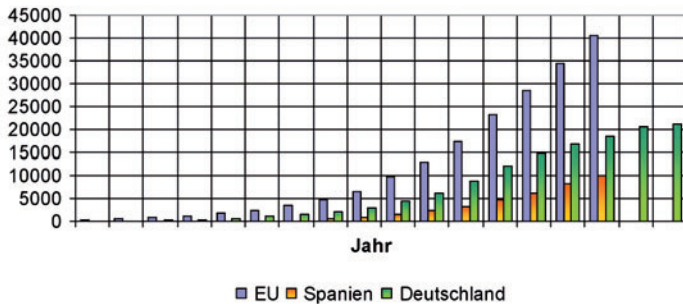


Abbildung 2: Installierte Windleistung in Deutschland, Spanien und der EU im Zeitraum zwischen 1990 und 2007 [2, 3]

Neben der energiepolitischen Bedeutung der v. g. Leistungsdaten ist vor dem Hintergrund der aktuellen Aufgaben zur Reduzierung des globalen Treibhauseffektes und der Klimaveränderung, dass durch die Einspeisung der durch Windenergie erzeugten Strommenge von derzeit 30,5 Mrd. kWh gegenüber fossilen Energieträgern ein CO<sub>2</sub>-Äquivalent von jährlich 26,1 Mio. Tonnen vermieden wird, bzw. bei Nutzung des potentiellen Anteils der Windenergie von 7 % des Gesamtstromverbrauches ein CO<sub>2</sub>-Äquivalent in Höhe von 32,37 Mio. Tonnen CO<sub>2</sub> vermieden werden könnte. Angesichts der vorstehend skizzierten Möglichkeiten zur Reduzierung des CO<sub>2</sub>-Ausstoßes ist es Ziel der Bundesregierung, den Anteil erneuerbarer Energien am Stromverbrauch bis zum Jahr 2010 auf 22 % zu erhöhen. Bis zum Jahr 2050 sollen ca. 50 % des Energieverbrauches durch erneuerbare Energien bereitgestellt werden [4]. Vorreiter des geplanten Ausbaus erneuerbarer Energien ist entsprechend der in [2] dokumentierten Statistik mit einem Anteil von zurzeit ca. 45 % die Windenergie. Sie soll gemäß den umweltpolitischen Zielen der Bundesregierung auch in den kommenden Jahren weiter ansteigen. Ein besonderer Schwerpunkt hierbei ist aufgrund der gegenüber Onshore-Anlagen deutlich besseren Windbedingungen die Entwicklung von Offshore-Windparks in der Nord- und Ostsee. Eine wesentliche Voraussetzung für die effiziente technische, ökonomische und ökolo-

Erdgaskavernenspeicher:

In Betrieb: 156

In Planung/Bau: 51

Erdölspiecherkavernen:

In Betrieb: 109

In Planung/Bau: –

Quelle: Sedlacek EEK (2006) [7].

Abbildung 3: Speicherlokationen in Deutschland



gische Nutzung sowohl der bereits bestehenden als auch der zukünftig geplanten Windenergieanlagen ist eine bedarfsorientierte Verfügbarkeit der erzeugten Windenergie. Da Windenergieanlagen witterungsabhängig und nicht bedarfsorientiert Energie produzieren, sind geeignete Zwischenspeicher für die Anpassung einer zeitlich variierenden Energieproduktion an einen zeitlich ebenfalls wechselnden Energiebedarf zu gewährleisten. Gemäß [5] ist bereits für die bestehenden Windanlagen in Starkwindzeiten eine temporäre Trennung vom elektrischen Netz erforderlich, um Netzüberlastungen zu vermeiden. Bis zum Jahr 2015 wird sich gemäß einer Studie der Deutschen Energie-Agentur (dena-Studie) [6] der Bedarf an Regelenergie zum Ausgleich von Energieangebot und Energienachfrage mehr als verdoppeln. Eine potentielle Möglichkeit zur Zwischenspeicherung fluktuierender Windenergie ist die Druckluftspeicherung in soltechnisch hergestellten Salzkavernen (Compressed Air Energy Storage – CAES). Dabei ist beabsichtigt, mit der in Starkwindzeiten bzw. bei reduziertem Energiebedarf verfügbaren Überschussenergie mittels Kompressoren Druckluft zu erzeugen, diese in Salzkavernen zu speichern und in Schwachwindzeiten bzw. erhöhtem Energiebedarf mittels Turbinen wieder in elektrischen Strom zu wandeln.

## Stand der Forschung

Die für die Zwischenspeicherung der Energie in Form von Druckluft vorgesehenen Salzkavernen werden in Deutschland seit etwa Mitte der sechziger Jahre erfolgreich für die Speicherung flüssiger und gasförmiger Energieträger, zur soltechnischen Gewinnung von Steinsalz und vereinzelt zur Ablagerung von Rest- und Abfallstoffen eingesetzt. Für das Jahr 2005 nennt die Statistik gemäß Abbildung 3 insgesamt 265 betriebene sowie weitere 51 in Planung bzw. Bau befindliche Kavernen für die Untertagespeicherung von Erdöl und

Erdgas. Angesichts der großen Anzahl erfolgreich betriebener Speicherkavernen einerseits und der langjährigen betrieblichen Praxis andererseits, ist der Stand der Technik im Bereich der geomechanischen Tragwerksplanung für Salzkavernen insgesamt gekennzeichnet durch umfangreiche Erfahrungen in der geomechanischen Dimensionierung und Tragwerksanalyse. Zu fragen ist vor diesem Hintergrund danach, wodurch sich die für die Zwischenspeicherung von Windenergie vorgesehenen Druckluftkavernen von den für die Speicherung fossiler Energieträger seit Jahrzehnten eingesetzten Erdgas- und Erdölspeicherkavernen unterscheiden bzw. welche Forschungsdefizite einer unmittelbaren Übertragung der vorhandenen Erkenntnisse zum Tragverhalten von Erdgas- und Erdölspeicherkavernen auf die Druckluftspeicherung in Salzkavernen entgegen stehen. Aus Sicht der geomechanischen Tragwerksanalyse sind diesbezüglich fünf signifikante Unterschiede zu nennen:

- (1) Die Frequenz mit der der Kaverneninhalt umgeschlagen wird (Wechsel zwischen Einspeisung = Innendruckerhöhung und Ausspeisung = Innendruckabsenkung) ist aufgrund der fluktuierenden Windenergie bei Druckluftspeichern deutlich höher als bei den regelmäßig zur saisonalen Speicherung eingesetzten Erdgasspeicherkavernen. Zur Verdeutlichung vorstehender Aussage zeigt Abbildung 4 den Innendruckverlauf (operation pattern) einer für die saisonale Speicherung von Erdgas eingesetzten Kaverne.

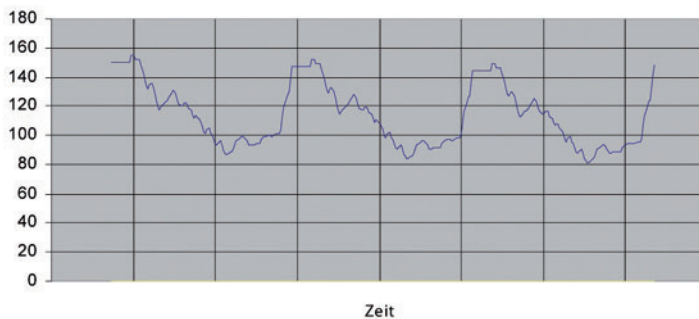


Abbildung 4: Kaverneninndruck bei saisonaler Erdgasspeicherung

Danach ist die saisonale Speicherung von Erdgas im Grundsatz gekennzeichnet durch nur einen bis wenige Ein- und Ausspeicherzyklen pro Jahr. Demgegenüber erfordert die bedarfsorientierte Zwischenspeicherung von Windenergie

in Druckluftspeichern eine signifikant höhere Frequenz von Ein- und Ausspeicherzyklen. Abbildung 5 zeigt exemplarisch den typischerweise wechselnden zeitlichen Verlauf von Windgeschwindigkeiten. Zeit- und intensitätsparell zu den stark schwankenden Windgeschwindigkeiten variiert auch die von den Windkraftanlagen bereitgestellte Energie, sodass zur Anpassung des Windenergieangebotes an den Energiebedarf eine entsprechend dynamische Zwischenspeicherung erforderlich ist. In der Konsequenz sind bei der Planung von Druckluftspeicherkavernen zyklische Wechsel zwischen maximalem und minimalem Kaverneninnendruck mit Frequenzen von wenigen Stunden bis zu einem Tag hinsichtlich ihrer Auswirkungen auf das Tragverhalten von Kavernenspeichern zu berücksichtigen.

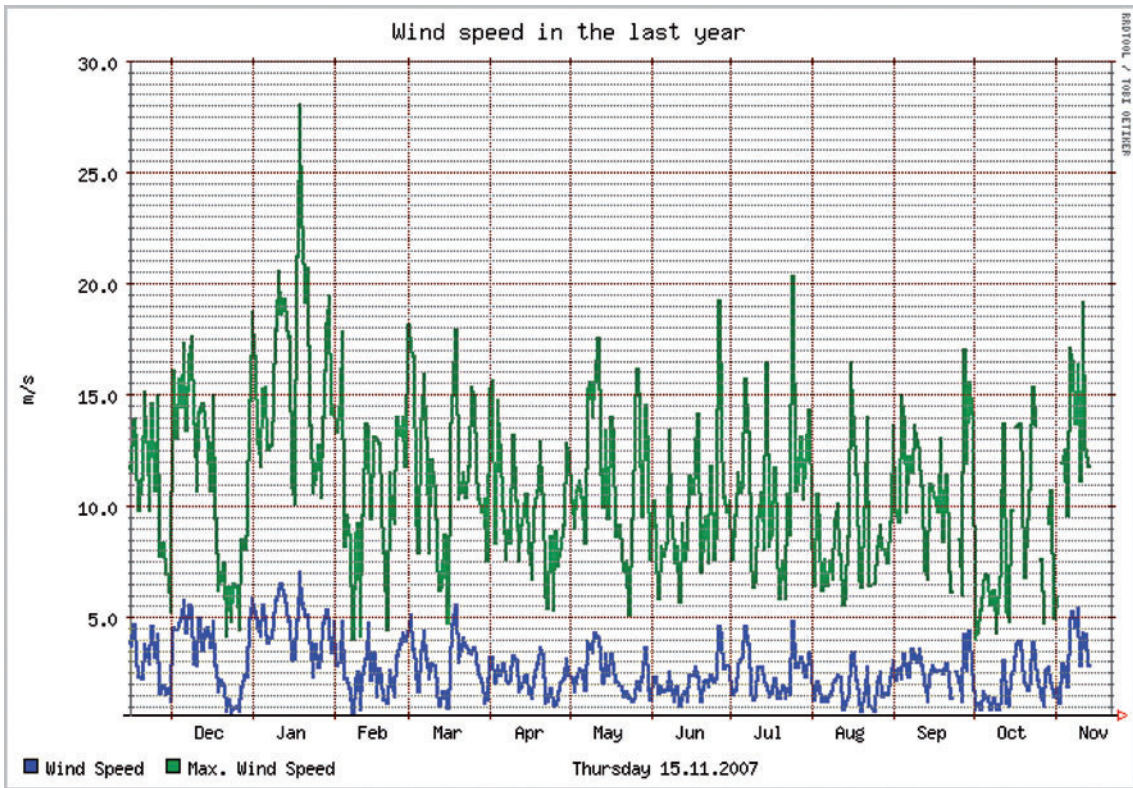
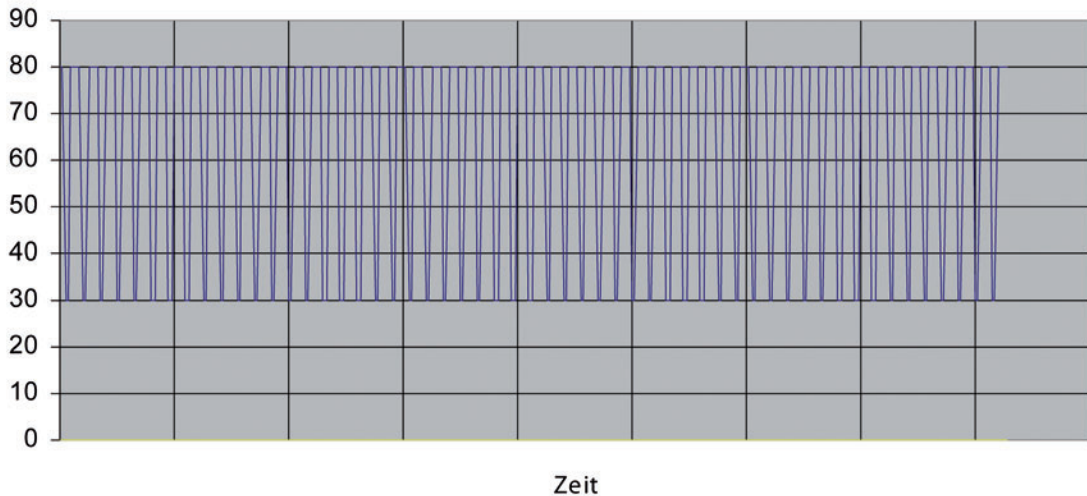


Abbildung 5: Exemplarische Darstellung wechselnder Windgeschwindigkeiten [8]

Einen typischen Betriebszyklus, wie er bei der Tragwerksanalyse von Druckluftspeicherkavernen hinsichtlich seiner Auswirkungen auf die Standsicherheit und Dichtigkeit der Kavernen zu analysieren ist, zeigt Abbildung 6. Deutlich zu erkennen ist aus Abbildung 6, dass die Anzahl der innerhalb eines Jahres bei Druckluftspeicherkavernen resultierenden Lastwechsel die innerhalb der gesamten Lebensdauer einer Kaverne zur saisonalen Speicherung von Erdöl oder Erdgas realisierten Lastwechsel deutlich übersteigt.

Abbildung 6: Kaverneninnendruck bei Druckluftspeicherung



- (2) Der wirtschaftlich sinnvolle maximale Innendruck ist bei Druckluftspeicherkavernen signifikant geringer als bei Erdgasspeicherkavernen. Bestimmend für den Maximaldruck der Druckluftspeicher ist der maximal zulässige Turbineneingangsdruck. Für zurzeit am Markt verfügbare Anlagen ist der Turbineneingangsdruck durch ein zulässiges Druckspiel von ca. 30 bar Minimaldruck bis 80 bar Maximaldruck gegeben. Die im Bereich der Erdgasspeicherung praktizierte Hochdruckspeicherung des Gases in den Kavernen mit nachgeschalteter Drosselung bzw. Entspannung auf den zulässigen Turbineneingangsdruck ist für Druckluftspeicher wirtschaftlich nicht darstellbar. Ursächlich hierfür ist, dass im Unterschied zum Erdgas, bei dem die Energie im Wesentlichen durch den Brennwert des Speichermediums bestimmt ist, die verwertbare Energie der Druckluft einzig

durch das Produkt aus Druck und Volumen gegeben ist. Die bei Drosselung des Fluiddruckes auf den Turbineneingangsdruck erforderliche Energie für die Wiedererwärmung des Gases ist gleichbedeutend mit einer Vernichtung der gespeicherten Druckenergie. Bei Erdgasspeicherkavernen wird diese Verlustenergie zu Gunsten der bei Hochdruckspeicherung deutlich größeren Kapazität des Speichers toleriert. Im Gegensatz dazu besitzt das Speichermedium Druckluft keinen Brennwert, eine ökonomisch sinnvolle Erhöhung der Kapazität des Druckluftspeichers durch Speicherdrücke oberhalb des Turbineneingangsdruckes ist somit nicht möglich, bzw. erfordert weitere Anstrengungen zur Nutzung/Zwischenspeicherung der bei Kompression der Druckluft erzeugten Wärmeenergie zur Wiedererwärmung der Druckluft bei Ausspeicherung (adiabate Speicherung).

- (3) Die maximal erforderliche Ausspeicherrate bzw. der erforderliche Volumenstrom ist bei Druckluftspeicherkavernen deutlich größer als bei Erdgasspeicherkavernen. Während bei Erdgasspeicherkavernen in der Größenordnung 100.000 m<sup>3</sup>/h bzw. in der Folge eine Innendruckabsenkungsrate von ca. 1 MPa/d im Rahmen der Tragwerksanalyse zu berücksichtigen sind, ist im Rahmen der Tragwerksanalyse für volumengleiche Druckluftkavernen eine Innendruckänderungsrate von maximal ca. 0,1 MPa/h bis 1 MPa/h, d. h. eine 20 bis 25-fach höhere Rate anzusetzen. Ursächlich für die deutlich höhere Entnahmerate, Einspeicherrate bzw. Druckänderungsrate bei Druckluftspeicherkavernen ist das Mischungsverhältnis von Verbrennungsgas und Verbrennungsluft in der Turbine. Neben der technischen Notwendigkeit einer entsprechenden Vergrößerung der Bohrungs- und Casingdurchmesser resultiert aus der Forderung nach deutlich erhöhten Druckänderungsraten eine höhere mechanische und thermische Beanspruchung des die Kaverne umgebenden Gebirges und eine entsprechend verkürzte Betriebszeit bis zum Erreichen des minimal bzw. maximal zulässigen Kaverneninnendruckes. Eine überschlägige Berechnung der für die Turbinenauslegung und den zu erwartenden Verschleiß der Förderrohrtour relevanten Luftmassenströme kann bei Kenntnis der Lufttemperatur aus den genannten Druckänderungsraten mit Gleichung (1) erfolgen:

$$p \cdot V = m \cdot R \cdot T$$

(Gleichung 1)

mit

p Druck in Pa bzw. N/m<sup>2</sup>

V Volumen in m<sup>3</sup>

m Masse in kg

R Gaskonstante Luft in J/(kg·K)

T Temperatur in K

Für eine Kaverne mit  $V = 500.000\text{m}^3$  resultiert bei Absenkung des Innendruckes von maximal  $p = 6,5 \text{ MPa}$  auf minimal  $p = 4,5 \text{ MPa}$  in 5 Stunden beispielsweise ein Luft-Massenstrom von:

$$\frac{p_1 \cdot V}{R \cdot T_1} - \frac{p_2 \cdot V}{R \cdot T_2} = \frac{\Delta m}{\Delta t} = \frac{6,5 \cdot 10^6 \text{ N/m}^2 \cdot 500000\text{m}^3}{287,2\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K}) \cdot 338\text{K}} - \frac{4,5 \cdot 10^6 \text{ N/m}^2 \cdot 500000\text{m}^3}{287,2\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K}) \cdot 308\text{K}} = 448\text{kg/s}$$

$$\frac{\Delta m}{\Delta t} = \frac{5\text{h} \cdot 3600\text{s/h}}{5\text{h} \cdot 3600\text{s/h}} = 448\text{kg/s}$$

Die in Gleichung (1) bzw. Gleichung (2) eingehenden Lufttemperaturen sind dabei durch eine thermodynamische Berechnung zu ermitteln. Ihre genaue Größe ist insbesondere abhängig vom Druckniveau, der Druckrate, der Luftzusammensetzung, der Kavernengröße, der Gebirgstemperatur und dem Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Druckluft und Gebirge.

(Gleichung 2)

- (4) Die durch Gleichung (3) gegebene isentrope Abhängigkeit zwischen Fluidtemperatur und Fluiddruck resultiert bei Verwendung von Luft als Speichermedium in einer gegenüber Erdgas deutlich größeren Temperaturänderung bei Druckänderung. Begründet ist vorstehende Aussage entsprechend Gleichung (3) durch den größeren Isentropenexponenten für Luft von  $n_{\text{Luft}} \approx 1,3-1,4$  gegenüber  $n_{\text{Gas}} \approx 1,0-1,1$  für Gas.

$$\frac{T_1}{T_2} = \left( \frac{p_1}{p_2} \right)^{(n-1)/n}$$

(Gleichung 3)

mit

$T_1, T_2$  Fluidtemperatur (K)

$p_1, p_2$  Fluiddruck (MPa)

n Isentropenexponent (-),  $n_{\text{Luft}} = 1,3-1,4/n_{\text{Gas}} = 1,0-1,1$

Für das mit Gleichung (2) gegebene Beispiel folgt aus Gleichung (3) für  $n_{\text{Luft}} = 1,4$  und  $T_1 = 308\text{K}$  für  $T_2$  eine Temperatur von  $T_2 = 1,11078 \times 308\text{K} = 342\text{K}$ . Wird dagegen Gas mit  $n_{\text{Gas}} = 1,1$  komprimiert, so berechnet sich  $T_2$  zu  $T_2 = 1,034 \times 308\text{K} = 318,5\text{K}$ . Auch wenn die thermodynamische Berechnung der Fluidtemperatur entsprechend den vorstehenden Ausführungen von einer Vielzahl weiterer Parameter bestimmt wird, zeigt das vorstehende Beispiel eindrucksvoll, dass allein durch den Wechsel des Speichermediums von Gas zu Luft die thermisch induzierten Beanspruchungen unter sonst gleichen Randbedingungen bei Druckluftspeicherkavernen deutlich größer sind, als bei Erdgasspeicherkavernen.

- (5) Unter Verweis auf die Ausführungen unter (3) führen die gegenüber Erdgasspeicherkavernen insgesamt deutlich größeren Volumenströme bei Druckluftspeicherkavernen zu einem entsprechend vergrößerten Verschleiß der Förderrohrtour. In der Konsequenz ist innerhalb der Lebensdauer der Druckluftspeicherkavernen die Notwendigkeit einer Erneuerung des Förderrohrstranges als regulärer Betriebslastfall und nicht wie bei Erdgasspeicherkavernen als Sonderlastfall zu kalkulieren. Geomechanisch relevant und zu berücksichtigen ist der Wechsel der Förderrohrtour insofern, als für den Austausch die Kaverne wenige Monate unter atmosphärischem Druck gefahren werden muss, d. h. der zur Gewährleistung der langfristigen Standsicherheit gebirgsmechanisch festgelegte minimale Innendruck (= Ausbaustützdruck) wird auf Null reduziert. Erfahrungen mit dem Tragverhalten tief liegender Kavernen unter atmosphärischem Innendruck sind nicht bekannt, sodass bisher nur Rückschlüsse aus dem Tragverhalten untertägiger Grubenbaue des Salzbergbaus und der im Teufeniveau zwischen 959 m und 996 m in der Schachanlage Asse bergmännisch aufgefahrenen Versuchskaverne ( $V \approx 10.000 \text{ m}^3$ ) hilfsweise herangezogen werden können [9]. Für den Bereich rechnerischer Untersuchungen zum Tragverhalten von Erdgasspeicherkavernen bleibt festzuhalten, dass abgesehen von wenigen, eher grundsätzlichen Untersuchungen zum Sonderlastfall  $p_i = 0 \text{ MPa}$  ein Stand der Technik noch nicht existiert.



## Forschungsaufgaben

Aus den unter (1) bis (5) zusammengestellten besonderen Anforderungen einer Druckluftspeicherung in Salzkavernen resultieren signifikant höhere Beanspruchungen in dem die Kaverne umgebenden Salzgebirge durch die Druckwechsel selbst und durch die induzierten Temperaturgradienten im konturnahen Salzgebirge. Ziel der im Rahmen der Konzeptstudie durchzuführenden rechnerischen Analysen zum Tragverhalten von Druckluftkavernen ist es vor diesem Hintergrund, die Konsequenzen der gegenüber Gaskavernen veränderten Belastungsrandbedingungen auf das resultierende Spannungs- und Verformungsfeld in Raum und Zeit zu quantifizieren und hinsichtlich ihrer Zulässigkeit bzgl. Standsicherheit, Dichtigkeit und Gebrauchsfähigkeit zu bewerten. Für die hierfür erforderliche Sensitivitätsanalyse sind zunächst die für Auslegung und Betrieb zukünftiger CAES-Kraftwerke relevanten Randbedingungen zu formulieren. Dabei sind zu unterscheiden die generellen Zielstellungen der Tragwerksanalyse [9] mit

- statischer Stabilität (Standsicherheit),
- Dichtheit sowie
- akzeptablen Tagesoberflächenabsenkungen (Drittsschutz)

und die gebirgsmechanisch relevanten Einflussgrößen auf das Tragverhalten, die gleichzeitig die zentralen Parameter des geotechnischen Kavernenentwurfs darstellen:

- Kavernengeometrie und Kavernenvolumen,
- Kavernentiefe,
- minimaler Betriebsdruck,
- maximaler Betriebsdruck,
- Abstand zwischen den Kavernen,
- Abstand zu Deck- und Nebengebirge,
- Konvergenz,
- Betriebsablauf bei wiederholten zyklischen Belastungen.

Das Tragverhalten von Salzkavernen wird danach wesentlich bestimmt durch

- die Kavernengeometrie und das Kavernenvolumen (Kavernenhöhe, Kavernendurchmesser, Ausbildung von Kavernendach- und Kavernensohlbereich),
- die Kavernenteufe, da mit zunehmender Teufe das Gewicht der überlagernden Deckgebirgsschichten proportional zur Gebirgswichte ansteigt,
- den minimalen Kaverneninnendruck, da er im Sinne eines natürlichen Ausbaus als Stützdruck auf die Kavernenkontur wirkt,
- den maximalen Kaverneninnendruck, da bei Überschreitung eines maximal zulässigen Wertes eine Migration des Fluids (Gas, Luft, Öl, etc.) in das umgebende Gebirge und/oder ein hydraulisches Fracen des Gebirges zu besorgen sind,
- den Abstand zwischen einzelnen Kavernen einerseits und zwischen den Kavernen und dem wasserführenden Nebengebirge, dem Gipshut und evtl. vorhandenen geologischen Elementen (Störungen, Auf- und Abschiebungen, etc.) andererseits,
- die Kavernenfahrweise, d. h. die zeitliche Abfolge von Ein- und Ausspeicherung, die Rate mit der bei Ausspeicherung der Kaverneninnendruck abgesenkt bzw. bei Einspeicherung der Kaverneninnendruck angehoben wird und die Anzahl der Ein- und Ausspeicherzyklen pro Zeiteinheit und
- die zulässige Kavernenkonvergenz, da die in Folge des Kriechverhaltens der Salzgesteine während des Kavernenbetriebes induzierte Konvergenz einerseits gleichbedeutend ist mit einem Hohlraumverlust (Volumenreduktion, d. h. Reduktion des verfügbaren Speichervolumens) und andererseits in Oberflächenabsenkungen resultiert, die hinsichtlich ihrer Zulässigkeit lokationsbezogen zu bewerten sind (Verlässung, Nutzungsanforderungen an Tagesoberfläche).

Da abgesehen von der Konvergenz alle vorstehend genann-

ten Parameter bestimmend sind für die zu führenden Nachweise zur Standsicherheit und Dichtigkeit, müssen ihre Auswirkungen auf das Tragverhalten von Salzkavernen im Rahmen der gebirgsmechanischen Analyse berücksichtigt werden. Vorstehende Aussage gilt unabhängig davon, ob das Tragverhalten von Erdöl- oder Erdgasspeicherkavernen zu analysieren ist, oder, wie im vorliegenden Fall, das Tragverhalten von Druckluftspeicherkavernen zu untersuchen ist. Von entscheidender Bedeutung ist somit nicht die Frage nach der Relevanz oder der möglichen Vernachlässigung einzelner Einflussgrößen, sondern vielmehr die Art und die Größe der einzelnen Parameter. Dabei ist zu berücksichtigen, dass im Unterschied zu standortkonkreten Projekten im Rahmen der Konzeptstudie weder die Kavernengeometrie und das Kavernenvolumen noch die Teufenlage und der Gebirgsaufbau bestimmt sind. Die Anzahl der im Rahmen der Sensitivitätsanalyse potentiell zu untersuchenden Lastfälle wird hierdurch deutlich größer als diejenige, die bei Vorgabe konkreter Standortdaten zielführend ist.

Zusätzlich zu den vorstehend zusammengestellten gebirgsmechanischen Einflussgrößen auf das Tragverhalten von Salzkavernen von besonderer Bedeutung sind das Spannungs-Verzerrungs-Verhalten und das Kriechverhalten des die Kavernen umgebenden Salzgebirges. Steinsalz ist charakterisiert durch ein ausgeprägt nicht lineares, zeitabhängiges und rate-sensitives Materialverhalten. Mit Verweis auf den Parameter „Betriebsfahrweise“ ist besonders zu berücksichtigen, dass das jeweils aktuelle Materialverhalten von Steinsalz nicht unabhängig von der Belastungsvorgeschichte ist, d. h. insbesondere, dass das Kriech- und Schädigungsverhalten von Steinsalz durch ausgeprägte Memory-Effekte charakterisiert ist.

Aufbauend auf der vorstehend skizzierten Vielzahl von Einflussgrößen auf das Tragverhalten von Salzkavernen im Allgemeinen und Druckluftspeicherkavernen im Besonderen sind nachfolgend die geomechanischen Anforderungen an die Generierung der numerischen Berechnungsmodelle und die im Rahmen der Sensitivitätsanalyse zu berücksichtigenden Parameter festzulegen. Dazu gehören insbesondere die Festlegung einer für die Speicherung von Windenergie geeigneten Kavernenkonfiguration hinsichtlich Kavernengeometrie, Kavernenvolumen und Kavernenteufe als auch die Einschätzung

relevanter Betriebsabläufe, Belastungsrandbedingungen und physikalischer Kennwerte für die rechnerische Abbildung des Gebirgsverhaltens.

Im Rahmen der grundlegenden Untersuchungen zum Tragverhalten von Druckluftspeichern wurden rechnerisch und laborativ untersucht:

- (a) der Einfluss thermischer Einwirkungen auf das Tragverhalten von Druckluftspeicherkavernen,
- (b) der Einfluss variiertter Kavernenteufen und Kaverneninnendrucke auf das Tragverhalten von Druckluftspeicherkavernen,
- (c) der Einfluss einer variierten Druck- und Temperaturrate auf das Tragverhalten und
- (d) der Einfluss von Stillstandszeiten auf das Tragverhalten zyklisch beanspruchter Druckluftspeicherkavernen.

### **Fazit und Ausblick**

Als Ergebnisse der grundlegenden Untersuchungen zum Tragverhalten von Druckluftspeicherkavernen können zusammengestellt werden:

- (1) Die bei zyklischer Ein- und Ausspeicherung von Druckluft induzierte Erwärmung (Kompressionswärme) bzw. Abkühlung (Dekompressionswärme) des Speichermediums induziert im umgebenden Steinsalzgebirge thermische Spannungen.
- (2) Die Erwärmung bzw. Abkühlung der Druckluft bei zyklischer Ein- und Ausspeicherung kann in erster Näherung mit  $\Delta T/\Delta p = 1,3^\circ\text{C}/\text{bar}$  angenommen werden.
- (3) Die Größe der im Steinsalzgebirge induzierten Thermo- spannungen ist bei gegebener Drucklufttemperatur wesentlich abhängig vom Wärmeübergangskoeffizienten zwischen Druckluft und Steinsalzgebirge, der Wärmeleitfähigkeit des Steinsalzgebirges, der Einwirkungsdauer der Drucklufttemperatur und den elastischen Verformungsei-

genschaften des Steinsalzgebirges. Von diesen Parametern besonders sensitiv einzuschätzen ist der Wärmeübergangskoeffizient, da hinreichend belegbare Informationen über seine zahlenmäßige Größe nicht vorliegen bzw. Angaben aus der Literatur einen Faktor von  $f \approx 100$  für die Bandbreite zwischen Minimal- und Maximalwert ausweisen.

- (4) Aus der Überlagerung der thermisch induzierten Spannungen mit den mechanisch induzierten Spannungen resultiert bei Ausspeicherung von Druckluft bzw. Dekompression/Abkühlung im Bereich der Kavernenkontur ein Spannungsfeld, bei dem die minimale Hauptspannung signifikant kleiner ist, als der Kaverneninnendruck. Abhängig von Kavernenteufe, Kaverneninnendruck und der innerhalb eines Lastwechsels zwischen Ein- und Ausspeicherung realisierten Druckamplitude folgt aus der Überlagerung der bei Abkühlung des Steinsalzgebirges induzierten Thermo-Zugspannungen mit den mechanisch induzierten Druckspannungen eine Zugbeanspruchung des konturnahen Steinsalzgebirges.
- (5) Für die im Rahmen der Projektstudie rechnerisch analysierte Kavernenkonfiguration können im konturnahen Steinsalzgebirge Zugspannungen von  $\sigma_z > 1$  MPa nur dann ausgeschlossen werden, wenn die Kavernendachteufe  $zD \geq 900$  m und die Druckamplitude  $\Delta_p \leq 4$  MPa ist. Für weitere Untersuchungen ist hierbei von Bedeutung, dass die Zugbeanspruchung ausschließlich thermisch, d. h. nicht mechanisch induziert ist. Ob bzw. in wie weit thermisch induzierte Zugrisse bzgl. des Gebirgstragverhaltens in gleicher Weise zu bewerten sind wie mechanisch induzierte Zugrisse, ist noch nicht abschließend geklärt.
- (6) Die Möglichkeit einer weitgehenden Minimierung der Kavernenkonvergenz (Verlust von Speichervolumen) durch Reduktion der Kavernenteufe ist mit Verweis auf die bei abnehmender Kavernenteufe zunehmenden Zugspannungen im konturnahen Steinsalzgebirge begrenzt. In der Konsequenz ist für standortkonkrete Projekte ein Optimum zwischen den Forderungen nach weitgehender Vermeidung von Zugbeanspruchungen und Begrenzung der Kavernenkonvergenz abzuleiten.

- (7) Neben einer Bewertung der rechnerisch ermittelten Zugspannungen auslegungsrelevant sind die über die Betriebszeit akkumulierten Vergleichsverzerrungen und die minimalspannungsabhängige Ausnutzung der Bruch- und Dilatanzfestigkeit des Steinsalzgebirges. Für die im Rahmen der Projektstudie analysierten Betriebslastfälle konnte gezeigt werden, dass bei Kavernendachteufen von größer  $zD \approx 900$  m zeitabhängige Schädigungen des konturnahen Steinsalzgebirges in Folge Überschreitung der angesetzten Dilatanzfestigkeit nicht ausgeschlossen werden können bzw. die akkumulierten Kriechverzerrungen die im Speicherkavernenbau üblichen Grenzwerte nach ca. ein bis zwei Betriebsjahren erreichen. Für standortkonkrete Projekte kann als Konsequenz hieraus die Notwendigkeit abgeleitet werden, die Analyse des Tragverhaltens unter Verwendung von Stoffmodellen und Materialparametern mit Berücksichtigung des Schädigungsverhaltens durchzuführen.

Als wissenschaftliche Defizite bzgl. einer hinreichend belegbaren Dimensionierung von Druckluftspeichern sind aus geomechanisch-geohydraulischer Sicht zu nennen:

- (1) Das Kriechverhalten von Steinsalz bei zyklisch wechselnder Beanspruchung ist bisher nicht untersucht. Für erforderlich erachtet wird die laborative Bestimmung des transienten und stationären Kriechvermögens von natürlichen Steinsalzen bei Variation der Zykluszeit, der Temperatur, des Belastungsniveaus und der insgesamt realisierten Verzerrung.
- (2) Das Festigkeitsverhalten von Steinsalz bei Temperaturen von  $T < 20^\circ\text{C}$  ist bisher nicht hinreichend untersucht. Für erforderlich erachtet werden triaxiale Kompressions- und Extensionsversuche bei variierter Minimalspannung und abgesenkter Temperatur. Die Versuche sind sowohl bei konstanter als auch zyklischer Belastung durchzuführen. Über die Ermittlung von Bruchfestigkeit und Bruchverformung hinaus sind auch die Dilatanzfestigkeit und die Schädigung versuchsbegleitend zu ermitteln.
- (3) Das schädigungsinduzierte Kriechen von Steinsalz bei abgesenkter Temperatur ist bisher weder für konstante noch für zyklische Beanspruchungen untersucht. Für erforderlich

erachtet werden mehrstufige Kriechversuche mit Variation der Minimalspannung und des Beanspruchungsniveaus.

- (4) Die Untersuchungen zur hydraulischen und mechanischen Wirksamkeit thermisch induzierter Risse besitzen bisher nur exemplarischen Charakter. Für erforderlich erachtet werden Laboruntersuchungen an axial gelochten Prüfkörpern mit zyklisch wechselnder Druck- und Temperaturbelastung für variierte Beanspruchungen (Druck- und Temperaturzyklen im Innendruckkreislauf, Axialspannung, Radialspannung und Temperatur im Mantelkreislauf).
- (5) Für eine hinreichend quantitative Bestimmung des Wärmeübergangskoeffizienten für das System „Druckluft-Kavernenkontur-Steinsalzgebirge“ unter Beachtung der Strömungsverhältnisse sind geeignete Untersuchungen durchzuführen. Denkbar wäre diesbezüglich eine Modifikation der in Abschnitt 3.1.6 skizzierten Versuchsanlage dahingehend, dass das bisher verwendete Strömungsmedium Hydrauliköl durch Druckluft substituiert wird.
- (6) Aufbauend auf den mit (1) bis (5) ermittelten Ergebnissen zum Materialverhalten natürlicher Salzgesteine bei thermomechanisch gekoppelter Beanspruchung, sind schließlich rechnerische Untersuchungen zum Tragverhalten von Druckluftspeichern unter Berücksichtigung des Schädigungsverhaltens durchzuführen.

Durch die in Abschnitt 4 analysierten Betriebslastfälle noch weitgehend unberücksichtigt bzw. nur ansatzweise untersucht sind u. a.

- die Auswirkung einer der zyklischen Ein- und Ausspeicherung vorgeschalteten Simulation der Solphase mit entsprechender Abkühlung der initiellen Gebirgstemperatur,
- eine Berücksichtigung zwischenzeitlicher „Ruhephasen“ in Folge einer lang anhaltenden Windflaute oder eines Überangebotes von Windenergie (vgl. Berechnungslauf 16),
- die Auswirkungen einer variierten Druck- und Temperaturrate auf das Tragverhalten und

- der für Wartungsarbeiten evtl. planmäßig vorzusehende Betriebslastfall „atmosphärischer Innendruck“.

### **Beteiligte Partner**

KBB Underground Technologies

### **Literatur**

- [1] BWE – Bundesverband Windenergie e.V.: Datenblatt Windenergie in Deutschland 2006, 10.02.2007. [www.windenergie.de/de/statistiken](http://www.windenergie.de/de/statistiken).
- [2] Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit: Umweltpolitik – Erneuerbare Energien in Zahlen – nationale und internationale Entwicklung, Januar 2007. [www.erneuerbare-energien.de](http://www.erneuerbare-energien.de).
- [3] DEWI GmbH – Deutsches Windenergie-Institut: Windenergie in Deutschland für das 1. Halbjahr 2007, 30.06.2007. [www.dewi.de](http://www.dewi.de).
- [4] Die Bundesregierung: Perspektiven für Deutschland – Unsere Strategie für eine nachhaltige Entwicklung, 17.04.2002. [www.bundesregierung.de](http://www.bundesregierung.de).
- [5] FIZ Karlsruhe Hrsg.: BINE Informationsdienst – Druckluftspeicherkraftwerke, projektinfo 05/07, ISSN 0937 – 8367, Mai 2007. [www.bine.info](http://www.bine.info).
- [6] Deutsche Energie-Agentur GmbH: Energiewirtschaftliche Planung von Netzintegration von Windenergie in Deutschland an Land und Offshore bis zum Jahr 2020, Köln, 24.02.2005. [www.wind-energie.de/de/themen/windenergie-im-stromnetz/dena-netzstudie](http://www.wind-energie.de/de/themen/windenergie-im-stromnetz/dena-netzstudie).
- [7] Sedlacek, R.: Untertage Gasspeicherung in Deutschland, Erdöl, Erdgas, Kohle, 122. Jg., Heft 11, Nov. 2006. [www.lbeg.niedersachsen.de](http://www.lbeg.niedersachsen.de).
- [8] Institut für elektrische Energietechnik, TU-Clausthal: Windgeschwindigkeit im letzten Jahr, 15.11.2007. [www.wetter.iei.tu-clausthal.de](http://www.wetter.iei.tu-clausthal.de).
- [9] Lux, K.-H.: Gebirgsmechanischer Entwurf und Felderfahrungen im Salzkavernenbau, Ferdinand Enke Verlag, Stuttgart, 1984.
- [10] KBB Underground Technologies, Hübner, S.: Möglicher Betrieb von CAES-Anlagen, Hannover, 2007.



### 3.5 Mathematical Modelling of Flameless Combustion

We use several RANS-based models with simplify chemistry and reactor network models that simplify the flow but account for comprehensive chemistry mechanisms to analyze the semi-industrial scale experiments on flameless (mild) combustion of natural gas. The experimental burner features a strong (high momentum) comburent jet and two weak (low momentum) natural gas jets. Numerous publications have shown the inability of various RANS-based mathematical models in predicting the structure of the weak jet. We have proven that the failure is in error predictions of the entrainment and therefore is not related to any chemistry sub-models as it has been postulated. The novelty of the paper is in showing that little combustion occurs within the natural gas jet. The temperature increase within the fuel jet results almost exclusively from the entrainment of the hot combustion products. The process taking place within the fuel jet can be named as “pre-conditioning” of the fuel and it results in a mixture containing around 6 % of combustibles, 2 % of oxygen and 92 % of inert gases (CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, N<sub>2</sub>). The mixture does not ignite until it mixes into the comburent jet. Consequently, there is no NO formation within the fuel jet and its presence there is exclusively due to the entrainment. This is indeed, a novel interpretation of “what goes on” in the most popular implementation of the flameless (mild) combustion that includes a combination of weak- and strong-momentum jets.

The prompt route is the dominant NO-formation mechanism. Most of the NO is formed in the thin elongated region (located at the interception of the jets) and downstream in the furnace. Several RANS-based models equipped with various NO-post-processors have been used in this study and all of them predicted well the furnace NO-emissions. However they have not identified the correct NO formation mechanisms.

#### Introduction

Our paper is concerned with rapidly developing combustion technology [1] that was given different names; high temperature air combustion (HTAC [2]), mild combustion [3, 4] or flame-

*Marco Mancini, Patrick Schwöppe, Roman Weber;  
Institut für Energieverfahrenstechnik und Brennstofftechnik*

*Stefano Orsino;  
Fluent Inc. Lebanon, USA*

less oxidation [5]. The essence of this technology is that fuel is oxidized in an environment that contains a substantial amount of inert (flue) gases and some, typically not more than 3-5 %, oxygen. For clean gaseous fuels that do not contain any fuel-bound nitrogen, this results in very low NO<sub>x</sub> emissions even if the combustion air stream is preheated to temperatures in excess of 1000 °C. In recent experiments [6] where a coal (1.7 % N) has been fired, drastic reductions in NO<sub>x</sub> emissions have also been observed. This rather surprising discovery which is in contradiction with the common perception that flue gas addition is ineffective in reducing fuel-NO, has already initiated a number of research projects. Although flameless/mild combustion has been invented by combustion engineers designing industrial burners, a number of research projects have recently been launched on the application of this novel combustion technology to gas turbines, as exemplified by Ref. [7, 8, 9].

There are several methods of realization of this combustion technology as underlined in Ref. [1, 4] and two, perhaps the most common ones, are described below. In the first method (see Ref. [1, 2, 10]), the combustion air is provided by a central, strong (high momentum) air jet that is surrounded by a number of weak (low momentum) fuel jets (in industrial applications typically two jets are used). These weak fuel jets are positioned away from the central air jet in order to inject the fuel into recirculated combustion products and by doing so, to dilute the fuel before it mixes with the combustion air stream. In the Canadian Gas Research Institute (CGRI) experimental burner the interaction between the strong and the weak jets has been optimized further by altering the spacing and injection angles [11, 12]. The second method, is recognized in the literature as a “classical” method of achieving flameless combustion [5]. It can be characterized by a central fuel jet and a number of air jets positioned in the relative vicinity of the central fuel jet. Typically, all these jets possess a similar momentum. In industrial applications of mild combustion, the combustion air stream is preheated and the preheat temperatures are often as high as 1300°C. Kumar et al. [13] have recently demonstrated perhaps the first application of mild combustion using ambient temperature air.

Mathematical modeling of mild combustion has become a subject of considerable attention. It has been postulated [2, 3, 4] that

this novel combustion technology requires new combustion mechanisms. There has been suggested that even for such simple fuels like methane or natural gas, the known radical chemistry schemes for hydrocarbon combustion have to be modified and validated particularly for low-temperature chemical kinetics. To this end detailed measurements of non-premixed methane and hydrogen jet flames in a diluted hot co-flow [14] have been undertaken in order to resolve the low-temperature kinetics dilemma. It has been observed that “a different mechanism and chemical pathway is apparent in these (mild) flames when compared with standard atmosphere flames, especially for the OH and NO formation” [14]. Subsequent mathematical modeling of these (methane) jet flames [15] using GRI Mech 2.11 (including NO<sub>x</sub> chemistry) and the Conditional Moment Closure resulted in good quality predictions. The success of the mathematical model has been attributed to the fact that the conditional fluctuations of reactive scalars were small enough for the first order closure of conditional mean reaction rates. Choi & Katsuki [16] have carried out a chemical kinetics study using GRI Mech. 2.11 applied to a two-dimensional counter-flow laminar flat flame configuration and observed that “the NO was produced through both thermal and prompt NO mechanisms” [16].

Predicting performance of industrial devices that utilize the mild combustion principle is complex since in addition to considerations on combustion chemistry, the fluid flow and mixing between fuel, oxidizer and combustion products have to be considered. The publications leading to both the development and validation of such models can be split into those concerned with the strong jet-weak jet design and those concerned with a multiplicity of jets of similar momentum. In conjunction with the work of the first group, a unique set of measured data was generated [1,17]. The availability of these data initiated a number of publications aiming at both the development and validation of several mathematical models. In all these publications, the Reynolds-Averaged Navier-Stokes (RANS) approach was retained however the works differed in the turbulence models or in turbulent-combustion interaction sub-models used or in both. In Mancini et al. [18] the standard  $k-\epsilon$  turbulence model was used together with three combustion sub-models; the eddy-break-up model with a two-step reaction scheme, the eddy-

dissipation concept model with chemical equilibrium and the pdf/mixture fraction model with non-adiabatic look-up tables (for details of the NO post-processor see Ref. [18] ). With the exception of the fuel jet the computations resulted in predictions of good quality. The predicted NO<sub>x</sub> furnace emissions were in very good agreement with the measured values for a number of combustion-model/NO<sub>x</sub> post-processor combinations. However, the models failed to predict the structure of the weak jet. More precisely, within the fuel jet, the computed temperatures were typically 500-600°C lower than the measured values and the predicted CH<sub>4</sub>, CO<sub>2</sub> and CO concentrations differed by a factor of 2-3 from the measured values. Dong [19] used a k-ε based RANS model equipped with a mixture fraction/pdf sub-model to simulate the same experiments [1,17] and his predictions suffered exactly the same deficiency. More recently, Awosope et al. [20, 21] used Borghi diagram [22] to identify the combustion regimes of the considered experiments [1,17]. They used a combustion sub-model that included the transport equations for the mean mixture fraction, its variance and the mean reaction progress variable. The source term in the reaction progress variable was modeled following the work of Lindstedt & Vaos [23] which includes the influence of strain on the flamelets by small eddies. The flamelet functions were obtained from a priori computed lookup table. Similarly to the models of Mancini et al. [18] and Dong [19], the model of Awosope et al. [20, 21] also failed in predicting the structure of the weak fuel jet. Notwithstanding the fact that perhaps a more thorough analysis of the applicability of the above listed chemistry-turbulence models to the IFRF experiments [1,17] is required, as initiated by Awosope [20, 21], one cannot refrain from observing that the more sophisticated the chemistry-turbulence model is, the worse are the predictions of the low momentum fuel jet. We wish to complete this discussion by citing the work of Fleck et al. [24] which also underlines the inability of predicting the near burner zone properties of the Canadian GRI burner comprising a multiplicity of weak and strong jets. There exist publications aiming at predicting the performance of mild/flameless combustion realized by a multiplicity of jets of similar momentum as exemplified by papers of Coelho & Peters [25] and Tabacco et al. [26]. Here the overall model performance is assessed using the furnace exit values since no measurements in the near field of individual jets are available. Until

such measurements become available, it will remain unclear whether the mathematical models predict correctly the structure of individual jets.

## Objectives

The goal of this paper is to resolve the issue of the poor quality predictions in the weak fuel jet. The main question is whether (new) low-temperature chemical kinetics schemas are really needed to improve the predictions in this flame region. Such a significant discrepancy between the predictions and the measurements in the fuel jet should have resulted in error predictions of the furnace exit NO emissions. To the contrary, all the NO post processors have predicted the furnace NO exit values with a relatively good accuracy. To explain this rather surprising mathematical model effect we wish to perform a comprehensive analysis of the NO formation and destruction mechanisms. We wish to identify the NO formation regions and the mechanisms of its formation. To this end we use the IFRF measurements [1,17], several RANS models and the radical chemistry mechanism (GRI Mech. 3.0 [27]) incorporated into the Chemkin code.

## The measured data

The in-furnace measured data used in this paper originate from the IFRF experiments [1, 17] carried out in a refractory lined furnace with a 2 m x 2 m cross-section and a length of 6.25 m (see Figure1 in Ref [17]). The furnace was equipped with one (0.58 MW thermal input) burner operated under steady state conditions. The burner consisted of a central combustion air (comburent) jet and two natural gas injectors positioned 28cm away from the central jet. A gaseous stream, of 1573 K temperature, containing 19.5 % wet O<sub>2</sub>, 59.1 % wet N<sub>2</sub>, 15 % wet H<sub>2</sub>O, 6.4 % wet CO<sub>2</sub>, was supplied into the furnace through the central jet. This comburent stream (830 kg/h) contained also 94 vppm of NO calculated on wet basis (110 vppm, dry). The volumetric composition of the furnace exit gases was 1.6 % O<sub>2</sub>, 27.3 % H<sub>2</sub>O, 13.7 % CO<sub>2</sub>, 57.7 % N<sub>2</sub> and 102 ppm of NO (140 vppm, dry). The “net” NO production rate in the furnace is 0.06 g/kg of fuel. Detailed mapping of the turbulent velocities, temperatures, chemical composition (O<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>, NO and NOx) as well as radiation has been reported elsewhere [1].

## Mathematical models

### 4.1 The RANS mathematical models

For predicting the measured data we use several RANS models. The turbulence is modeled using either a standard k-epsilon model or a RNG k- $\epsilon$  model (more elaborate Reynolds Transport Models were also tested and only minor changes were observed). We use three combustion sub-models listed in Table 1. The eddy-break-up sub-model with a two-step reaction scheme [28] is the most primitive one (model-1 in Table 1). The second sub-model (the standard Fluent5 CFD code) is based on the mixture-fraction transport equation that is equipped with non-adiabatic look-up tables (model-2 in Table 1). In the third sub-model, the turbulent fluctuations are switched off but otherwise its formulation is identical to model-2. To each of the above combustion sub-models the same NO<sub>x</sub>-post processor is appended. The thermal and prompt NO are calculated in the same way as in Ref. [28] with no changes to any of the model parameters and constants. However an extra NO-reburning path following the work of Chen [29] and De Soete [30] was added as explained in Ref. [18]. Although we use the Chen NO reburning model we realize that in the light of the present knowledge of NO precursors [31] the model does not have a firm scientific basis.

	Measurements	Predictions using model No./run No.				
	[1, 17]	1	2	3	4	5
Furnace Exit Temp. (K)	1493	1519	1498	1489	1480	1489
Furnace Exit O <sub>2</sub> (% vdry)	2.2	1.8	2.14	2.2	2.1	2.19
Furnace Exit NO (ppmvd)	140	137	130	129	140	135
Furnace Exit CO (ppmvd)	0	0	8	10	15	13
Peak Temp. (K)	1808	1948	1973	1922	1770	1840
Peak H <sub>2</sub> (% vdry)	1.97	9	13.1	10.9	2.5	2.0
Peak CO (% vdry)	3.23	21	33	28	3.1	2.8

Table 1. Measured and predicted values

- 1 IFRF-EBU [28] model;
- 2 Fluent5-pdf(mixture fraction) [18],
- 3 Fluent5-pdf(mixture fraction) –fluctuations of the mixture fraction have been switched off,
- 4 Reactor Network Model with GRI 3.0 mechanism and entrainment calculated using RANS model-1,
- 5 Reactor Network Model with GRI 3.0 mechanism and entrainment estimated from the measured data.

### Series of perfectly stirred reactors

In order to provide the background for the detailed analysis of chemistry we have subdivided the flow into a network of Perfectly Stirred Reactors (PSRN). We have divided the strong central jet into ten reactors marked in Figure1 as R1 to R10. Each reactor is of the same length and its width is determined by the position of the zero axial velocity that is determined by the jet expansion angle. The location of this zero axial velocity line is known from both the measurements and the RANS predictions. The weak natural gas jet is divided into ten PSRs marked in Figure1 as R12 to R21. The streams leaving the fuel jet reactor R21 and the center jet reactor R10 merge into reactor R11. The rest of the furnace is represented by reactor R22. As it has been shown in Figure1 reactors entrain hot recirculating combustion products that originate from the last reactor (R22). The inlet to R12 reactor is a  $47/2 = 23.5$  kg/h flow of natural gas of the following volumetric composition 0.88 CH<sub>4</sub>, 0.05 C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>, 0.02 C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>, 0.04 N<sub>2</sub>. The inlet to R1 reactor is a  $830/2 = 415$  kg/h comburent flow of the volumetric composition specified previously. We stress here again that this stream contains 94 vppm (wet) NO.

Representing reacting flows by a network of reactors is a rather known technique [31, 32, 33, 34] which is successful when (a) the interaction between the reactors through recirculating flows (entrainment) is known, (b) the turbulent fluctuations are negligible and (c) sensitivity of the results to both the network configuration and the size of the reactors is examined. The network of the reactors is solved using the CHEMKIN 3.7 computer code [35] with the GRI 3.0 reaction scheme for methane/air flames [27].

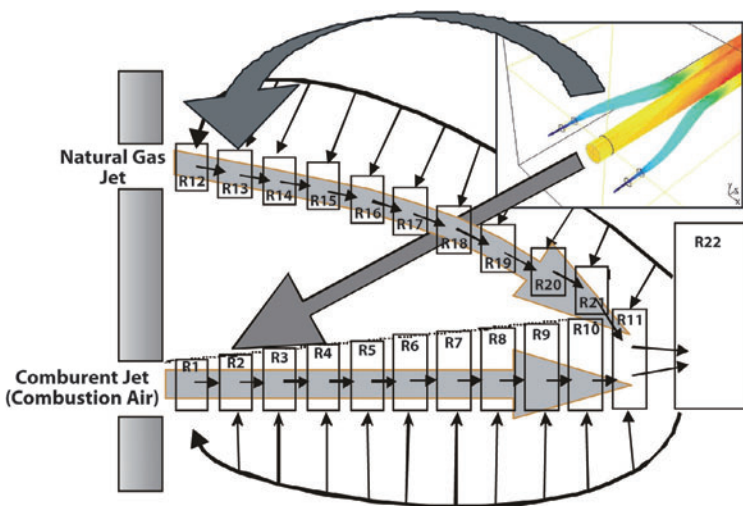


Figure 1: Series of Perfectly Stirred Reactors representing the strong central jet (reactors R1-R10) and the weak jet (reactors R12-R21).

As shown in Figure 1, both jets entrain combustion products of reactor R22 and we use two methods for determination of this entrainment. Since a RANS model solution is obtained a simple integration provides the entrainment values. Figure 2 shows the entrainment, for both the weak and the strong jets, obtained using the RNG k-epsilon based RANS model-1 of Table 1. In the second method we use the measured data that include the time-mean and fluctuating velocities (Laser Doppler Anemometry), the time-mean temperatures and gas composition. These data have been collected “point by point” at several traverses in the symmetry plane cutting through the middle of the furnace. Using these data, we have calculated the entrainment rates for both jets. Since the strong central jet remains axis-symmetric and “stiff”, with well-defined boundaries, this procedure is accurate and, as it is shown in Figure 2, the entrainment rates calculated from the measured data agree well with the RANS predictions. The same procedure has been applied to the weak jet of natural gas. Since the weak jet is strongly tilted towards the center jet our procedure for calculating the entrainment using the measured data is in this case less accurate. The accuracy with which we estimate the entrainment rates is shown in Figure 2 using the error bars. The same figure shows that there is a substantial discrepancy between the RANS-model-1 predicted (other RANS-models provide similar entrainment rates) and the “measured” entrainment.



# Jets Entrainment

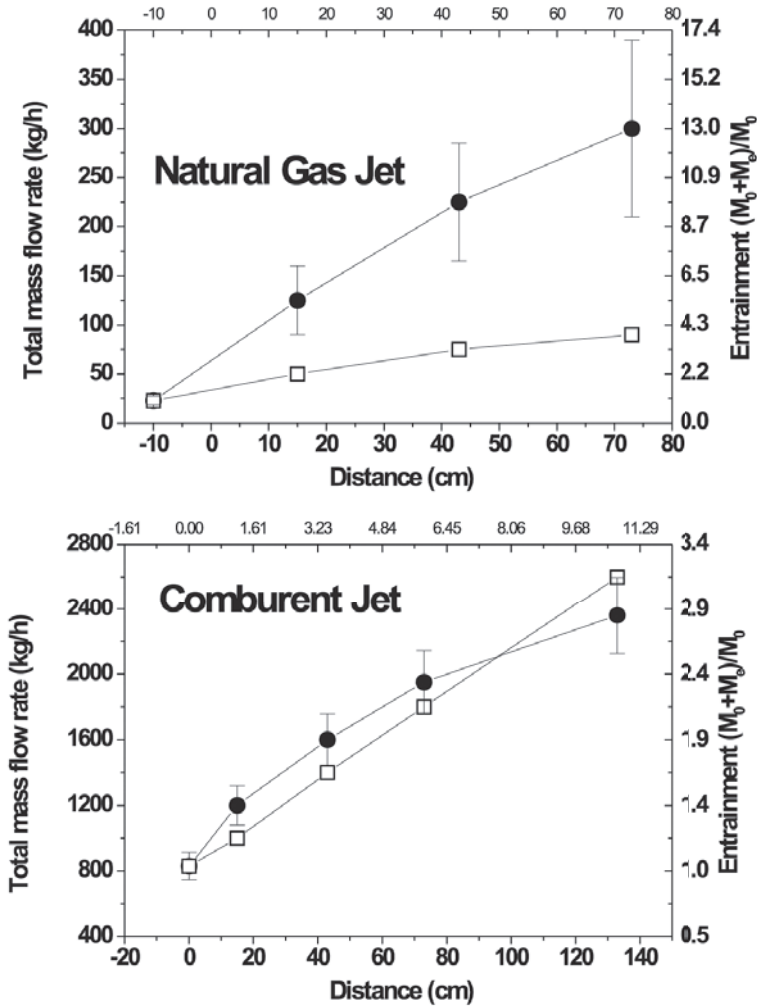


Figure 2: Entrainment of the jets; top: the weak natural gas jet, bottom: the strong comburent jet; • entrainment estimated using the measured data [1, 17] - the error bars indicate the inaccuracies in estimating the entrainment; entrainment calculated using RANS model-1

## Results and discussion

### The furnace exit values

Table 1 shows the comparison between the measurements and predictions in terms of the furnace exit values. Excellent agreement is obtained for all the models used. The overall mass and energy balance (including radiation balance) is satisfied with an accuracy better than 0.5 % for all the computational runs. It is worth noting that simple chemical equilibrium calculations, carried out for the furnace inlet conditions and for the furnace exit temperature of 1493 K and 1 bar pressure, result in NO emissions of 392 ppmvd whilst 140 ppmvd was measured.

### The jets

Figure 3 shows the predicted temperature and oxygen in both jets using the RANS model-1 and the Reactor Network Model while Figure 4 shows the NO and NO<sub>2</sub> concentrations within both jets. The predictions using RANS models 2 and 3, see Table 1, show similar results in the fuel jet and are not plotted. For the Reactor Network Model the entrainment figures are essential model inputs and therefore two computational runs are performed. In run 4 (Table 1) the entrainment is obtained using the RANS model-1 predictions while in run 5 (Table 1) the entrainment is estimated directly from the measured data (see Figure 2). Thus, in run 5 (Table 1), the entrainment into the fuel jet, at the point of merging into the combustor jet, is by a factor of three larger than in run 4.

The central combustor jet is easy to predict as shown in Figs. 3 and 4. Until the distance of around 70 cm, that corresponds to R11 reactor, there are no combustion reactions taking place in the jet and its temperature is determined by the energy balance that includes the entrainment and the radiation losses. The oxygen content in the jet decreases linearly with the distance due to the entrainment. Similarly the NO concentration increases slightly with the distance, and this effect is again exclusively due to the entrainment.

Consider now the weak jet. Figure 3 shows the predictions in the fuel jet obtained using the reactor network models (runs 4 and 5, Table 1). The flow-rate of CH<sub>4</sub> leaving the fuel injector is 5.055 gr/sec. The CH<sub>4</sub> flow-rate at the exit of reactor 21 is cal-

culated to be 5.0335 gr/sec in run 4 while, for run 5, a figure of 4.84 gr/sec is applicable. The oxygen concentration in reactor-21 is calculated to be 1.21 vol % and 1.3 vol % for runs 4 and 5, respectively. In run 4, only 0.43 % of CH<sub>4</sub> is converted, in the fuel jet, into the intermediate radicals and CO (0.2 % CO) while, for run 5, the corresponding figures are 4.3 % of CH<sub>4</sub> and 0.933 % CO, respectively. Thus, there is hardly any “consumption of fuel” taking place within the fuel jet. The above analysis and run 5 temperature plot, shown in Figure 3 (top), clearly demonstrate that the temperature increase within the fuel jet results almost exclusively from the entrainment of the hot combustion products. The process taking place within the fuel jet can be perhaps named as “pre-conditioning” of the fuel. This process results in a fuel that is highly diluted with CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub> PtO and is preheated to a temperature which are typically only 200-300 K lower than the temperatures of around 1800 K under which the main fuel oxidation reactions proceed in reactor 11. In run 5, we have calculated that such a “pre-conditioned” fuel is of the following composition: CH<sub>4</sub>= 5.3 %, H<sub>2</sub>= 0.5 %, CO<sub>2</sub>= 13.5 %, H<sub>2</sub>O = 27.8 % and N<sub>2</sub>= 50.9 %.The reactor network model shows no NO formation within the fuel jet and its presence there is exclusively due to the entrainment. The NO<sub>2</sub> which is present in significant quantities within the fuel jet is formed from the entrained-NO via reactions NO+O+M = NO<sub>2</sub>+M and NO+HO<sub>2</sub> = NO<sub>2</sub>+OH (the first reaction provides around two thirds of the NO<sub>2</sub> produced).

Figure 3: Temperature (left) and O<sub>2</sub> (right) in the jets:

- Measurements [1, 17],
- ◇ RANS model-1 predictions, Reactor Network Model with RANS mode-1 computed entrainment, Reactor Network Model with entrainment estimated from the measured data (see Figure 2)

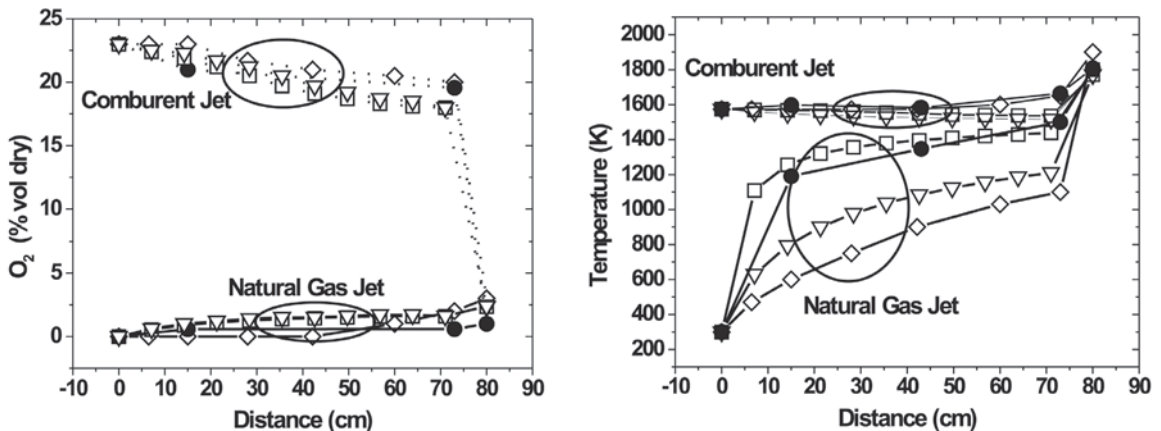
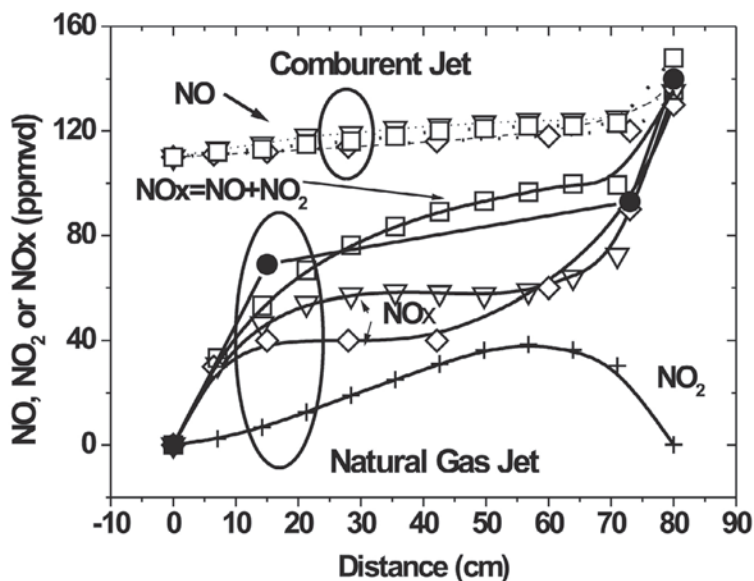


Figure 4. NO Concentrations in the jets:

- NO<sub>x</sub> Measurements [1, 17],
- ◇ RANS model-1 predictions, Reactor Network Model with RANS mode-1 computed entrainment, Reactor Network Model with entrainment estimated from the measured data (see Figure 2) + NO<sub>2</sub> - Reactor Network Model with entrainment estimated from the measured data (see Figure 2)



The central comburent jet is easy to predict as shown in Figs. 3 and 4. Until the distance of around 70 cm, that corresponds to R11 reactor, there are no combustion reactions taking place in the jet and its temperature is determined by the energy balance that includes the entrainment and the radiation losses. The oxygen content in the jet decreases linearly with the distance due to the entrainment. Similarly the NO concentration increases slightly with the distance, and this effect is again exclusively due to the entrainment.

Consider now the weak jet. Figure 3 shows the predictions in the fuel jet obtained using the reactor network models (runs 4 and 5, Table1). The flow-rate of CH<sub>4</sub> leaving the fuel injector is 5.055 gr/sec. The CH<sub>4</sub> flow-rate at the exit of reactor 21 is calculated to be 5.0335 gr/sec in run 4 while, for run 5, a figure of 4.84 gr/sec is applicable. The oxygen concentration in reactor-21 is calculated to be 1.21 vol % and 1.3 vol % for runs 4 and 5, respectively. In run 4, only 0.43 % of CH<sub>4</sub> is converted, in the fuel jet, into the intermediate radicals and CO (0.2 % CO) while, for run 5, the corresponding figures are 4.3 % of CH<sub>4</sub> and 0.933 % CO, respectively. Thus, there is hardly

any “consumption of fuel” taking place within the fuel jet. The above analysis and run 5 temperature plot, shown in Figure 3 (top), clearly demonstrate that the temperature increase within the fuel jet results almost exclusively from the entrainment of the hot combustion products. The process taking place within the fuel jet can be perhaps named as “pre-conditioning” of the fuel. This process results in a fuel that is highly diluted with CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O and is preheated to a temperature which are typically only 200-300K lower than the temperatures of around 1800K under which the main fuel oxidation reactions proceed in reactor 11. In run 5, we have calculated that such a “pre-conditioned” fuel is of the following composition: CH<sub>4</sub>=5.3 %, H<sub>2</sub>=0.5 %, CO<sub>2</sub>=13.5 %, H<sub>2</sub>O=27.8 % and N<sub>2</sub>=50.9 %. The reactor network model shows no NO formation within the fuel jet and its presence there is exclusively due to the entrainment. The NO<sub>2</sub> which is present in significant quantities within the fuel jet is formed from the entrained-NO via reactions NO+O+M=NO<sub>2</sub>+M and NO+HO<sub>2</sub>=NO<sub>2</sub>+OH (the first reaction provides around two thirds of the NO<sub>2</sub> produced).

### **Fuel oxidation and NO formation and destruction (Reactors 11 and 22)**

The mechanisms of both fuel oxidation and NO formation are similar in runs 4 and 5. Thus, only run 5 is considered below. The fuel oxidation proceeds in reactor-11 through three main routes with the percentage conversion of CH given in brackets:

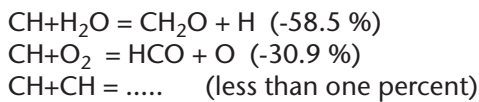
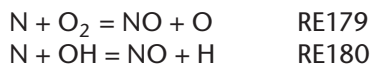


Table 2 lists the main NO-formation and NO-destruction reactions (the GRI numbering is retained [27]). The overall net rate of NO-production in reactor-11 is calculated to be 1.78E-9 mol/cc-sec. The NO<sub>2</sub> (formed already in the fuel jet) entering the reactor is rapidly converted into NO via reactions RE189 and RE188 and is almost equally fast regenerated via RE187 and RE186. The net rate of NO<sub>2</sub> conversion to NO is then 4.94E-10 mol/cc-sec that is substantially smaller than the overall net rate of NO-production. The NO is formed mainly via HNO-radicals (RE215, RE214, RE216 and RE213) and NCO-radicals (RE224 and RE222). The rate of formation of thermal-NO (RE180 and

RE179) is significant ( $1.8015E-9$  mol/cc-sec). The NO-reduction reactions include the reburning route (RE249, RE251, RE250, RE255, and RE274) and the reaction producing the HNO-radical (RE212). By far the fastest NO-reburning mechanism is via RE249:  $\text{NO} + \text{CH}_2 = \text{HNCO} + \text{H}$ . The relative importance of these different NO-formation/NO-reduction mechanisms can be nicely shown if we assume that the overall net rate of NO-production (equal to  $1.78E-9$  mol/cc-sec) takes a value of one. Then, the NO-formation rates are: 3.11, 17.97 and 5.14 for the thermal, the HNO-radical and the NCO-radical routes, respectively. The NO-reburning rate is then the fastest being -24.40.

The pool of radicals involved in the NO-reburning route, HNO-route and NCO-route consume the NO ( $-24.40 + 17.97 + 5.14 = -1.29$ ) which is formed via RE179:  $\text{N} + \text{O}_2 = \text{NO} + \text{O}$  and RE180:  $\text{N} + \text{OH} = \text{NO} + \text{H}$ . Thus, the key issue is the availability of the N-radicals which are formed via seven reactions (RE193, RE240, RE248, RE191, RE178, RE227 and RE217) and consumed via RE180, RE179 and RE283). The net rate of N-production is calculated to be  $1.9280E-13$  mol/cc-sec with around 55.5 % being produced via RE193:  $\text{NH} + \text{OH} = \text{N} + \text{H}_2\text{O}$ , 18.8 % via RE240:  $\text{N}_2 + \text{CH} = \text{N} + \text{HCN}$ , 10.9 % via RE248:  $\text{NO} + \text{CH} = \text{N} + \text{HCN}$ , 5.4 % via RE191:  $\text{NH} + \text{H} = \text{N} + \text{H}_2$ , 4 % via RE178:  $\text{N}_2 + \text{O} = \text{N} + \text{NO}$  and 3.9 % via RE227:  $\text{NCO} + \text{M} = \text{N} + \text{CO} + \text{M}$ . The direct decomposition of molecular nitrogen to N-radicals (RE178) proceeds with the rate that is 0.02 times the rate of N-formation in the overall pool of radicals and is therefore of minor importance. The corollary of the above discussion is that in reactor-11 the NO is formed mainly by the two Zeldovich reactions:



with N-radicals being generated in the radical pool as described above. Thus, any simplified NO formation model based on the two above Zeldovich reactions would deliver reasonable NO-predictions provided that the concentration of the N-radicals is correctly estimated.

For calculating the overall NO-emissions of the furnace, reactor-11 is the most important one. The overall residence time in this reactor is around 0.01s. Therefore it is imperative to examine the sensitivity of the results of the above analysis to the size (length) of this reactor. To this end we divided reactor-11 into eight sub-reactors and performed the integration again. Only minor differences occurred in the calculated NO concentrations. This subdivision also revealed that most of the NO was formed in the first 1/8th part of reactor-11 and the NO-concentration in subsequent sub-reactors increases very slowly with the residence time. Further insight into reactor-11 is gained by relaxing the assumption of well-stirred conditions. In this way we represent reactor-11 as a plug-flow reactor with known direct inputs from reactors-10 and 21 and a continuous supply of combustion products through the entrainment. By doing so, we wish to identify the location of the regions of rapid changes in reaction rates within the reactor-11 volume. Figure 5 shows the computed NO, OH-radicals, O-radicals and H-radicals concentrations indicating again that within 0.002s the NO-formation reactions almost cease. Furthermore, the very weak dependence of the calculated NO concentration with the residence time confirms that the prompt mechanism is dominant. The N<sub>2</sub>O mechanism played no role in the overall NO-formation picture.

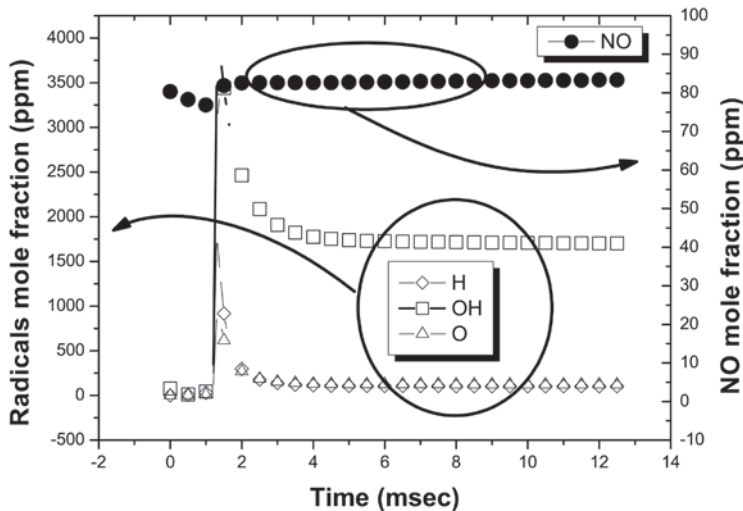


Figure 5: Variations of NO, N, O and OH concentrations in reactor-11 as a function of residence time.

The overall rate of NO formation in the furnace is calculated to be  $4.182\text{E-}5$  mol/s. Around 65 % of this NO is formed within the mixing layer of the jets (the 1/8th part of reactor-11) while around 35 % in the downstream part of the furnace; 0.1 % is formed within the comburent jets (reactors R12 to R21) while 0.1 % is reburned (reduced) within the fuel jets (reactors R1 to R10).

### **On the NO predictions obtained using the RANS models**

All the three RANS models used in this work provided excellent predictions of the furnace emissions as shown in Table 1. A detailed analysis of the performance of these models is provided in Ref. [36, 37]. Since the question of the reliability of the RANS type models equipped with simplified NO<sub>x</sub> postprocessors is of paramount practical importance, we summarize our observations. Firstly, the Chen [29] model happened to be redundant due to too low a rate of NO-reburning. Secondly, models 2 and 3 (Table 1) compute the thermal-NO formation rate using reactions RE179 and RE180 under the assumption that the N-radicals concentration may be calculated from a steady state approximation and concentrations of O-radicals and OH-radicals are computed using equilibrium (see Eq. 21-24 in Ref. [28]). By means of our Reactor Network Model we have verified that the N-radicals of reactor-11 are indeed in steady-state however the O-radical concentrations are under-estimated by a factor of ten if compared with the equilibrium values or by a factor of six if the partial equilibrium approach is used. Even though, our RANS models 1, 2 and 3 over-predict the thermal-NO formation rate due to over-predictions in the peak flame temperature as shown in Table 1. Thirdly, the simple prompt-NO model [28] that is appended to the first three RANS models substantially under-predicts the NO-formation rates. As a consequence of the above shortcomings, the first three RANS based models (Table1) identify the NO-thermal route as the primary NO-formation mechanism.

### **Combustion with preheated air**

In the IFRF experiments [1, 17] the comburent stream containing 21 % oxygen was used to simulate the hot combustion air stream and the NO content of the comburent was 100 ppmvd. In industrial applications pure air, with no NO, is used. Thus,



the question is what NO furnace emissions would be observed if the comburent was replaced with air. To this end, additional simulations were carried out using both the RANS models and the Reactor Network Model but, at the inlet to the furnace, air was supplied rather than the comburent. The Reactor Network Model predicted 34 ppmvd furnace NO emissions which is a value that is typical for industrial applications of this technology. Here again, the prompt-NO was the main NO-formation route. In contrast, the RANS based models listed in Table 1. predicted a concentration of 130 ppmvd at the furnace exit. These models identified the thermal NO-route as the primary NO-source.

## Conclusions

We have performed a further analysis of the semi-industrial scale experiments [1, 17] on mild (flameless) combustion of natural gas. The experimental burner has featured a strong (high momentum) comburent jet and two weak (low momentum) natural gas jets. The following has been concluded:

- (a) little combustion occurs in the fuel jet. The temperature rise and the increasing NO concentrations along the fuel jet are almost exclusively due to the entrainment of hot combustion products. It has been proven that the failure of a number of RANS models in predicting the structure of the fuel jet is in error predictions of the entrainment and therefore is not related to any chemistry sub-models.
- (b) the prompt route is the dominant NO-formation mechanism with most of the NO being formed at the interception of the jets and downstream in the furnace. The N-radicals, important for prompt NO formation, are generated in a pool of radicals involved in the NO-reburning route, HNO-route and NCO-route. No NO is generated directly inside the fuel jets.
- (c) several RANS-based models equipped with various NO-postprocessors have been used in this study and all of them predicted well the furnace NO-emissions. However, the NO-postprocessors have not identified the correct NO formation mechanisms. In short, these simplified NO-postprocessors have predicted the correct furnace emissions for wrong reasons.

## References

- [1] Weber, R., Verlaan, A.L., Orsino, S. and Lallemand, N., J. Inst. Energy 72:77-83 (1999).
- [2] Tsuji, H., Gupta, A., Hasegawa, T., Katsuki, M., Kishimoto, K. and Morita, M., " High Temperature Air Combustion", CRS Press, New York, 2003.
- [3] De Joannon, M., Cavaliere, A., Faravelli T., Ranzi E., Sabia P. and Tregrossi A., Proc. Combust. Inst. 30: 2605-2612 (2005).
- [4] Cavaliere A. and De Joannon M. Prog. Energy Combust. Sci. 30 (2004) 329-366.
- [5] Wüning, J.A. and Wüning, J.G. (1997). Progr. Energy Combust. Science, 23, 12 , pp. 81-94.
- [6] Weber R., Smart J.P., and vd Kamp W., Proc. Combust. Inst. 30: 2623-2629 (2005).
- [7] New Combustion Systems for Gas Turbines (NGT). European Commission Project ENK5-CT-00564, 2001.
- [8] Low NO<sub>x</sub> FLOX Combustor for High Efficiency Gas Turbines. European Commission Project ENK5-CT-2000-00114, 2000.
- [9] Weber R., Szlek A. and Wilk R. "A novel application of mild combustion technology to gas turbines that results in substantial increase of cycle efficiency". In 6th International Symposium on High Temperature Air Combustion and Gasification, Essen, Germany, 2005.
- [10] Nakamachi I., Yasuzawa K., Miyahara T., and Nagata T. Apparatus or Method for Carrying out Combustion in a Furnace, US Patent No. 4, 945, 841, August 7th, 1990.
- [11] Sobiesiak A, Rahbar S. and Becker H. Comb. Flame, 115 (1-2) :93-125, 1998.
- [12] Grandmaison, E.,W., Yimer, I., Becker, H.,A., and A. Sobiesiak. Comb. Flame, 114:381-396, 1998.
- [13] Kumar, S., Paul, P.J. and Mukunda, H.S. Proc. Combust. Inst. 29: 1131-1137 (2002).
- [14] Dally, B.,B., Karpetsis, A.N. and Barlow, R.S. Proc. Combust. Inst. 29: 1147-1154 (2002).
- [15] Kim S.H., Huh K.Y., and Dally B. . Proc. Combust. Inst. 30: 751-757 (2005).
- [16] Choi, G-M. and Katsuki, M. Proc. Combust. Inst. 29: 1165-1171 (2002).

- [17] Weber, R., Orsino, S., Lallemand, N. and Verlann, A. Proc. Combust. Inst. 28: 1315-1321 (2000).
- [18] Mancini, M., Weber, R. and Bollettini U. Proc. Combust. Inst. 29: 1155-1163 (2002).
- [19] Dong W. Design of advanced industrial furnaces using numerical modelling method. Ph.D. thesis. The Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden, 1999.
- [20] Awosope I.O. Ph.D. Flameless oxidation combustion modelling and application to a gas turbine combustor, Ph.D. Thesis, Mechanical Engineering Department, Imperial College London, United Kingdom, 2005.
- [21] Awosope I.O., Kandamby N.H. and Lockwood F.C. "Flameless oxidation modelling: On the application to gas turbine combustors", J. Inst. Energy, in printing.
- [22] Borghi R. Prog. Energy Combust. Sci., 1988, Vol. 14, pp. 245-292.
- [23] Lindsted P. and Vaos E. Comb. Flame. 116, pp 461-485, 1999.
- [24] Fleck B., Becker H.A., Sobiesiak A., Lawrance A.D. and Matovic M.D. Ultra-Low-NOx Natural Gas Burner: Development and Performance. The 5th European Conference on Industrial Furnaces and Boilers, 11-14 April. Portugal, 2000.
- [25] Coelho P.J. and Peters N. Combustion and Flame (2001)124: 503-518.
- [26] Tabacco, D., Innarella, C. and Bruno, C., Combust. Sci. Technol. 174: 1-35 (2002).
- [27] Gas Research Institute , GRI-Mech, Ver. 3.0, [www.me.berkeley.edu/gri\\_mech/](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/).
- [28] Peters, A. and Weber, R. (1995). Combust. Sci. Technology, 110-111, pp. 67-101.
- [29] Chen, W., (1994) A Global Reaction Rate for Nitric Oxide Reburning. Ph.D. thesis, Brigham Young University.
- [30] De Soete, G.G., Proc. Combust. Inst. 15: 1093-1102 (1975).
- [31] Song, S., Hanson, K., Bowman, C.T. and Golden, D.M. Proc. Combust. Inst. 28: 2403-2409 (2000).
- [32] Ewan, B.,C.,R., Boysan, F. and Swithenbank, J. Proc. Combust. Inst. 20: 541-547 (1984).
- [33] Pedersen, L., S., Breithaupt, P., Johansen, K.-D. and Weber R. (1997). Combust. Sci. Technology., 127, pp. 251-273.
- [34] Niksa, S. and Liu, G.-S. Proc. Combust. Inst. 29: 2259-2265 (2002).

- [35] Kee, R. J., Rupley, F.,M., and Miller, J., A. The CHEMKIN Thermodynamic Data Base; Sandia Report, SAND87-8215.
- [36] M. Mancini. "Analysis of NO<sub>x</sub> formation and destruction in MILD combustion of natural gas", Ph.D. thesis, TU Clausthal, 2006.
- [37] M. Mancini, P. Schwoeppe, R. Weber, S. Orsino. Comb. Flame, 150 (2007) 54-59.



## 4 Hochleistungsrechnen

Wissenschaftliches Rechnen spielt als dritte Säule neben Theorie und Experiment eine zunehmend wichtige Rolle, um komplexe Phänomene und Prozesse nicht nur vorherzusagen, sondern auch besser verstehen zu können. In der Struktur des SWZ wird diesem Umstand Rechnung getragen, indem neben den drei anwendungsorientierten Schwerpunkten – Materialien, Energie und Umwelt sowie Prozesse Anlagen und Logistik – das Thema Hochleistungsrechnen als Querschnittsdisziplin implementiert wurde. Die Grundlage jeder Computersimulation ist eine Problemformulierung durch ein Modell als Abbild der Realität, das mit Hilfe geeigneter mathematischer Algorithmen auf dem Rechner numerisch gelöst werden muss. Im Bereich der Kontinuumstheorie sind dies beispielsweise partielle Differentialgleichungen, welche auf der Basis finiter Approximationen gelöst werden. Daraus resultieren Gleichungssysteme mit mehreren Millionen bis Milliarden Unbekannten, zu deren Lösung neben effizienten Algorithmen leistungsfähige Software für Parallelrechner benötigt werden. In Niedersachsen steht seit 2008 für numerisch besonders anspruchsvolle Anwendungen ein neuer Supercomputer des neuesten technischen Stands zur Verfügung. Dieses sogenannte HLRN-II-System besteht aus zwei Rechnersystemen der Firma SGI, die über eine dedizierte Glasfaserleitung Berlin-Hannover, den HLRN-Link, zu einem Gesamtkomplex verbunden sind. Gegenüber dem Vorgängersystem (IBM p690) bietet bereits die erste Ausbaustufe die dreizehnfache Rechenleistung (Peakleistung). Mit dem Endausbau im Jahr 2009 wird sich diese Rechenleistung versechzigfachen. Das Gesamtsystem besteht aus je einem Massiv-Parallelen Part (MPP) mit verteiltem Speicher und einem Shared-Memory Part (SMP) an den Standorten in Hannover und Berlin. An beiden Standorten sind jeweils eine SGI Altix ICE 8200 Plus mit 320 Acht-Core Rechenknoten (Intel Xeon Harpertown), jeweils 16 GByte Speicher pro Knoten installiert. Ergänzt wird das System durch je eine SGI Altix XE 250 (SMP part). Diese besteht aus 44 Acht-Core Rechenknoten (Intel Xeon Harpertown), die mit 64 GByte deutlich mehr Arbeitsspeicher pro Knoten zur Verfügung stellt. In der ersten Ausbaustufe, die seit Juli 2008 in Betrieb ist, stehen somit insgesamt 2560 Prozessorkerne mit einer Leistung von 26,69 TeraFLOP pro Sekunde zur Verfügung. Die Angabe TeraFLOP („Floating Point Operation“) bezieht sich auf die Anzahl der Gleitkommaoperationen in Billionen ( $10^{12}$ ), die pro Sekunde abgearbeitet werden können. Beide Komplexe zusammen genommen stellen den viertgrößten Rechner in Deutschland dar.



Die nachfolgenden Projektbeschreibungen geben einen Überblick über den derzeitigen Stand von Arbeiten im Bereich des Hochleistungsrechnens an der TU Clausthal und zeigen zudem die Vernetzung einzelner Arbeitsgruppen in diesem interdisziplinärem Arbeitsgebiet.

#### **4.1 Numerische Simulation instationärer Strömungsvorgänge in einem Radialverdichter**

Bei der Auslegung von Strömungsmaschinen spielt neben dem Erzielen einer bestimmten Leistungscharakteristik in zunehmendem Maße die Schwingungsproblematik eine große Rolle. Instationäre Strömungsvorgänge können eine Ursache für derartige Schwingungen sein und im Resonanzfall zum Bruch des Laufrades führen. Eine möglichst genaue Kenntnis dieser Vorgänge ist daher erforderlich, um sichere Laufräder zu konstruieren. Von besonderer Bedeutung sind instationäre Phänomene im Teillastbetrieb, da hier besonders große Amplituden der Druckfluktuationen auftreten. Dazu zählen die rotierende Abreißströmung („rotating stall“) und das Pumpen bei Drosselung der Anlage. Die Strömung in diesem Bereich ist hochgradig instationär und die auftretenden Frequenzen sind weitgehend unbekannt. Heutige CFD (Computational Fluid Dynamics) Verfahren in Verbindung mit leistungsfähigen Computern ermöglichen es, die Vorgänge in Strömungsmaschinen sehr genau zu simulieren und für die verschiedenen Betriebspunkte die instationären Druckschwankungen und deren Frequenzen zu ermitteln. Eine Modalanalyse für das Laufrad ermöglicht dann die Klärung der Frage, ob die hydrodynamischen Fluktuationen kritische Eigenfrequenzen des Systems anregen können.

*Der Superrechner HLRN II (Norddeutscher Verbund zur Förderung des Hoch- und Höchstleistungsrechnens) besteht aus jeweils einem SGI-Cluster Altix XE 1200 und einer SGI Altix ICE an den Standorten Hannover und Berlin. Insgesamt sind es 5824 Intel-Xeon-Prozessorkerne. Für die Anwendungen steht ein Hauptspeicher von 15,8 Tera-byte zur Verfügung.*

*Foto: SGI*

*Andreas Lucius, Gunther Brenner;  
Institut für Technische Mechanik*

Im Rahmen eines EFRE Projektes in Zusammenarbeit mit der Firma Piller Industrieventilatoren GmbH in Moringen sind für einen industriellen Verdichter instationäre Simulationen im Auslegungspunkt und bei Teillast durchgeführt worden. Die Ergebnisse werden im Folgenden kurz dargestellt.

### **Modellierung von Strömungsmaschinen mit Hilfe von CFD**

Der Einsatz von CFD Simulationen ist heute grundsätzlich Stand der Technik im Designprozess von Turbomaschinen. Durch die Weiterentwicklung von numerischen Verfahren und die stetig steigende Kapazität der Computer können 3-dimensionale turbulente Strömungsvorgänge in komplexen Geometrien bereits auf PCs gelöst werden. Dies setzt allerdings Vereinfachungen voraus, um mittels Simulationen in angemessenen Zeiten Parametervariationen beispielsweise zur Wirkungsgradoptimierung der Anlage durchführen zu können. Für die Analyse der Strömung in einem Laufrad wird daher typischerweise eine stationäre rotationsymmetrische Strömung angenommen. In diesem Falle wird nur eine Teilung des Laufrades modelliert und räumliche Periodizität der Geometrie und der Strömung in Umfangsrichtung angenommen. Ein solcher Ansatz ist für eine Optimierung der Strömungsführung im Schaufelkanal in der Nähe des Optimalpunktes ausreichend. Dieser Ansatz verliert aber seine Gültigkeit, sobald die Rotationsymmetrie der Geometrie nicht mehr gegeben ist. Dies ist im Bereich der Nachleiteinrichtung eines Verdichterlaufrades praktisch immer der Fall. In der Regel wird das Fluid durch eine Sammelspirale zum Druckstutzen der Maschine geführt. Eine komplette Analyse der Stufe wird also nur möglich, wenn beide Komponenten (Rotor und Stator) als 360° Modelle simuliert werden. Hinzu kommt, dass durch die Relativbewegung der beiden Komponenten und die Verletzung der Rotationsymmetrie die Strömung auch im Relativsystem instationär wird. Dies gilt insbesondere für den Teillastbereich. In solch einem Betriebspunkt passt die Auslegung der Spirale nicht mehr zu den Strömungsbedingungen. Die Folge ist eine unsymmetrische Druckverteilung auf dem Umfang des Laufrades. Dadurch erfährt eine Schaufel in einer Umdrehung unterschiedliche Gegendrücke und damit eine wechselnde Schaufelbelastung. Dies kann zu Schwingungsanregung führen. Eine andere Quelle für Schwingungsanregung



ist das sog. rotierende Abreißen, welches ebenfalls bei Teillast auftritt. Um diese Phänomene abzubilden, sind instationäre CFD Simulationen gefordert. Diese Rechnungen stellen hohe Anforderungen an die Rechenkapazität, da die Strömung in der gesamten Maschine für mehrere Rotorumdrehungen berechnet werden muss. Dem Institut stand für diese Zwecke der HLRN (Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen) in Hannover zur Verfügung. Die Berechnungen erfolgten mit bis zu 16 Prozessoren.

Von besonderer Bedeutung für die Simulation turbulenter Strömungsvorgänge ist die Auswahl eines geeigneten Turbulenzmodells. Stand der Technik sind RANS („Reynolds Averaged Navier Stokes“) Modelle basierend auf dem Konzept der Wirbelviskosität. Für genaue Auflösung von Grenzschichten und auftretende Ablösungen wird in dieser Arbeit das SST  $k-\epsilon$  Modell favorisiert. Aktueller Stand der Forschung sind Modelle, die teilweise turbulente Fluktuationen auflösen, dazu zählt z. B. das DES („Detached Eddy Simulation“) Konzept. Dieses hybride Modell löst die RANS Gleichungen bei anliegender Strömung; bei Ablösungen wird ein LES („Large Eddy Simulation“) Modell benutzt.

## **Vorstellung des Simulationsmodells**

Im Rahmen des EFRE Projektes wurden verschiedene Konfigurationen eines Radialverdichters mittels CFD untersucht. In der ersten Rechnung wurde die Strömung in der kompletten Maschine mit Spiralgehäuse simuliert. Als Betriebspunkt wurde der Optimalpunkt gewählt. In einer zweiten Konfiguration wurde die Strömung im Rotor mit anschließendem schaufellosem Diffusor berechnet. Diese Konfiguration ist rotationsymmetrisch; es werden also keine instationären Wechselwirkungen mit der Spirale berücksichtigt. Mit dieser Konfiguration wird das rotierende Abreißen simuliert, das sich im Teillastbereich als Strömungsinstabilität einstellen kann. Dieses Phänomen ist charakterisiert durch große Ablösungen auf der Saugseite der Schaufeln, sodass sie Durchströmung einzelner Schaufelkanäle behindert oder gar blockiert werden kann. Die Wirbelgebiete sind in der Regel nicht stationär sondern bewegen sich relativ zum Rotor mit entgegen gerichteter Umlaufgeschwindigkeit. Dadurch treten im Kanal starke Druckfluktuationen auf, die zu

Schwingungsanregung führen. Die Frequenz dieser Fluktuationen ist a priori nicht bekannt und kann nur durch Messungen oder mit instationären CFD Simulationen bestimmt werden.

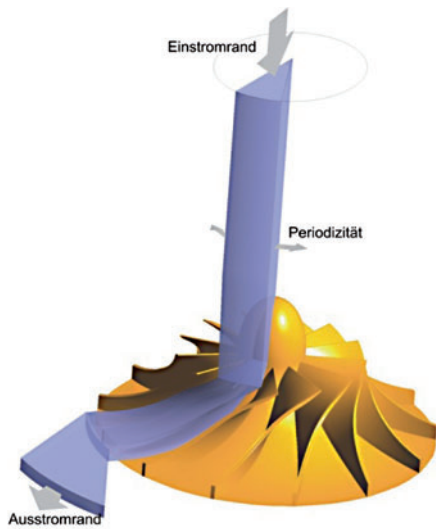
In der Abbildung 1 sind die Konfigurationen für die Berechnungen dargestellt. Die erste Abbildung zeigt das Rechengebiet mit periodischen Rändern, wie es üblicherweise zur Optimierung eines Laufrades verwendet wird. Die zweite Konfiguration stellt das 360° Modell des Rotors mit Diffusor dar. Weiterhin ist die komplette Konfiguration aus Spiralgehäuse und Diffusor dargestellt.

Das Rechengebiet setzt sich in allen Fällen aus drei Teilen zusammen: (i) Eintrittsstutzen, (ii) drehendes Laufrad und (iii) Diffusor hinter dem Laufrad. Letzteres Gebiet umfasst je nach Konfiguration auch das Spiralgehäuse. Die Netzunabhängigkeit der Lösung wurde für die einfache Konfiguration mit periodischen Rändern getestet. Auf dieser Basis ergeben sich folgende Modellgrößen, die durch die Anzahl der Kontrollvolumina bestimmt wird.

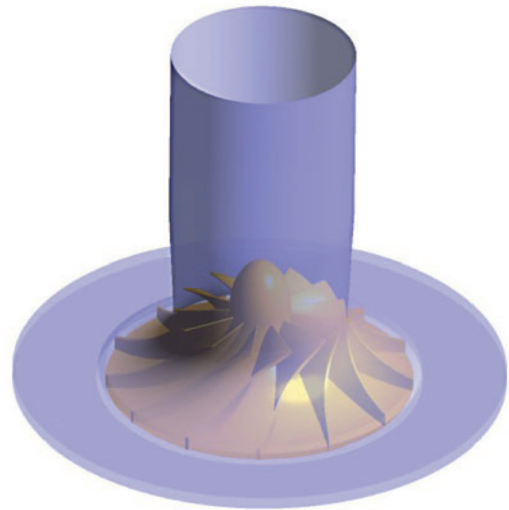
<b>Konfiguration</b>	<b>Knotenzahl</b>
einzelner Kanal	$1,45 \times 10^5$
Rotor und schaufelloser Diffusor (360°)	$1,9 \times 10^6$
komplette Maschine mit Spirale	$2,7 \times 10^6$

## **Ergebnisse**

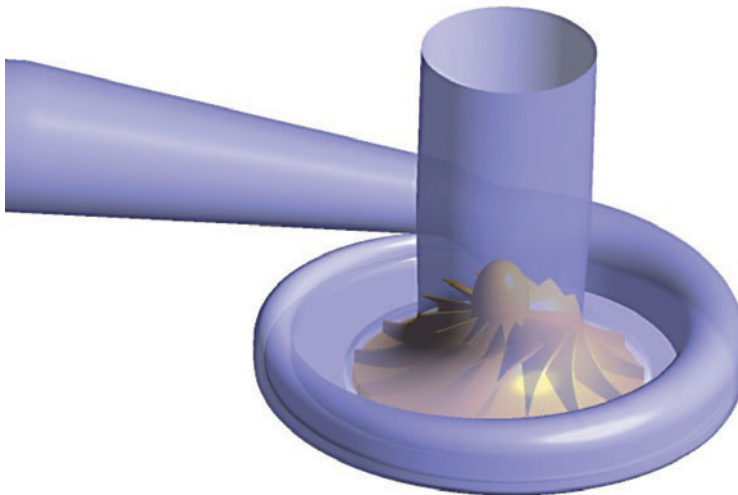
Zunächst werden die Ergebnisse für die gesamte Maschine mit Spiralgehäuse gezeigt. Als Startlösung für die instationäre Rechnung wurde eine konvergierte stationäre Simulation verwendet. Es wurden 5 Umdrehungen des Rotors simuliert, eine Umdrehung wurde mit 128 Zeitschritten aufgelöst. Die Rechenzeit betrug ca. 17 h für die stationäre Simulation und ca. 70 h pro Umdrehung für die instationäre Simulation. Hierbei wurden 8 CPUs parallel genutzt. Als ein Ergebnis wurden die zeitlichen Druckfluktuationen am Austritt des Laufrades und in der Mitte des schaufellosen Diffusors ausgewertet. Die Nachläufe der Schaufeln passieren einen stationären Punkt im Diffusor mit der Blattfrequenz  $f_{\text{Blade}}$  (Drehfrequenz x Schaufelzahl). Diese Frequenz ist im gerechneten Betriebspunkt die dominierende Anregungsfrequenz. Der zeitliche Verlauf zeigt außerdem



Rotor und einzelner Kanal (Rechengebiet blau) mit periodischen Rändern



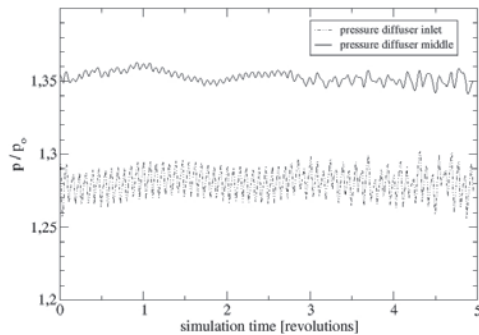
Rechengebiet als kompletter Rotor mit schau-  
fellosem Diffusor



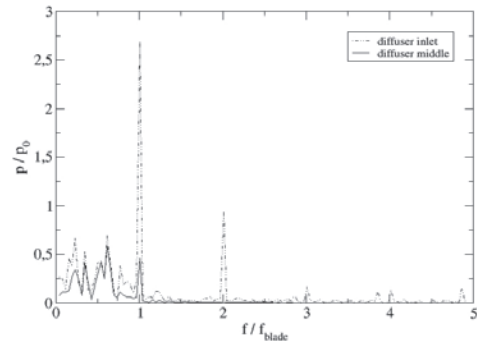
Rechengebiet für gesamte Maschine mit Spiralgehäuse

*Abbildung 1: Zur Definition der  
Rechengebiete*

nach ca. 3 Umdrehungen eine Überlagerung mit Fluktuationen niedriger Frequenz. In Abbildung 2 sind der zeitliche Verlauf des Drucksignals an 2 Punkten im Gehäuse und die dazugehörigen Spektren als Vielfache der Blattfrequenz  $f_{\text{Blade}}$  dargestellt.



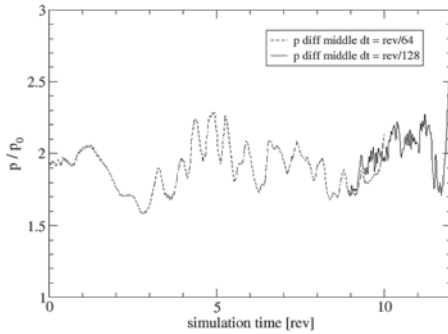
Druckamplitude als Funktion der Zeit



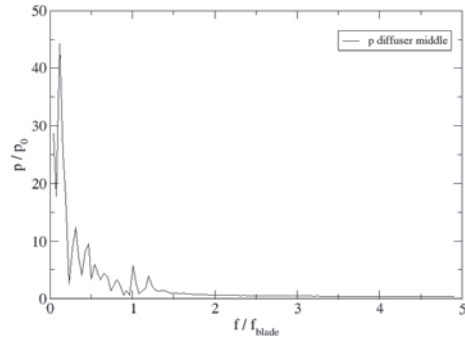
Frequenzanalyse des Druckfluktuation

Abbildung 2 Simulationsergebnisse für die gesamte Maschine

Für die Konfiguration ohne Spiralgehäuse wurde ein Punkt im Teillastbereich simuliert, der Massenstrom betrug 65 % des Massenstroms im Optimalpunkt. Wie erwartet stellt sich ein stark instationäres Geschwindigkeitsfeld mit wandernden Wirbelgebieten ein. Die typische Bewegung der Wirbelgebiete entgegen der Drehrichtung kann beobachtet werden. Für diesen Fall zeigen sich deutlich größere Amplituden der Druckfluktuationen. Abbildung 3 zeigt den Frequenzbereich des Signals. Man sieht, dass die Nachläufe der Schaufeln nur noch von untergeordneter Bedeutung sind. Die höchsten Amplituden wurden bei niedrigen Frequenzen erreicht. Für diese Simulation wurden 8 Umdrehungen mit großem Zeitschritt (64 pro Umdrehung) und anschließend 4 Umdrehungen mit kleinem Zeitschritt (128 pro Umdrehung) gerechnet.



Druckamplitude als Funktion der Zeit



Frequenzanalyse des Druckfluktuation

Abbildung 3 Simulationsergebnisse für die gesamte Maschine im Betriebszustand „rotating stall“

## Fazit

Die vorliegenden Ergebnisse haben gezeigt, dass es mit transienten CFD Simulationen möglich ist, die Mechanismen zu quantifizieren, die zu einer Schwingungsanregung eines Verdichterlaufrads führen. Dies sind im Auslegungspunkt durch Drehzahl und Geometrie der Laufrads vorgegebene Druckpulsationen, sodass hier die Blattfrequenz dominiert. Bei Teillast werden niederfrequenter und breitbandigere Druckfluktuationen mit wesentlich höherer Amplitude ermittelt. Die genaue Bestimmung dieser Anregungsmechanismen ist möglich aber mit extrem hohem Rechenaufwand verbunden und erfordert den Einsatz von Hoch- und Höchstleistungsrechnern. Es konnte somit gezeigt werden, dass die numerische Simulation als komplementäres Werkzeug zu Messungen verstanden werden kann, mit dem detaillierte Informationen über das Betriebsverhalten von derartigen Maschinen gewonnen werden können. Gegenstand zukünftiger Arbeiten ist die Erarbeitung von umfassenderen Daten zur Modellierung des „rotating stall“ und die Reduktion dieser Daten. Die so definierten Lastkollektive können im Designprozess einer Anlage zur zuverlässigeren Abschätzung der Betriebsfestigkeit und Lebensdauer bzw. Sicherheit dienen.

## Literatur

- [1] Greitzer E.M. "An Introduction to Unsteady Flow in turbomachines", Thermodynamics and fluid mechanics of turbomachinery, pp 967 -1024, Martinus Nijhoff Publishers, 1985.
- [2] Dickmann H.P., Secall Wimmel T., Szwedopwicz J., Filsinger D., Roduner C.H, "Unsteady Flow in a Turbocharger Centrifugal Compressor 3D-CFD-Simulation and Numerical and Experimental Analysis of Impeller Blade Vibration", ASME Paper GT2005-68235.
- [3] Treutz, G., „Numerische Simulation der instationären Strömung in einer Kreiselpumpe“, Dissertation TU Darmstadt, 2002.

## 4.2 Simulation of Multiphase Flows by using the Lattice Boltzmann Method

### The Lattice Boltzmann Method

*Ernesto Monaco, Gunther Brenner;  
Institut für Technische Mechanik*

Multiphase flows are encountered in many natural phenomena and industrial processes like fuel engineering, cooling systems, nuclear reactors technology. Because of their complexity, theoretical solutions are available only for relatively simple cases, while experimental approaches are often extremely difficult or even impossible to realize. Numerical simulations can thus play a fundamental role in providing reliable and detailed descriptions of such flows. Traditional Computational Fluid Dynamics (CFD) schemes based on the discretization of Navier-Stokes (NS) equations may face difficulties in tracking rapidly changing interfaces without some drastic approximations; besides, the continuum hypothesis on which NS-equations are based poses problems in modeling in a consistent way the macroscopic effects of intermolecular forces driving separation among the different phases. The applicability of Molecular Dynamics (MD) simulations is limited to microscopic time and length scales because of the computational cost. To find out an alternative method it is necessary to start from a different description of the fluid state.

In kinetic theory the fluid is viewed as discrete: a set of particles streaming and colliding. Rather than tracking the position

and speed of each particle, a statistical description is adopted, based on the concept of distribution functions of particle populations.

The single particle distribution function (PDF)  $f(\vec{r}, \vec{\xi}, t)$  describes the probability of finding, at a certain time  $t$  and a certain position  $\vec{r}$ , a particle having a certain velocity  $\vec{\xi}$ . The evolution of this distribution function is described by the famous Boltzmann equation. The NS equations can be obtained by means of the so-called Chapman-Enskog expansion, meaning that the distribution function  $f$  includes much more information than needed for recovering hydrodynamics. This consideration justifies the search for minimal kinetic models, referred to also as discrete velocity models, in which the continuous PDF is replaced by a discrete set of distribution functions  $f_i(\vec{x}, \vec{e}_i, t)$  related to the discrete speeds  $\vec{e}_i$  defining a lattice. The Lattice Boltzmann Method (LBM) is characterized by the following set of equations:

$$f_i(\vec{x} + \vec{e}_i, t + 1) - f_i(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\Delta t} (f_i(\vec{x}, t) - f_i^{eq}(\vec{n}, \vec{u}))$$

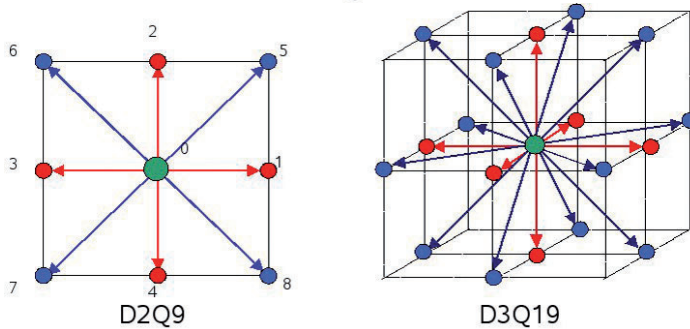


Figure 1: The D2Q9 and D3Q19 lattice models

Every discrete distribution function  $f_i$  undergoes a streaming step (left-hand-side) and a collision step (right-hand-side), where it relaxes to its equilibrium value  $f_i^{eq}(\vec{n}, \vec{u})$  with a single characteristic time (SRT-LBM). Macroscopic quantities can be obtained as discrete moments of the distribution function. Since the streaming step is just a “shift” operation and the collision is completely local, the LBM is particularly suited for massively parallel computations. To simulate multiphase and multicomponent flows, several

models have been developed. The Shan-Chen (SC) model [2] consists in introducing an interparticle potential, the gradient of which is the force that modifies the local velocity of the particles. The original formulation of this model was thermodynamically inconsistent, and allowed to reach small density ratios ( $O(10)$ ). In [3] it was found that realistic density ratios could be reached by simply changing the equation of state of the model (EOS). Using this approach, two cases have been studied: the multiphase flow of carbon dioxide in microchannels and the binary collision of droplets.

### **Multiphase CO<sub>2</sub> flow in microchannels**

In [4], the aforementioned approach was applied to simulate a two-dimensional bubbly flow of CO<sub>2</sub> in a microchannel at near critical temperatures. The EOS adopted here is the van der Waals one. This case was studied in [5] employing a different multiphase LBE, using a temporal simulation approach. A square box with 5  $\mu\text{m}$  length is discretized by a 256x256 grid and periodic boundary conditions are applied at inflow and outflow sections. A random distribution of CO<sub>2</sub> bubbles occupying half of the volume of the box, surrounded by liquid CO<sub>2</sub>. The flow is driven by a pressure gradient. Different vapor mass fractions and temperatures have been tested. In Figure 2, the pressure gradient corresponding to a mass flow of 900 kg/m<sup>2</sup>s is applied. The temperature is 25°C. The evolution from bubbly to annular flow is presented at various channel locations normalized by the channel height. As a comparison, the simulation result in [5] and the experimental result in [6] are also shown. It should be noted that results of a temporal simulation at different time instants correspond to different streamwise locations in the experimental visualization. It seems that in [5] very large liquid droplets are formed before they evaporate. Such features are hard to identify in the experimental results in [5]. In the present simulation, smaller liquid droplets are formed during the transition process. The final state of liquid films at the wall with vapor in the channel centre is thus reached quicker. The qualitative agreement of the present simulation with that in [5] is good, considering that the bubbles are specified randomly and exact reproduction is not required. Moreover, the present simulation seems to be in closer agreement with the experiment in [6] than with the simulation in [5].



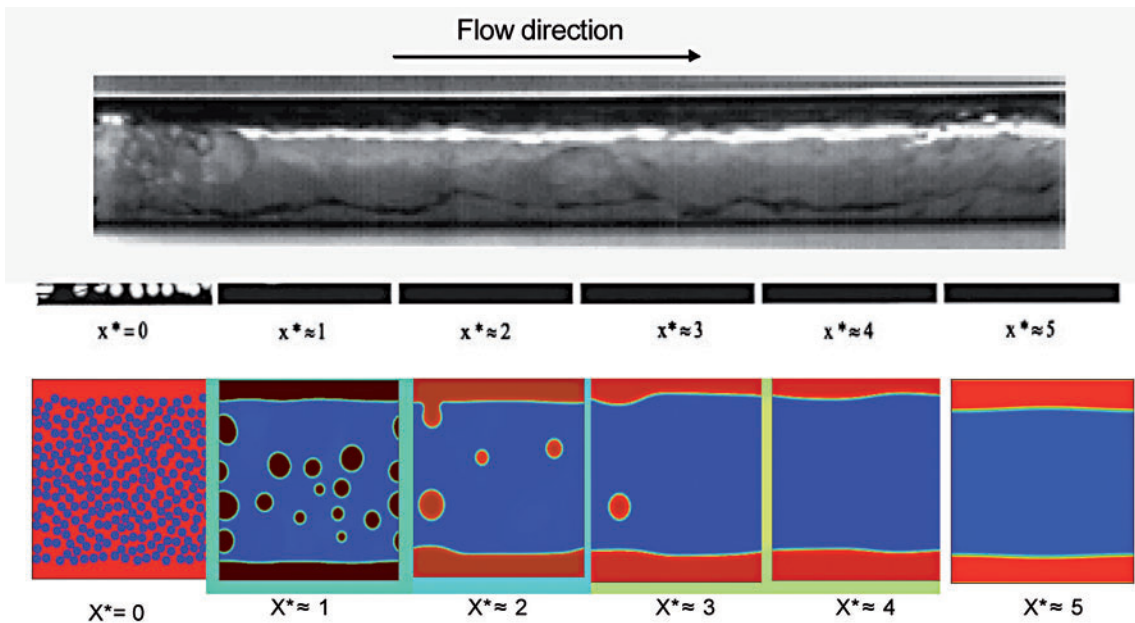


Figure 2 From top to bottom, the simulation of  $\text{CO}_2$  bubbly flow in [5], the corresponding case performed in [4] (the liquid phase is in red), and finally the experiment reported in [6].

### Simulation of binary droplet collisions

Droplet collisions are encountered either in natural phenomena like rain formation or in many industrial processes involving sprays, especially those occurring in internal combustion engines. The physics involved is very rich, making the prediction of post-collisional outcome quite a challenging task. The first experimental studies [7-8] available were focused on water drops collisions in air. Successive studies like [9] extended the investigation to the behavior of hydrocarbons.

The relevant parameters that characterize this phenomenon are the densities and viscosities of liquid and gaseous phases, respectively  $\rho_L$ ,  $\rho_G$ ,  $\mu_L$  and  $\mu_G$ , the surface tension  $\sigma$ , the radii  $R_1$  and  $R_2$  of the colliding drops and, the relative speed  $U$  and finally the displacement in the direction normal to their relative velocity, termed  $\chi$ . From these eight parameters it is possible

to derive five nondimensional quantities that characterize the process, namely the Weber and Reynolds numbers, defined respectively as

$$We = \frac{\rho_L U^* (R_1 +)}{\sigma} \text{ and } Re = \frac{\rho_L U^* (R_1 +)}{\mu_L}$$

the ratio of drop sizes,  $\gamma = \frac{R_1}{R_2}$ , the dynamic viscosity ratio  $\gamma = \frac{\mu_L}{\mu_G}$

and finally the so-called impact factor  $B = \frac{U^*}{R_1}$ . Depending on these parameters, five different possible collision outcomes have been identified [9]. They are reported in Fig. 3.

When coming to the numerical simulation of such phenomena, it is worth to underline that, together with a correct tracking of interfaces undergoing massive deformations, a numerical scheme should also assure the conservation of the masses of the two phases, since the amount of gas absorbed in the liquid surface layer during the collision is negligible [9].

In [10-11] the volume of fluid (VOF) and front-tracking schemes are respectively used, while in [12] remarkable agreement with the experiments of [9] was achieved by using the level-set method. All these methods are based on NS equations and require some artificial technique to track the interface. This is not the case of the SC-LBM model previously described, which naturally preserves the interfaces among different phases: in [13] it has been applied to simulate binary droplet collision at different Re and We reported in [9]. In order to reach the high Reynolds number reported in the experiments, the SC model has been coupled with a Multiple-Relaxation-Time scheme (MRT) [14]. In all the simulations the density ratio is 50. The goal is to reproduce all five collision regimes reported in [9].

Figure 4 shows a case of pure coalescence (Regime II): in this case  $Re=14.8$ ,  $We=0.02$  and  $B=0.20$ . Since inertial effects are negligible when compared to surface tension, the droplets experience small deformation while they approach and the gas is squeezed out to an amount of a few Angstroms: the droplets touch, and will not separate anymore because of the small amount of initial kinetic energy. The case reported in Figure 5 is opposite: here  $We=60.1$ ,  $Re=302.8$  and  $B=0.55$  therefore, despite the high impact factor, the initial kinetic energy is high enough

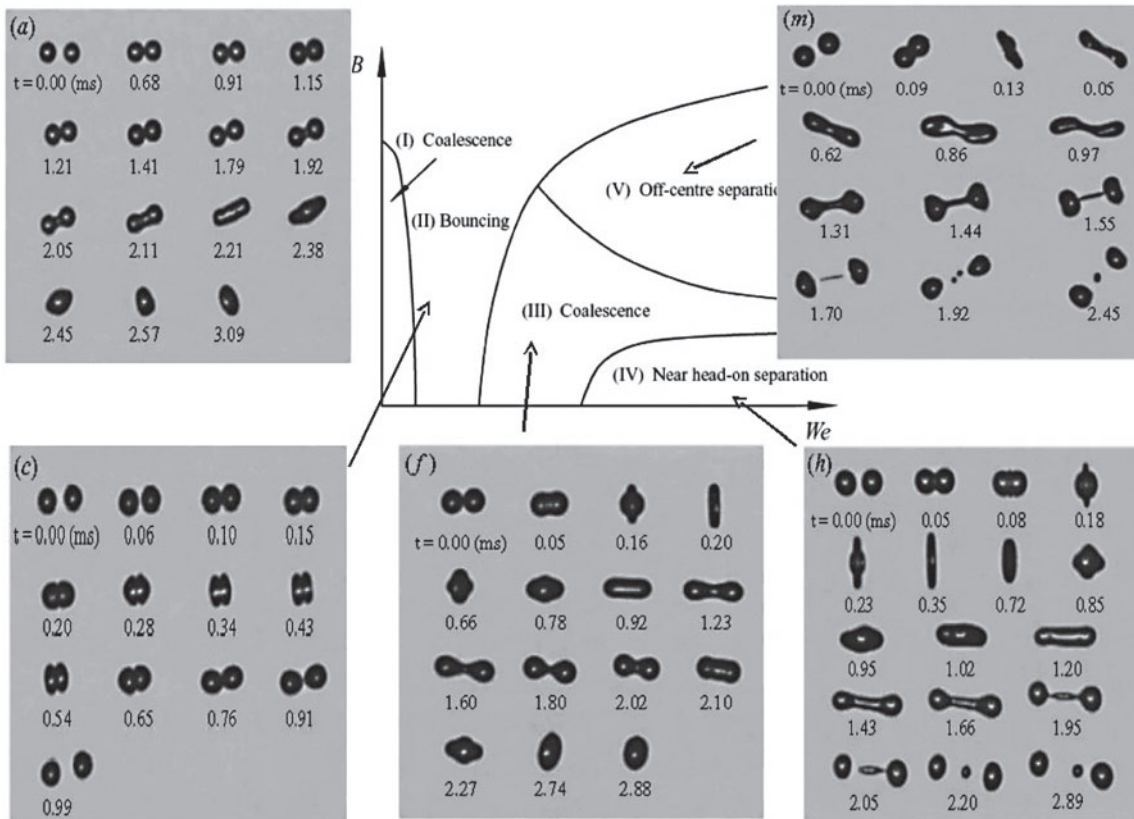
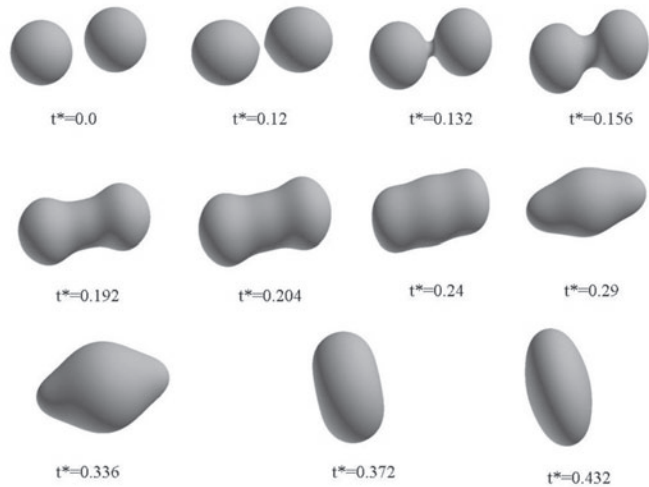
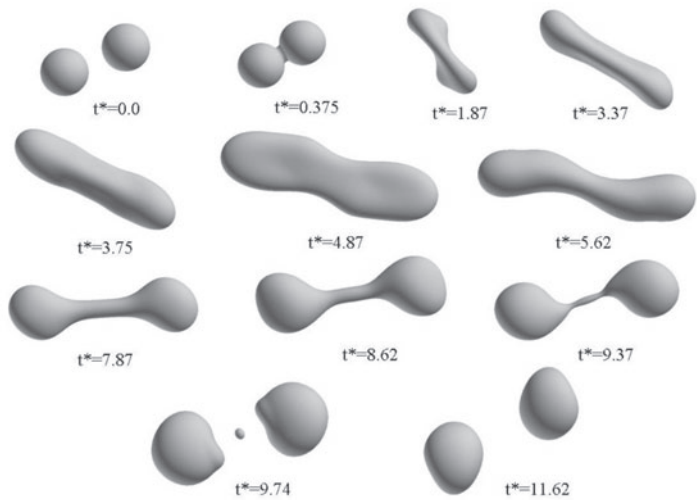


Figure 3: The different possible collision outcomes as reported in [9]

to overcome the surface tension force, and the initially merged droplet will undergo extensive deformation with the production of a neck connecting two globules. This neck finally breaks because of the so-called end pinching mechanism [9]. When comparing these simulations respectively with cases “a” and “m” reported in [9] and also in Figure 3, a good qualitative agreement is evident. In [13], all the regimes were reproduced, except bouncing (Regime II). Finally, these results can be compared to other similar works employing LBM [15-16]: the density ratio is higher than reported in [15] (2 and 4 according to the cases) while in [16] the density ratio is the same, but the multiphase model is much more complex and computationally expensive.



*Coalescence of droplets: Figure 4: LBM simulation of case “a” from [9]. The nondimensional time is computed as  $t^*=tU/D$ .*



*Off-centre separation: Figure 5: LBM simulation of case “m” from [9]. The nondimensional time is computed as  $t^*=tU/D$ .*

## References

- [1] S. Chen and G. D. Doolen: The Lattice Boltzmann Method for fluid flows, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 30: 329-364, 1998.
- [2] X. Shan and H. Chen: Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components, *Phys. Rev. E* 47: 1815-1819, 1993.
- [3] P. Yuan and L. Schaefer: Equations of state in a LB model, *Phys. Fluids* 18, 2006.
- [4] E. Monaco, K.H. Luo and R. S. Qin: Lattice Boltzmann simulations for and mesoscale phenomena, *Proceedings of the Fifth International Conference in Fluid Mechanics*, Aug. 15-19 2007, Shanghai, China, Tsinghua University Press & Springer:654-657, 2007.
- [5] D. Holdych, J. G. Georgiadis and R. O. Buckius: Hydrodynamic instabilities of near-critical CO<sub>2</sub> flow in microchannels: Lattice Boltzmann simulation, *Phys. Fluids*, 16(5): 1791-1802, 2004.
- [6] J. Pettersen: Two-phase flow patterns in microchannel vaporization of CO<sub>2</sub> at near-critical pressure, *Heat Transf. Eng.*, 35: 52-60, 2004.
- [7] J. R. Adam, N. R. Lindbland and C. D. Hendricks: The collision, coalescence and disruption of water droplets, *J. Appl. Phys.* 39: 5173-5180, 1968.
- [8] N. Ashgriz and Y. Poo: Coalescence and separation in binary collisions of liquid drops, *J. Fluid Mech.* 221: 183-204, 1990.
- [9] J. Qian and C. K. Law: Regimes of coalescence and separation in droplet collision dynamics, *J. Fluid Mech.* 331: 59-80, 1997.
- [10] B. Lafaurie, C. Nardone, R. Scardovelli, S. Zaleski and G. Zanetti: Modeling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER, *J. Comput. Phys.* 113: 134-147, 1994.
- [11] M. Nobari, Y. J. Jan and G. Tryggvason: Head-on collision of drops-A numerical investigation, *Phys. Fluids* 8: 29-42, 1996.
- [12] Y. Pan and K. Suga: Numerical simulations of binary liquid droplet collision, *Phys. Fluids* 17, 2005.
- [13] K. H. Luo, J. Xia and E. Monaco: Multiscale modeling of multiphase flow with complex interactions, *Journal of Multiscale Modeling*, accepted.

- [14] P. Lallemand, L. S. Luo: Theory of the Lattice Boltzmann method: Dispersion, isotropy, Galilean invariance and stability, Phys. Rev. E 61: 6546-6562, 2000.
- [15] K. N. Premnath and J. Abraham: Simulations of binary droplet collisions with a multiple-relaxation-time Lattice Boltzmann model, Phys. Fluids 17, 2005.
- [16] T. Inamuro, S. Tajima and F. Ogino: Lattice Boltzmann simulation of droplet collision dynamics, Int. J. Heat Mass Transfer 47: 4649-4657 2004.

### 4.3 Aerodynamische Analyse von Kleinwindanlagen mit vertikaler Achse

*Merim Mukinovic, Ardavan Rahimi, Sayed Ahmadi, Gunther Brenner;  
Institut für Technische Mechanik*

Aufgrund ihrer Umweltverträglichkeit und der Fortschritte im Bereich der Windkrafttechnologie erlangt die Windenergie im Bereich der erneuerbaren Energien eine stetig zunehmende Bedeutung. Dies gilt auch für Kleinwindanlagen mit einer nominellen Leistung zwischen 5 und 25 kW zur dezentralen Erzeugung von Elektrizität. Dieser Umstand hat in den letzten Jahren das Interesse an Anlagen mit vertikal angeordneter Drehachse – dem Prinzip von Darrieus folgend – wieder angefacht, nachdem diese Technologie in den 80er Jahren durch Konzepte mit horizontaler Drehachse verdrängt wurde. Die VAWT (Vertical-Axis Wind Turbines) haben gegenüber den konventionellen HAWT (Horizontal-Axis Wind Turbines) einige Vorteile aufzuweisen. Die VAWT arbeitet unabhängig von der Windrichtung und benötigt somit keine Windnachführung. Daraus resultieren einfachere Bauweisen und potentiell geringere Herstellungs- und Wartungskosten, weswegen sie besonders für kleine Anlagengrößen attraktiv erscheinen. Demgegenüber steht eine komplexere Aerodynamik aufgrund der bauartbedingten Instationarität der Strömung. Die daraus resultierenden aerodynamischen Wechsellasten waren auch der Grund für das Versagen einiger Darrieus Anlagen in den 80er Jahren. Hinzu kommt, dass die Leistungsausbeute der bisher ausgeführten Anlagen bei gleicher Systemgröße kleiner als bei horizontalachsigen Mitbewerbern ist. Die heute zur Verfügung stehenden experimentellen Daten sowie neue Simulations- und Berechnungsmethoden haben das Verständnis und die Quantifizierung der Aerodynamik von VAWTs gründlich verbessert. Zusammen mit neuen, hochfesten Materialien resultieren daraus neue Möglichkeiten

für das Marktsegment der kleinen, vertikalachsigen Windkraftanlagen. Der vorliegende Beitrag gibt einen Überblick über den Stand der Forschung im Bereich der Aerodynamik von vertikalachsigen Windkraftanlagen und die daraus resultierenden Forschungsthemen. Es werden Potenziale aufgezeigt, die sowohl die methodische Vorgehensweise betreffen als auch die vertikalachsigen Windkraftanlagen selber. Die Arbeiten wurden im Rahmen von Förderprojekten (ProInno und BMU) in Kooperation mit einem mittelständischen Hersteller von Windkraftanlagen durchgeführt.

### Stand der Forschung

Das Prinzip der vertikalen Windkraftanlagen wurde bereits im Mittelalter zur Gewinnung von Energie genutzt. Die persischen Windmühlen aus dem 7ten Jahrhundert bestanden aus tragflügelähnlichen Flächen, die an einer vertikal zum Boden angeordneten Drehachse befestigt wurden. Je nach Stellung dieser Tragflügel wurden diese vom Wind „mitgenommen“ und trieben so den Rotor und daran angeschlossene Maschinen an. Wesentliches Merkmal dieser Anlagen ist, dass die Umfangsgeschwindigkeit des Rotors stets kleiner als die Windgeschwindigkeit ist (Langsamläufer) und die Kraft zum Antrieb des Rotors aus dem Widerstand des Tragflügels resultiert (Widerstandsläufer). Die ersten schnelllaufenden vertikalachsigen Windkraftanlagen gehen auf den französischen Ingenieur Georges Darrieus zurück und wurden 1932 in den USA patentiert. Der Antrieb resultiert hier aus dem aerodynamischen Auftrieb, d. h. einer Kraft senkrecht zur Strömungsrichtung am Tragflügel. Eine Prinzipskizze ist in Abbildung 1 dargestellt. Durch die Drehung des Rotors verändert der Tragflügel während eines Umlaufs seinen Anstellwinkel periodisch, da sich Betrag und Richtung der Anströmung aus der vektoriellen Überlagerung des Windgeschwindigkeit und der Umfangsgeschwindigkeit des Tragflügels ergeben. Ähnliche aerodynamische Verhältnisse liegen bei Rotoren von Hubschraubern oder dem Voith-Schneider Antrieb vor. Die Amplitude der Anstellwinkelvariation hängt im Wesentlichen von der Schnelllaufzahl, d. h. dem Verhältnis aus Umfangsgeschwindigkeit des Rotors und Windgeschwindigkeit ab. In den Bereichen der Schnelllaufzahl, die für den Betrieb von kleinen vertikalen Windkraftanlagen typisch sind, beträgt diese Variation bis zu  $45^\circ$ , siehe Abbildung 2.



Abbildung 1: Prinzipskizze einer vertikalen Windkraftanlage und Koordinatensysteme

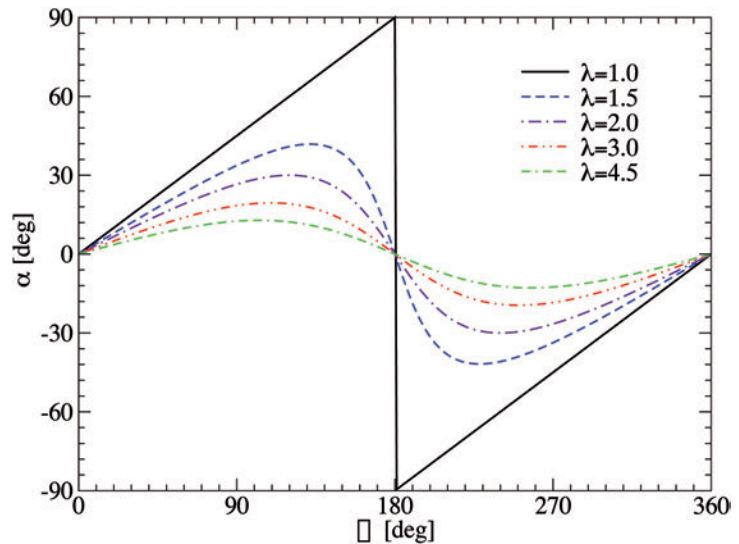


Abbildung 2: Variation des Anstellwinkels eines Tragflügelprofils einer vertikalen Windkraftanlage

Aus diesen periodischen Veränderungen resultieren die charakteristischen aerodynamischen Eigenschaften der Anlage. Bewegt sich der Tragflügel durch den Luvbereich des Rotors, bewirkt die Auftriebskraft einen Vortrieb; es wird ein Drehmoment erzeugt das letztlich zur Energiegewinnung genutzt wird. In dieser Phase nimmt der Anstellwinkel stetig zu und es kommt ggf. zu Strömungsablösung und einem Zusammenbruch des Auftriebs. Bewegt sich der Tragflügel entlang der Leeseite, bewirkt dessen Umströmung eine Abbremsung des Rotors. Da die Windgeschwindigkeiten im Lee des Rotors deutlich geringer sind als auf der Luvseite sind diese Bremsmomente kleiner und es resultiert insgesamt eine positive Leistungsbilanz.

Ansätze zur Modellierung der Leistungscharakteristik von vertikalen Windkraftanlagen stammen aus den 1980er Jahren, siehe z. B. [1-2]. Auf der Basis der Stromfadentheorie wurde in [3] ein relativ einfacher Ansatz vorgestellt, der auch heute noch zur Vorauslegung und Optimierung von vertikalen Windkraftanlagen genutzt wird. Das Verfahren basiert auf einer Bilanzierung von Impulsflüssen an einem ebenen Vertikalrotor. Zur Auswertung der Kräfte am Tragflügel benötigt das Verfahren die Auftriebs- und Widerstandspolaren des verwendeten

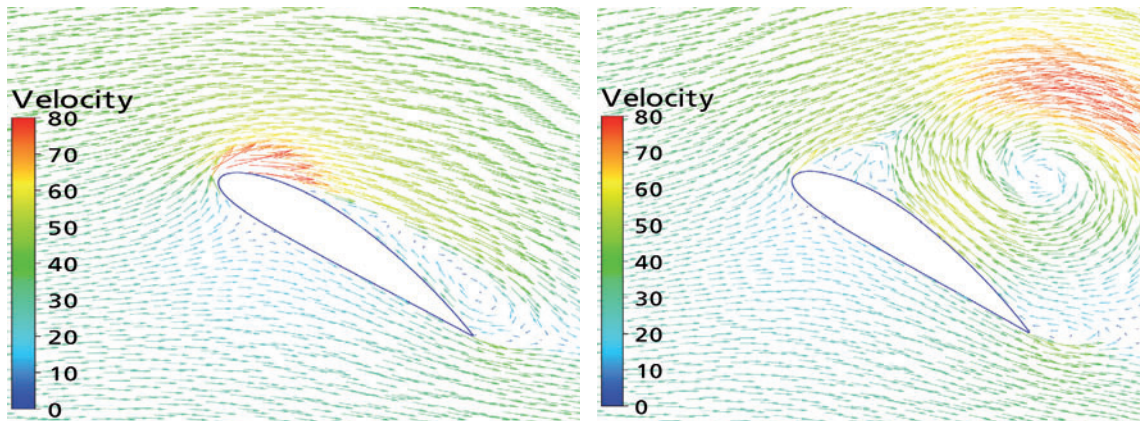


Tragflügelprofilen. Diese können als Funktion des Anstellwinkels parametrisiert werden und aus Messungen oder Simulationen gewonnen werden. Ein wesentliches Problem ist an dieser Stelle, dass der Dynamik der Winkeländerung und der Kräfte auf diesem Wege nicht Rechnung getragen wird. Tatsächlich sind die aerodynamischen Beiwerte bei dynamischer Anstellwinkelveränderung deutlich verschieden von quasi-statischen Polaren. Dieser Effekt – als dynamisches Überziehen oder „dynamic stall“ bezeichnet – führt dazu, dass das Profil kurzfristig erheblich größere aerodynamische Kräfte überträgt als unter quasi-statischen Bedingungen. Dies führt einerseits zu einer deutlich höheren Leistungsausbeute, aber auch zu höheren Belastungen. Aus diesem Grunde widmen sich neuere Arbeiten insbesondere diesen dynamischen Effekten. In [4] wird auf der Basis der Potentialtheorie dargestellt, dass die Betz'sche Grenze des Leistungsbeiwertes von 59 % bei vertikalen Windkraftanlagen unter bestimmten Voraussetzungen überschritten werden kann, auch wenn dies in der Praxis noch nicht realisiert werden konnte. Genauere Angaben zum aerodynamischen Verhalten von vertikalen Windkraftanlagen lassen sich nur quantifizieren, wenn das Geschwindigkeitsfeld um die Tragflügel orts- und zeitaufgelöst bestimmt wird.

Neue experimentelle Techniken zur Visualisierung von Strömungen wie die PIV Technik (Particle Image Velocimetry) bieten hierfür hervorragende Möglichkeiten, wie beispielsweise in [5] gezeigt. Die Simulation der Strömung mittels CFD (Computational Fluid Dynamics) bietet neben dem Experiment einen weiteren Ansatz zur genauen Quantifizierung von Leistungsparametern. Anders als im Experiment lassen sich in der Simulation allerdings sehr viel detailliertere Daten über lokale Größen wie Geschwindigkeit oder Druck zeitgenau darstellen. Neben der Ermittlung von globalen Kennwerten bietet die Simulation somit einen Weg, genaue Daten zur Klärung von Phänomenen und zur Verifizierung von Parametermodellen zur Verfügung zu stellen. In diesem Sinne wurden in [6] zwei-dimensionale instationäre Berechnungen durchgeführt und zur Verifizierung von aerodynamischen Entwurfsverfahren verwendet. Erste drei-dimensionale Berechnungen sind in [7] dokumentiert. Demnach können aufgrund der Komplexität der Strömung quantitativ genaue Vorhersagen mittels CFD nur dann vorgenommen werden, wenn die drei-dimensionale und instati-

onäre Strömung berechnet wird. Diese Berechnungen stellen herausragende Anforderungen an die eingesetzten Modelle und Verfahren. Einerseits erfordert die Vorhersage einer instationären und turbulenten Strömung um einen Tragflügel, der ständig im Grenzbereich des dynamischen Überziehens arbeitet, den Einsatz geeigneter Turbulenzmodelle. Zum anderen sind die Berechnungen extrem zeitaufwändig, sodass Hochleistungsrechner mit mehreren hundert Prozessoren eingesetzt werden müssen, um in sinnvollen Zeiten Parametervariationen durchführen zu können. Im vorliegenden Projekt wurde neben einem kommerziellen Verfahren (ANSYS CFX) ein Programm eingesetzt, welches am DLR (Deutsches Zentrum für Luft und Raumfahrt) entwickelt wurde (tau-code). Beide Verfahren basieren auf der Diskretisierung und approximativen Lösung der zeitabhängigen, reynoldsgemittelten Navier-Stokes (RANS) Gleichungen mittels der Finite-Volumen Technik. Die Berechnungen werden auf den Rechnern des HLRN (Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen) durchgeführt. Dabei handelt es sich um ein SGI Altix System mit über 700 Multicore Prozessoren.

Abbildung 3: Geschwindigkeitsfelder beim Auf- bzw. Abwärts-schlag des Tragflügels



### Forschungsaufgaben

Die konkreten Ziele des vorliegenden Projektes sind folgende: Auf der Basis numerischer Berechnungen soll ein Beitrag zur Quantifizierung der aerodynamischen Eigenschaften von Tragflügelprofilen bei zyklischer Anstellwinkelvariation geleistet werden. Diese Daten stellen die Basis für verbesserte Parame-

termodelle dar, wie sie zur Auslegung und Optimierung von vertikalen Windkraftanlagen eingesetzt werden. Weiterhin werden instationäre, dreidimensionale Berechnungen der Strömung um die komplette Konfiguration bestehend aus Turbine und Mast durchgeführt. Mit diesen Berechnungen werden Daten zur Verifizierung der Parametermodelle bereit gestellt. Die Konfiguration dient schließlich der Validierung und Weiterentwicklung von Turbulenzmodellen zur Vorhersage von komplexen, abgelösten Strömungen.

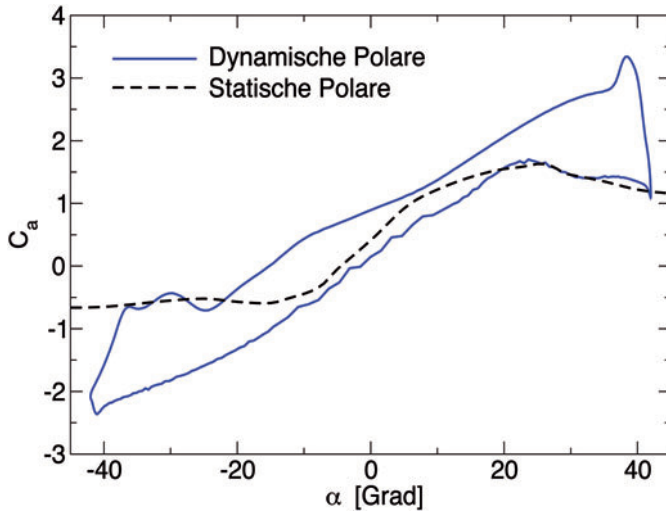


Abbildung 4: Vergleich der Auftriebs-Widerstandspolaren bei statischer und dynamischer Anstellwinkelvariation

In Abbildung 3 ist exemplarisch die Strömung um eine NACA 4418 Profil bei dynamischer Variation des Anstellwinkels gezeigt. Dargestellt sind jeweils Momentaufnahmen der Geschwindigkeitsfelder bei einem Anstellwinkel von  $40^\circ$  bei der Auf- bzw. Abwärtsbewegung des Profils. Deutlich zu erkennen sind die unterschiedlich ausgeprägten Ablösegebiete am Tragflügel.

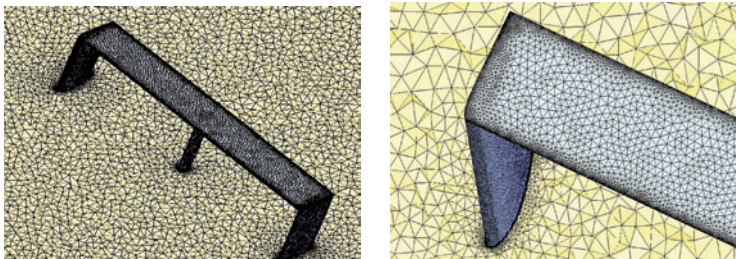


Abbildung 5: Ausschnitte des Rechengitters um das Tragflügelprofil

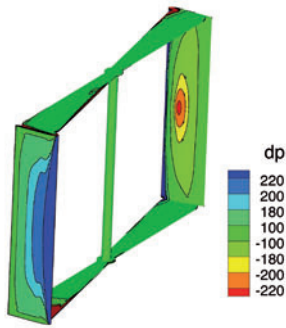


Abbildung 6: Druckverteilung auf der Tragflügeloberfläche der VWEA

In Abbildung 4 ist ein Vergleich der Auftriebs-Widerstandspolaren bei statischer und dynamischer Anstellung gegenüber gestellt. Diese Berechnungen basieren auf der Lösung der zwei-dimensionalen RANS Gleichungen und dem SST Turbulenzmodell. In Abbildung 5 ist ein Ausschnitt des Rechengitters für die Berechnung der drei-dimensionalen Strömung dargestellt. Das Gitter besteht aus ca. 30 Millionen Kontrollvolumen. Abbildung 6 zeigt die Druckverteilung auf der Oberfläche des Tragflügels. Hier ist deutlich die Variation des Druckes in Spannweitenrichtung des Tragflügels zu erkennen, die zu einer Verringerung des Auftriebs und der Leistung der Turbine führt. In Abbildung 7 ist schließlich ein Vergleich des mit verschiedenen Verfahren berechneten Leistungsbeiwertes gegenüber gestellt.

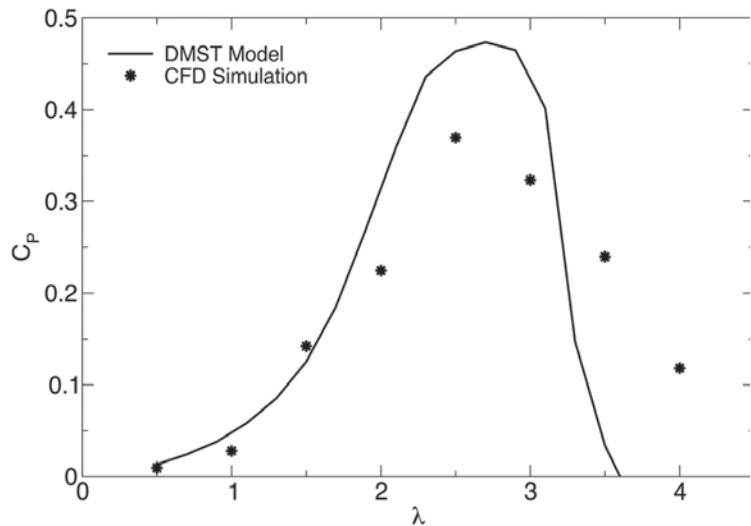


Abbildung 7: Prognostizierter Leistungsbeiwert der Windkraftanlage. Vergleich von Parametermodell und CFD Simulation

### Fazit und Ausblick

Die vorgestellten Arbeiten dienen dazu, die Möglichkeiten moderner Simulationsverfahren (CFD) anhand der komplexen und instationären Strömung um eine Windkraftanlage zu demonstrieren und diese Verfahren weiter zu entwickeln. Gleichzeitig soll ein Beitrag geleistet werden zur Verifizierung von Parametermodellen zur Auslegung und Optimierung derartiger Anlagen. Diese Parametermodelle ermöglichen wiederum eine Optimierung des Betriebsverhaltens und der Leistung von vertikalen Windkraftanlagen.

Die weiteren Berechnungen werden darauf abzielen, anhand eines virtuellen Prototyps Möglichkeiten der aerodynamischen Optimierung des Rotors mit Blick auf ein besseres Selbststartverhalten und eine Verringerung der dynamischen Lasten zu erproben. In diesem Zusammenhang wird der Wechselwirkung der Strömung mit der Struktur eine besondere Bedeutung zukommen. Durch Kopplung mit einem Strukturmechanikprogramm werden Verformungen und Belastungen in der Struktur abhängig von der Strömung berechnet und somit konstruktive Schwachstellen im Rotor sichtbar gemacht. Das mittelfristige Ziel ist es, ein Simulationsmodell zur Verfügung stellen zu können, in dem auf der Basis validierter Modelle die Belastung und die Leistung einer vertikalen Windkraftanlage im Zusammenspiel mit weiteren mechanischen Komponenten (Antriebsstrang, Mast etc.) zuverlässig vorhergesagt und bewertet werden können.

### **Beteiligte Partner**

Das Projekt ist eingebunden in eine vom Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit finanzierte Initiative zur Untersuchung des Potenzials von Kleinwindanlagen zur dezentralen Erzeugung von Energie. Zusammen mit einem mittelständischen Unternehmen (Tassa GmbH, Wolfsburg) wird an der Realisierung eines Prototyps einer vertikalen Windkraftanlage gearbeitet. Die Finanzierung erfolgt im Rahmen von ProInno durch die AiF.

### **Literatur**

- [1] Paraschivoiu, I., „Aerodynamic Loads and Performance of the Darrieus Rotor“. AIAA Journal of Energy, Vol. 6, No. 6, pp. 406-412, 1982.
- [2] Strickland, J.H. Webster, B. T. Nguyen, T., „A Vortex Model of the Darrieus Turbine: An Analytical and Experimental Study“, ASME Transactions, Journal of Fluids Engineering, Vol. 101, pp. 500-505, 1979.
- [3] Paraschivoiu, I., Delclaux, F., „Double Multiple Streamtube Model with Recent Improvement“, AIAA Journal of Energy, Vol. 7, No. 3, pp. 250-255, 1983.
- [4] Agren, O., Berg, M., Leijon, M., „A time-dependant potential flow theory for the aerodynamic design of vertical axis wind turbines“, J. Applied Physics, 97, 104913, 2005.

- [5] Fujisawa N., Shibuya, S., „Observations of dynamic stall on Darrieus wind turbine blades“, J. Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 89, pp. 201-214, 2001.
- [6] Ferreira, C. S., Bussel, G. v., „2D CFD simulation of dynamic stall on a vertical axis wind turbine: verification and validation with PIV measurements“, Proceedings of the 45th Aerospace sciences meeting and exhibit (AIAA), Reno, pp. 1-11, 2007.
- [7] Allet, A., Halle, S., Paraschivoiu, „Numerical Simulation of Dynamic Stall around an Airfoil in Darrieus Motion“, J. of Solar Energy Engineering, Vol. 121, 1999.
- [8] Ahamdi, S., „Numerische Simulation der Strömung um ein oszillierendes Tragflügelprofil“, Diplomarbeit, Institut für Technische Mechanik, TU Clausthal, 2008.
- [9] Rahimi, A., „Numerische Untersuchung der Strömung in einer Vertikalwindkraftanlage“, Diplomarbeit, Institut für Technische Mechanik, TU Clausthal, 2008.
- [10] Mukinovic, M., Brenner, G., „Berechnung und Optimierung einer Vertikal-Windenergieanlage“, Institut für Technische Mechanik, Interner Bericht, B060014, 2006.
- [11] Mukinovic, M., Brenner, G., Rahimi, A., „Aerodynamic Study of Vertical Axis Wind Turbines“, Proc. ParCFD Conference, Lyon, 2008.
- [12] Mukinovic, M., Brenner, G., Rahimi, A., „Analysis of Vertical Axis Wind Turbines“, 16th DGLR Symposium of STAB, Aachen, 2008.

#### **4.4 Übertragung von Rosenbrock-Verfahren auf Finite-Elemente Berechnungen für elastomere Strukturen**

*Stefan Hartmann, Ahmad-Wahadj Hamkar;  
Institut für Technische Mechanik*

Die Anwendung kommerzieller Finite-Elemente Software bietet heutzutage die Möglichkeit weitestgehend wirklichkeitsnah physikalische Prozesse des Ingenieurwesens wiederzugeben. Viele der in solcher Software verwendeten numerischen Berechnungsverfahren sind jedoch einfacher Natur, welche sich historisch aufgrund begrenzter Rechenleistungen und Speicherkapazitäten entwickelt haben. Einige dieser Vorgehensweisen, insbesondere quasistatische Strukturberechnungen mit Hilfe der Methode der finiten Elemente unter Berücksichtigung von Materialnichtlinearitäten für Metalle, Kunststoffe und Ela-

stomere, haben sich zwar zum Teil sinnvoll entwickelt, deren Zusammenhang zu Verfahren der Numerischen Mathematik war jedoch lange offen. Erst seit wenigen Jahren ist die Interpretation dieser Vorgehensweisen bekannt, siehe [1,2] und die dort zitierte Literatur, und offeriert nunmehr die Möglichkeit, moderne, effizientere und genauere Verfahren, die sich in der Numerischen Mathematik entwickelt haben, anzuwenden.

Da sich die Entwicklung neuer Verfahren zunächst kaum mit kommerziellen FE-Programmen vereinbaren lässt, wird in diesem Projekt an der Neuentwicklung solcher numerischer Algorithmen gearbeitet. In den derzeitigen impliziten FE-Programmen wie ANSYS, ABAQUS oder auch MARC liegt eine algorithmische Struktur aus der globalen Betrachtung der inkrementellen Lastaufbringung und der lokalen Zeitintegration der prozessabhängigen Materialeigenschaften zur Berechnung des Spannungszustandes vor. In einer modernen Betrachtung wendet man hingegen Konzepte der Numerischen Mathematik an. Bei quasistatischen mechanischen Fragestellungen liegt ein Anfangs-Randwertproblem vor, welches in Form von partiellen Differentialgleichungen in Raum und Zeit formuliert ist. Dies kann man zum Beispiel mit der vertikalen Linienmethode lösen, indem zuerst die Raum- und anschließend die Zeitdiskretisierung erfolgen. Die Raumdiskretisierung wird mit Hilfe der Methode der finiten Elemente durchgeführt und erhält daraus ein System von gekoppelten nichtlinearen Gleichungen zur Berechnung der Knotenverschiebungen. In diesen Gleichungen treten weitere, das Verfestigungsverhalten des Materials beschreibende, Variablen auf, die man als innere Variablen bezeichnet und die in Form von gewöhnlichen Differentialgleichungen den prozessabhängigen Spannungszustand definieren. Dieses System von gewöhnlichen Differentialgleichungen muss an den Quadraturpunkten der Raumdiskretisierung ausgewertet werden und hängt wiederum von der Deformation selbst ab. Der Satz aus gekoppelten nichtlinearen algebraischen Gleichungen und das System von gewöhnlichen Differentialgleichungen bilden ein sogenanntes Algebro-Differentialgleichungssystem (DAE-System). Man kann nun die Zeitintegration, welche den zweiten Schritt der vertikalen Linienmethode darstellt, dieser DAE-Systeme mit Hilfe der einfachsten Vorgehensweise, dem impliziten Euler-Verfahren, mit der sich historisch entwickelten FE-Berechnung in Verbindung bringen, siehe [2], wenn das aus der Zeitdiskretisierung he-

raus resultierende gekoppelte nichtlineare Gleichungssystem speziell gelöst wird. Dies führt im klassischen Sprachgebrauch einerseits zu einer inkrementellen Lastaufbringung und andererseits zu einer sogenannten Gleichgewichtsiteration mit lokal auf Gauss-Punktebene (Quadraturpunkte der Raumdiskretisierung) durchzuführenden Iterationen (Spannungsalgorithmus), also einer gekoppelten Schleife. Diese Vorgehensweise wurde bereits bei der Lösung von elektrischen Netzwerken verwendet und wird dort als Multilevel-Newton Verfahren bezeichnet, [4, 5]. Zusammenfassend führt also die Kombination aus implizitem Euler-Verfahren und dem Mehrebenen-Newton Verfahren zur klassischen Vorgehensweise der meisten implizit formulierten Finite-Elemente Programme.

Mit der obigen Interpretation ist es nunmehr möglich, ganz andere Verfahren zur Lösung der auftretenden Algebra-Differentialgleichungen heranzuziehen. In dem vorliegenden Projekt werden sogenannte Verfahren vom Rosenbrock-Typ verwendet, da diese bei der Zeitdiskretisierung nicht auf nichtlineare Gleichungssysteme sondern lediglich auf lineare Gleichungssysteme führen. Die Hoffnung, damit eine effizientere Vorgehensweise zu erhalten, hat sich dabei erfüllt. Dies resultiert daraus, dass bei dreidimensionalen Berechnungen nicht mehr für jeden Zeitschritt ein nichtlineares Gleichungssystem der Dimension „Anzahl der unbekanntenen Knotenverschiebungen plus Anzahl der inneren Variablen an einem Gauss-Punkt multipliziert mit der Anzahl der Gauss-Punkte der gesamten Struktur“, iterativ gelöst werden muss, was schnell auf mehrere Millionen Unbekannte führt, sondern lediglich ein lineares Gleichungssystem derselben Dimension ist. Dies führt dann auf eine völlig iterationsfreie Vorgehensweise.

Zudem ist mit der Interpretation der Finite-Elemente Diskretisierung unter Einbindung von Materialmodellen vom Evolutionsgleichungstyp (Modelle der Plastizität, Viskoelastizität und Viskoplastizität) als Algebra-Differentialgleichungen die Anwendung eingebetteter Integrationsverfahren möglich, die zur Abschätzung des lokalen Zeitintegrationsfehlers effizient angewendet werden können, um die Schrittweite zu kontrollieren. Allein dies ist von enormem Vorteil bei der Strukturberechnung, da damit vorgegebene zulässige Toleranzen kontrolliert werden können.



## Stand der Forschung

Wie bereits beschrieben wird üblicherweise das DAE-System mit Hilfe eines impliziten Euler-Verfahrens gelöst, was aus formaler Sicht dem Zeitdiskretisierungsschritt der vertikalen Liniennmethode entspricht. In [1] sind im Wesentlichen partitionierte Runge-Kutta Verfahren verwendet worden, wohingegen in [3] das Konzept auf Probleme poröser Medien angewendet und mittels sogenannter steif-genauer diagonal-impliziter Runge-Kutta Verfahren (DIRK-Verfahren) untersucht wurde. Diese Verfahren führen in jedem diskreten Zeitpunkt (d. h. auch an den (Zwischen-)Stufen) auf ein gekoppeltes nichtlineares Gleichungssystem und haben den Vorteil einer einfachen schrittweitengesteuerten Vorgehensweise (eingebettetes Verfahren), was die numerische Berechnung vieler Fragestellungen genauer und stabiler macht und Verfahren höherer Genauigkeitsordnung zulässt.

Parallel zu diesen Entwicklungen ist erkannt worden, dass die geschachtelte Vorgehensweise in der impliziten Finite-Element Methode zur Lösung des gekoppelten, aus der Zeitintegration resultierenden, nichtlinearen Gleichungssystems für die unbekanntenen Knotenverschiebungen und die inneren Variablen der gesamten Struktur, als Lösung eines "Multilevel-Newton Algorithms" (MLNA) zu interpretieren ist, siehe [4, 5]. In [2] ist die Vorgehensweise, nämlich die Anwendung der Kombination aus diagonal-implizitem Runge-Kutta Verfahren und dem Mehrebenen-Newton Verfahren im Rahmen der DAE-Interpretation publiziert worden. Als Materialmodell lag ein Viskoplastizitätsmodell vom Perzyna-Typ für kleine Deformationen vor. Eine Erweiterung auf finite Viskoelastizität für die Beschreibung des Materialverhaltens von Elastomeren ist in [6] untersucht worden. Weitere Anwendungen sind bei dem Werkstoff Polyoxymethylen in [7] sowie bei stark kompressibler finiter (Visko-)Plastizität mit druckabhängiger Fließfläche im Rahmen von Kompressionsvorgängen pulverartiger Materialien in [8] aufgeführt. Die Berücksichtigung plastischer Inkompressibilität bei von Mises-Typ Plastizität großer Verzerrungen wird bei Runge-Kutta Verfahren verletzt und muss daher gesondert betrachtet werden, siehe [9].

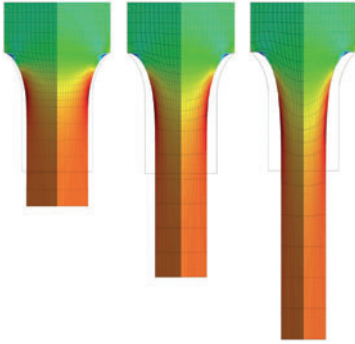
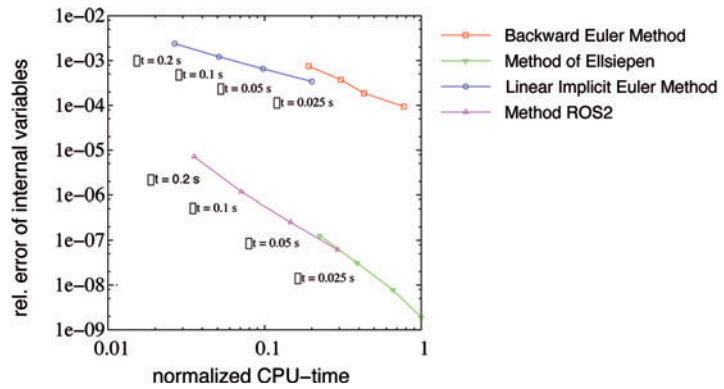


Abbildung 1: 3-D Vernetzung einer Elastomerprobe unter Zugbelastung. Darstellung nach 2, 6 und 10 s.

Abbildung 2: Genauigkeits-Aufwandsdiagramm unterschiedlicher Integrationsverfahren (Implizites Euler Verfahren und zweistufiges DIRK-Verfahren von Ellsiepen 1-ter und 2-ter Ordnung sowie linear implizites Euler Verfahren und zweistufiges Rosenbrock-Typ aus [12] 1-ter und 2-ter Ordnung)

Ein erster Ansatz mit Hilfe von Verfahren vom Rosenbrock-Typ für ein Modell der Viskoelastizität bei kleinen Verzerrungen und ebener Problemstellung ist in [10] vorgeschlagen worden. Hierauf aufbauend ist ein dreidimensionaler Code für kleine und finite Verzerrungen in diesem Projekt entstanden. In Abbildung 1 ist die Vernetzung einer Elastomerprobe dargestellt, die unter Zugbelastung steht. In Abbildung 2 ist das zugehörige Genauigkeits-Zeitdiagramm dargestellt, welches zeigt, dass bei moderaten Genauigkeiten das linear-implizite Euler-Verfahren (Rosenbrock-Verfahren erster Ordnung) dem impliziten Euler-Verfahren vorzuziehen ist. Auch ist erkennbar, dass Verfahren höherer Ordnung, bei gleichem Rechenaufwand als Verfahren erster Ordnung, erheblich genauere Ergebnisse liefern – egal ob dies ein zweistufiges DIRK (Ellsiepen) oder ein Rosenbrock-Verfahren (ROS2) darstellt.



## Forschungsaufgaben

Die grundlegende Zielsetzung der Anwendung der Verfahren vom Rosenbrock-Typ liegt in der Entwicklung eines effizienten Simulationswerkzeuges für thermomechanisch gekoppelte Problemstellungen bei elastomeren Strukturen. Neben den ursprünglichen isothermen Prozessführungen gilt es die erheblich aufwendigeren und komplexeren Fragestellungen der Koppelphänomene, die aus der Kopplung der temperaturabhängigen Materialeigenschaften sowie der durch die Dissipationseffekte beeinflusste Wärmeleitungsgleichung vorliegen, mit effizienten und hochgenauen Verfahren zu behandeln. D. h. neben dem Verschiebungsfeld und den inneren Variablen

tritt zusätzlich das Temperaturfeld auf. Bei diesen noch rechenintensiveren Anwendungen als den rein isothermen Prozessführungen, ist die geplante algorithmische Vorgehensweise vielversprechend. Ziel ist es zu zeigen, dass sich mit modernen Methoden der Numerischen Mathematik zeitabhängige Problemstellungen unter Einbeziehung inelastischer Materialeigenschaften erheblich effizienter lösen lassen, als dies derzeit mit klassischen Methoden der Fall ist. Zudem führen adaptive Strategien zu einer robusteren Vorgehensweise. Dabei müssen weiterhin die zugrundeliegenden Gleichungen genauestens betrachtet werden, um zum Beispiel die Berechnung von Lagerreaktionen, siehe [11], oder die Berücksichtigung von Nebenbedingungen, die aus der physikalischen Modellbildung heraus resultieren, siehe [9], zu berücksichtigen.

### **Fazit und Ausblick**

Neben der reinen Anwendung kommerzieller Finite-Elemente Software, erscheint die Neuentwicklung von FE-Verfahren weiterhin eine vielversprechende und erforderliche Forschungsaufgabe. So können allein durch moderne Interpretationen der zugrundeliegenden Gleichungen und der Anwendung von Verfahren der Numerischen Mathematik enorme Rechenzeiterparnisse und bei gleichem Aufwand zu klassischen Methoden höher genaue Ergebnisse erzielt werden. Dabei liegt die Notwendigkeit in der Hinterfragung der Gleichungsstrukturen und -typen, für die angepasste Algorithmen zu entwickeln sind. Dies kann zum Teil auch ohne Steigerung der Rechenleistung zu Effizienzgewinnen führen.

Die zuvor beschriebene Vorgehensweise legt es nahe, dynamische und gekoppelte Problemstellungen anzugehen und auch komplexere Materialmodelle einzubeziehen.

### **Beteiligte Partner**

In dem Projekt waren insbesondere die Herren Dipl.-Ing. Karsten Quint (Universität Kassel) und Dipl.-Ing. Torben Netz (TU Clausthal) durch Erweiterung der Programmstruktur beteiligt. Ein Dank für wertvolle Diskussionen geht an Prof. Martin Arnold (Martin-Luther-Universität Halle). Das Projekt wäre ohne die Förderung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) nicht möglich gewesen, der hierfür gedankt sei.

## Literatur

- [1] P. Fritzen: Numerische Behandlung nichtlinearer Probleme der Elastizitäts- und Plastizitätstheorie. Doctoral thesis, Department of Mathematics, University of Darmstadt, 1997.
- [2] P. Ellsiepen, P. and S. Hartmann: Remarks on the interpretation of current non-linear finite-element analyses as differential-algebraic equations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 51:679–707, 2001.
- [3] P. Ellsiepen: Zeit- und ortsadaptive Verfahren angewandt auf Mehrphasenprobleme poröser Medien. Doctoral thesis, Institute of Mechanics II, University of Stuttgart. Report No. II-3, 1999.
- [4] S. Hartmann: Zur Berechnung inelastischer Festkörper mit der Methode der finiten Elemente. In Hartmann, S., Haupt, P., and Ulbricht, V., editors, *Modellierung und Identifikation*, 119–130, Kassel. Gesamthochschul-Bibliothek, 1998.
- [5] N. B. G. Rabbat, A. L. Sangiovanni-Vincentelli, H. Y. Hsieh: A multilevel Newton algorithm with macromodeling and latency for the analysis of large-scale nonlinear circuits in the time domain. *IEEE Transactions on Circuits and Systems*, 26:733–740, 1979.
- [6] S. Hartmann: Computation in finite strain viscoelasticity: finite elements based on the interpretation as differential-algebraic equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191(13-14):1439–1470, 2002.
- [7] S. Hartmann: A thermomechanically consistent constitutive model for polyoxymethylene: experiments, material modeling and computation. *Archive of Applied Mechanics*, 76:349–366, 2006.
- [8] S. Hartmann, S., W. Bier: High-order time integration applied to metal powder plasticity. *International Journal of Plasticity*, 24(1):17–54, 2008.
- [9] S. Hartmann, K. Quint, M. Arnold: On plastic incompressibility within time-adaptive finite elements combined with projection techniques. In press *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2008.
- [10] S. Hartmann, J. Wensch: Finite element analysis of viscoelastic structures using Rosenbrock-type methods. *Computational Mechanics*, 40:383–398, 2007.
- [11] S. Hartmann, K. J. Quint, A.-W. Hamkar: Displacement control in time-adaptive nonlinear finite-element ana-

lysis. Journal of Applied Mathematics and Mechanics, 88(5):342–364, 2008.

[12] K. Dekker, J.G. Verwer: Stability of Runge-Kutta methods for stiff nonlinear differential equations, North-Holland Elsevier Science Publishers, 1984.

## 4.5 Zeitadaptive thermomechanisch gekoppelte Strukturberechnungen mit Hilfe der Methode der finiten Elemente

In vielen technischen Anwendungen sind Bauteile einer Kombination aus thermischen und mechanischen Belastungen ausgesetzt. Beispiele sind die Kolben und Zylinder in einem Verbrennungsmotor, Rohrleitungen und Dampfkessel in einem Dampfkraftwerk und die Schaufeln in einer Gasturbine. Aber nicht nur während des Bauteileinsatzes können thermomechanische Belastungen vorliegen, sondern diese treten häufig schon während der Herstellung auf. Besondere Aufmerksamkeit wird derzeit den sogenannten thermomechanischen Verfahren gewidmet. Hierbei werden durch die Kombination von thermischer Einwirkung und plastischer Verformung Materialeigenschaften erreicht, welche durch alleinige Wärmebehandlung nicht erzielt werden können. Bereits erfolgreich eingesetzt wird dies beim Formhärten in der Automobilindustrie. Hier werden Stahlbleche auf ca. 950°C aufgeheizt, bevor sie in einer Presse umgeformt und abgekühlt werden. Dadurch wird gegenüber konventionell hergestellten Strukturteilen die Festigkeit erhöht und gleichzeitig das Gewicht reduziert. Trotz dieser beachtlichen Erfolge fehlen noch ein tiefgehendes physikalisches Verständnis und insbesondere effiziente Algorithmen zur Simulation der Herstellung. Für die Simulation hat sich inzwischen die Methode der finiten Elemente etabliert, da sie einerseits sehr vielseitig ist und andererseits sehr viele Erfahrungen mit der Methode und ihrer Implementierung vorhanden sind.

Historisch wurde die Methode der finiten Elemente sukzessiv erweitert. Zunächst wurden statische Problemstellungen mit linear-elastischen Materialmodellen gelöst. Später wurden nichtlineare Materialmodelle der Plastizität, Viskoelastizität und Viskoplastizität bei quasistatischen Prozessführungen integriert, was auf die Entwicklung expliziter und impliziter kom-

*Stefan Hartmann, Karsten Jens Quint;  
Institut für Technische Mechanik*

merzieller Finite-Elemente Programme führte. Ausgangspunkt waren die linearen Finite-Elemente Programme, die in inkrementellen Formulierungen die Struktur der zuvor entwickelten Finite-Elemente Programme beibehielten. In den 80er-Jahren entstand ein besonderer Meilenstein, da die entstandene Formulierung auf eine inkrementelle Laststeuerung in Verbindung mit einem Newton-Verfahren gebracht wurde und sich mit Begriffen wie Spannungsalgorithmus, konsistenter Tangentoperator, Newton-Verfahren, etc. etablierte. Dabei werden die äußeren Lasten inkrementell aufgebracht und das Gleichgewicht iterativ gelöst. Innerhalb einer solchen Iterationsschleife besteht die Aufgabe einer weiteren iterativen Berechnung der Spannungen. Die Sichtweise der Entwickler blieb dabei auf Zeitintegrationsverfahren an einem einzelnen Integrationspunkt (Gauss-Punkt) innerhalb eines Elementes beschränkt. Hierbei werden die für das Gleichgewicht notwendigen Spannungen mit Integrationsverfahren für die auftretenden inneren Variablen (plastische Dehnungen, Verfestigungsvariablen, ...) unterschiedlichster Art berechnet. Diese Verfahren sind vorwiegend von geringer Genauigkeitsordnung oder aber es werden Gauss-punktweise Verfahren höherer Ordnung angewendet, ohne die Eigenschaften der Nachbarpunkte zu beachten. Das grundlegende Problem in dieser Entwicklung lag lange Zeit darin, dass sich zunächst der Zusammenhang der auf Gauss-Punktebene durchzuführenden Berechnungen und den globalen inkrementellen Vorgehensweise mit der darin auftretenden Gleichgewichtsiteration nicht mit Verfahren der Numerischen Mathematik erklären ließen. In [1] ist erstmalig der Zusammenhang mit Lösungsverfahren zur Berechnung von Algebro-Differentialgleichungen in Verbindung gebracht worden, was die Möglichkeit der Anwendung moderner, effizienter und genauer Verfahren, die sich in der Numerischen Mathematik entwickelt haben, offeriert. Das Algebro-Differentialgleichungssystem (DAE-System) entsteht dabei aus der Semi-Diskretisierung des Anfangs-Randwertproblems, bei dem der erste Schritt der vertikalen Linienmethode mit Hilfe der Raumdiskretisierung unter Zuhilfenahme der Methode der finiten Elemente durchgeführt wird. Die hierbei entstehenden DAE-Systeme lassen sich effizient mit zeitadaptiven Integrationsverfahren (diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren) lösen, da diese die Struktur derzeitiger FE-Programme kaum beeinflussen. Bei diesen Verfahren ist in jedem Zeitpunkt (Stufe) ein gekoppeltes nichtlineares Glei-

chungssystem zu lösen. Dies wird fälschlicherweise bei vielen Problemstellungen als Newton-Raphson Verfahren bezeichnet, ist jedoch der Multilevel-Newton Algorithmus (siehe [2, 3]).

In diesem Projekt besteht die Zielsetzung einer schrittweisen-gesteuerten Berechnung thermomechanisch-gekoppelter Problemstellungen, bei der neben den partiellen Differentialgleichungen der Impulsbilanz (Gleichgewichtsbedingungen) auch die Energiebilanz (Wärmeleitungsgleichung) auftritt. Die die Verfestigung des Materials beschreibenden inneren Variablen sind dabei über gewöhnliche Differentialgleichungen (zum Teil mit Fallunterscheidungen und auch algebraischen Nebenbedingungen) gegeben. Hierbei werden Materialmodelle der finiten Viskoplastizität verwendet, was geschwindigkeitsabhängige Effekte sowie große Verzerrungen bei metallischen Werkstoffen beinhaltet. Solche Problemstellungen treten insbesondere beim industriellen Umformen auf.

Die Lösung der auftretenden Algebro-Differentialgleichungen, bei denen der differentielle Anteil aus der Wärmeleitungsgleichung und den Evolutionsgleichungen der inneren Variablen besteht und der algebraische Anteil aus den Gleichgewichtsbedingungen folgt, soll in diesem Projekt daher unter der Berücksichtigung der temperaturabhängigen Materialeigenschaften betrachtet werden. Insbesondere liegt der Fokus auf der effizienten Berechnung der auftretenden gekoppelten nichtlinearen Gleichungssysteme, was gleichfalls die effiziente Lösung der darin auftretenden linearen Gleichungssysteme impliziert.

## **Stand der Forschung**

In [1] wurde die Neu-Interpretation der Methode der finiten Elemente unter Einbeziehung von Materialmodellen vom Evolutionsgleichungstyp dargelegt. Hierbei sind im Wesentlichen diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren (DIRK) für die Behandlung eines Modells der Viskoplastizität bei kleinen Verzerrungen (von Mises Plastizität mit kinematischer Verfestigung und Perzyna-Chaboche-Ansatz zur Einbindung geschwindigkeitsabhängiger Effekte) herangezogen worden. Dabei lässt sich zeigen, dass insbesondere das implizite Euler-Verfahren, welches den einfachsten Spezialfall der DIRK-Verfahren darstellt, in Verbindung mit dem Multilevel-Newton Algorithmus

(MLNA), siehe [1-3], auf die Struktur derzeitiger FE-Programme führt. Die zeitadaptive Vorgehensweise durch eingebettete DIRK-Verfahren ist dann eine konsequente Fortführung der Programmierung. Die Verfahren führen in jedem diskreten Zeitpunkt auf ein gekoppeltes nichtlineares Gleichungssystem, welches bisher mit dem MLNA gelöst wurde. Dieses Verfahren wertet innerhalb einer Newton-Iterationsschleife den Satz über implizite Funktionen aus, was auf eine zusätzliche Iterationsschleife zur Berechnung der inneren Variablen führt (dies wird üblicherweise als Spannungsalgorithmus bezeichnet). Es lässt sich jedoch bei einfachen Materialmodellen zeigen, siehe [3], dass das Newton-Raphson Verfahren, bei dem keine innere Iteration existiert, auf erheblich schnellere Berechnungen führt, insofern auf Gauss-Punktebene der Aufwand mit analytischen Hilfsmitteln nicht drastisch reduziert werden kann. Bei Problemen der finiten Viskoplastizität führt die bisherige DIRK/MLNA-Prozedur bei stark druckabhängiger Fließfläche im Rahmen von Kompressionsvorgängen pulverartiger Materialien in [4] sogar zu großen Schwierigkeiten, da die großen Nichtlinearitäten große Konvergenzschwierigkeiten implizieren und mit speziellen Lösern für nichtlineare Gleichungssysteme auf Gauss-Punktebene gearbeitet werden muss. Für einen Effizienzgewinn sowie eine Stabilisierung der traditionellen Vorgehensweise müssen daher die auftretenden nichtlinearen Gleichungssysteme sowie die damit verbundene numerische Lösung der linearen Gleichungssysteme speziell untersucht werden.

Die neue Interpretation legt es auch nahe, sich bei der Betrachtung der Gleichungsstrukturen Gedanken über die Berechnung von Lagerkräften zu machen, da diese nicht explizit in verschiebungsbasierten FE-Formulierungen berechenbar sind. Die Anwendung der Methode der Lagrange-Multiplikatoren liefert jedoch die Möglichkeit einer präzisen Darstellung der Gesamtvorgehensweise (siehe [6]).

Eine besondere Fragestellung ist die Berücksichtigung der in der Umformtechnik häufig verwendeten Annahme der Inkompressibilität plastischer Deformationen. Diese Annahme wird zwar in den Materialgleichungen berücksichtigt, jedoch die Anwendung von DIRK-Verfahren führt zur Verletzung dieser Bedingung. Auch hier liefert die Numerische Mathematik Methoden zur Einbeziehung einer solchen Bedingung in Form



eines Projektionsverfahrens innerhalb sogenannter geometri-erhaltender Integrationsverfahren, welches die Ordnung des Zeitintegrationsverfahrens unbeeinflusst lässt und einfach zu implementieren ist, siehe [5].

## **Forschungsaufgaben**

In diesem Projekt geht es um die Lösung großer gekoppelter nichtlinearer Gleichungssysteme, die innerhalb zeitadaptiver Finite-Element Berechnungen mehrere hundert Mal zu lösen sind. Aufgrund deren Struktur innerhalb thermomechanisch gekoppelter FE-Berechnungen sind unterschiedliche Lösungs-prozeduren zu programmieren. Da in den verwendeten Ver-fahren (MLNA, Newton-Raphson, Block-Gauss-Seidel, ...) line-are Gleichungssysteme auftreten, sind insbesondere direkte Löser für dünn besetzte unsymmetrische Matrizen (Pardiso, Umfpack) mit iterativen Lösungsverfahren (GMRES, BiCGstab) und diverse Vorkonditionierungstechniken sequentieller Gleichungslösungen untersucht worden. Die Untersuchungen standen zunächst für isotherme Problemstellungen im Vorder-ground und werden zukünftig auf volle Kopplungsproblemstel-lungen adaptiert.

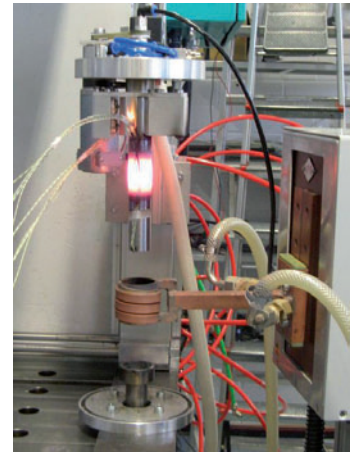
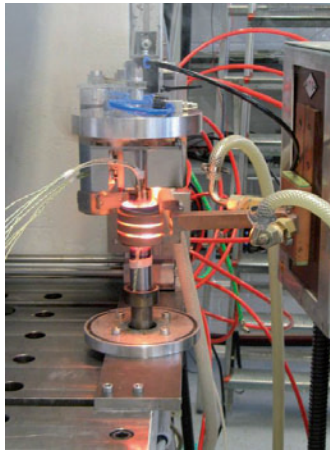
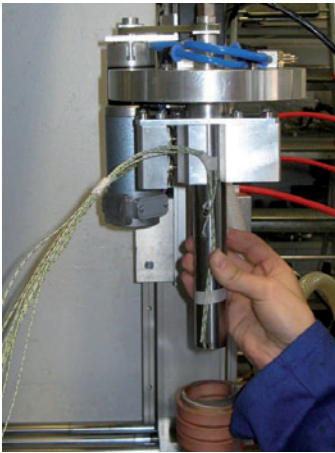
Neben diesen Fragestellungen für die thermomechanisch ge-koppelte Festkörpermechanik, liegt ein zweiter Schwerpunkt auf der Untersuchung von Abkühlvorgängen durch anströ-mendes Gas. Die Codierung impliziert das Zusammenspiel eines Fluidlösers und des Festkörperlösers, bei dem ebenfalls die Zeitadaptivität mit Zeitintegrationsverfahren höherer Ord-nung sowie die Lösung der dabei auftretenden gekoppelten nichtlinearen Gleichungslöser auftreten. Diese Fragestellung fällt in die derzeitige wissenschaftlich sehr aktiv behandelte Fra-gestellung der Fluid-Struktur-Interaktion. Insbesondere muss hier der Inhouse-Code TASAFEM mit dem am DLR entwickelten  $\tau$ -Code verbunden werden.

## **Fazit und Ausblick**

Die bisherigen Untersuchungen zeigen, dass die explizite al-gorithmische Berücksichtigung der Nebenbedingung der pla-stischen Inkompressibilität bei Verfahren höherer Ordnung von untergeordneter Bedeutung ist. Aus Effizienzgründen ist der

Projektionsschritt nicht notwendig, da die Genauigkeit der Lösung kaum verbessert wird.

Es zeigt sich zudem, dass die Weiterentwicklung von direkten Lösern zur Lösung großer dünn besetzter unsymmetrischer Matrizen und die Möglichkeit zur Ausnutzung mehrerer Prozessoren für viele Anwendungen ausreichend erscheint. Erst für sehr große Strukturberechnungen sind iterative Löser mit besonderen Vorkonditionierungstechniken notwendig. Dabei ist jedoch die Untersuchung der Lösung des darüber liegenden nichtlinearen Gleichungssystems erforderlich, da die inneren Variablen, die derzeit auf Gauss-Punktebene innerhalb des MLNA gelöst werden, ausschlaggebend für die effiziente Berechnung sind. Daher ist geplant, Lösungsverfahren für gekoppelte nichtlineare Gleichungssysteme besonders zu untersuchen.

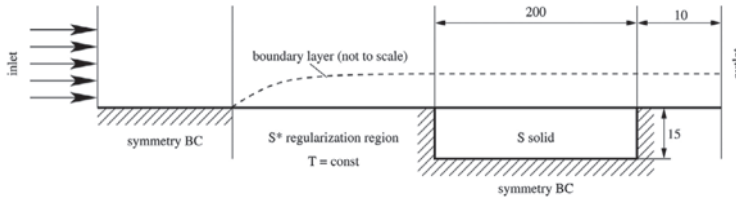


*Abbildung 1: Lokales Erwärmen mittels Induktion und anschließende Messung des Abkühl- und Wärmeleitvorganges in der Zylinderprobe*

Der Zeit-Temperatur-Verlauf ist maßgeblich für die Phasen im Stahl und somit die Materialeigenschaften. Daher werden derzeit Messungen des Abkühlvorganges an zylindrischen Proben durchgeführt. Diese werden zunächst induktiv erhitzt und dann mittels Druckluftkühlung oder freier Konvektion abgekühlt, siehe Abbildung 1. Ziel ist es, diesen Prozess zu simulieren und somit Vorhersagen über die endgültigen Materialeigenschaften zu treffen. Dies wird zunächst an einer vereinfachten zweidimensionalen Geometrie, der ebenen Platte, untersucht, siehe Abbildung 2. Diese Simulation wird von den zwei Program-

men, TASAFEM und  $\tau$ -Code, durchgeführt, welche auf zwei getrennten Rechnern laufen und zu jedem Zeitschritt Informationen austauschen.

a)



b)

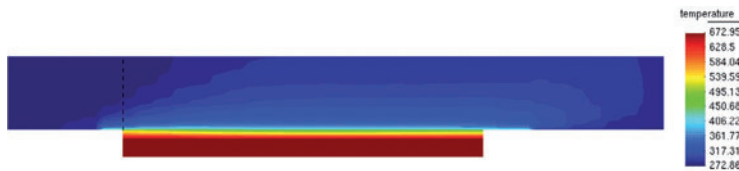


Abbildung 2:

(a) 2D-Test des Abkühlvorgangs einer ebenen Platte

(b) Temperaturverteilung mit ausgeprägter Grenzschicht im Fluid

## Beteiligte Partner

Dieses Projekt ist Bestandteil des Sonderforschungsbereichs SFB-TRR30 „Prozessintegrierte Herstellung funktional gradierter Strukturen auf der Grundlage thermo-mechanisch gekoppelter Phänomene“ und ist dort insbesondere als Tandemprojekt im Bereich der Fluid-Struktur-Kopplung bei Abkühlprozessen mit der Arbeitsgruppe von Herrn Professor Dr. Andreas Meister, Fachbereich Mathematik der Universität Kassel, eingerichtet. Wir bedanken uns des Weiteren bei Herrn Prof. Dr. Martin Arnold (Martin-Luther-Universität Halle), der bei den Betrachtungen von geometrienerhaltenden Algorithmen unser Ansprechpartner war, sowie bei Dr. Jurjen Tebbens (Akademie der Wissenschaften, Prag) für die intensive Zusammenarbeit bei der iterativen Lösung linearer Gleichungssysteme. Das Projekt wäre ohne die Förderung durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) nicht möglich gewesen, der hierfür gedankt sei.

## Literatur

- [1] P. Ellsiepen, P. and S. Hartmann: Remarks on the interpretation of current non-linear finite-element analyses as differential-algebraic equations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 51:679–707, 2001.
- [2] N. B. G. Rabbat, A. L. Sangiovanni-Vincentelli, H. Y. Hsieh: A multilevel Newton algorithm with macromodeling and latency for the analysis of large-scale nonlinear circuits in the time domain. *IEEE Transactions on Circuits and Systems*, 26:733–740, 1979.
- [3] S. Hartmann: A remark on the application of the Newton-Raphson method in non-linear finite element analysis, *Computational Mechanics*, 36: 100-116, 2005.
- [4] S. Hartmann, S., W. Bier: High-order time integration applied to metal powder plasticity. *International Journal of Plasticity*, 24(1):17–54, 2008.
- [5] S. Hartmann, K. Quint, M. Arnold: On plastic incompressibility within time-adaptive finite elements combined with projection techniques. In press *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2008.
- [6] S. Hartmann, K. J. Quint, A.-W. Hamkar: Displacement control in time-adaptive nonlinear finite-element analysis. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 88(5):342–364, 2008.



## 5 Visualisierung, Datenanalyse und Software Engineering

Dieses Kapitel beschreibt aktuelle Arbeiten im Bereich der Informatik an der TU Clausthal für die Modellierung, Simulation und Visualisierung komplexer Systeme und Prozesse. Dabei verfolgen wir zwei Ziele:

(1) die Entwicklung und Nutzung von Anwendungen, Methoden und Werkzeugen, und

(2) die Anwendung dieser Methoden und Werkzeuge zur Analyse und Lösung von Problemen innerhalb der Informatik und angrenzender Gebiete.

Abschnitt 5.1, MASSim (Multi-Agent Systems Simulation) Plattform, untersucht das Verfahren der agentenbasierten Simulation. Im Unterschied zu anderen Simulationsverfahren sind die Informationsmodelle, Ziele und Verhalten lokal autonomer Akteure feingranular beschrieben: Damit wird die explizite Darstellung von Mikro- und Makroaspekten der Simulation unterstützt. Die Softwareplattform MASSim ist ein Werkzeug, mit dessen Hilfe agentenbasierte Simulationen auf der Basis logischer Modelle erstellt und ausgeführt werden können.

Die beiden nächsten Abschnitte zeigen aktuelle Forschungsergebnisse auf dem Gebiet der Analyse und Visualisierung von Modellen. Abschnitt 5.2, Visualisierung großer nicht-euklidischer Datensätze, stellt Methoden der nicht-euklidischen Visualisierung großer Datenmengen vor, die nicht durch übliche vektorielle Verfahren behandelt werden können, sondern durch eine Distanzmatrix dargestellt werden. Dies tritt etwa bei Sequenzdaten der Biomedizin auf, die durch paarweises Alignment verglichen werden, bei Multimediadaten, die durch allgemeine informationstheoretische Maße verglichen werden können, oder bei Sensordaten in technischen Bereichen, die etwa durch eine zeitliche Abhängigkeit in den Daten spezialisierte Metriken verlangen. In Abschnitt 5.3, Interaktive Visualisierung zeitabhängiger Oberflächen, wird die Visualisierung zeitabhängiger geometrischer Modelle untersucht. Dies wird beispielsweise bei Flüssigkeiten benötigt, deren Geometrie und Topologie in Abhängigkeit des Zeitparameters variieren. Der Schwerpunkt liegt hier in Verfahren der interaktiven Simulation sowie in der Entwicklung effizienter Methoden zur Reduzierung des Speicherbedarfs der dynamischen Geometriedatensätze.

Die grundlegende Idee besteht darin, Zeitpunkte zu finden, an denen die zeitabhängige Oberfläche die prägnantesten und extremsten Formen annimmt und den Rest der Sequenz daraus zu interpolieren. Damit lässt sich das Datenvolumen bei zu vernachlässigendem Fehler in der Regel auf wenige Prozent der ursprünglichen Datenmenge reduzieren.

Abschnitt 5.4, Combining Aspect-Oriented and Model-Driven Development for Supply Network Monitoring, beschreibt Arbeiten auf dem Gebiet der Modellierung betrieblicher Informationssysteme. Ziel der Arbeiten ist die explizite Modellierung von Überwachungslogiken in Modellen von Geschäftsprozessen der Logistik. Damit können diese Prozesse einerseits simuliert und analysiert werden, andererseits können aus diesen (Fach-)Modellen durch Modelltransformationen halbautomatisch ausführbare Modelle generiert werden. Diese werden dann effizient auf eine ubiquitäre Softwareinfrastruktur zur Verfolgung und Überwachung verteilter Logistikprozesse installiert (und bei Änderungen der Fachmodelle aktualisiert).

Die beiden letzten Abschnitte dieses Kapitels befassen sich mit Mechanismen zur Erkennung von Kollisionen in physikalischen Modellen, z. B. für physikalische Simulationen, Robotik oder medizintechnische Anwendungen. Abschnitt 5.5, Inner Sphere Trees for Proximity and Penetration Queries, beschreibt einen neuen Algorithmus zur exakteren und zuverlässigeren Detektion von Zusammenstößen zwischen rigiden Objekten auf der Basis einer geometrischen Datenstruktur, der sogenannten Inner Sphere Trees (IST). Um die Eigenschaften und die Leistungsfähigkeit unterschiedlicher Verfahren der Kollisionserkennung zu analysieren, beschreibt Abschnitt 5.6, A Benchmark Suite for Static Collision Detection Algorithms, eine neuartige generische Benchmarkumgebung für statische Verfahren zur Kollisionserkennung. Diese in Zusammenarbeit mit der Volkswagen AG entwickelte Umgebung erlaubt es, Experimente in nachvollziehbarer Weise zu beschreiben, Ergebnisse zu rekonstruieren und mit anderen Ergebnissen zu vergleichen.

*Tristan Behrens, Jürgen Dix, Michael Köster, Peter Novák;  
Institut für Informatik*

## **5.1 MASSim (Multi-Agent Systems Simulation) Plattform**

Multiagentensysteme sind mittlerweile als mächtige Werkzeuge zur Simulation von komplexen, dynamischen Systemen anerkannt. In den letzten Jahren wurden immer mehr Multiagentensysteme zur Simulation und zum besseren Verständnis von sozialen Institutionen, physikalischen, ökonomischen und biologischen Systemen eingesetzt.

Die MASSim Plattform lässt sich zur Visualisierung, der Datenanalyse und zur Evaluierung des Multiagentensystems benutzen.

Sie ist eine stabile Testumgebung für dezentrale Architekturen und für Konzepte bzgl. der Simulation. Das bedeutet, dass neben der Evaluierung der Koordinations- und Kooperationsansätze von Multi-Agenten-Systemen gerade auch die Funktion als Simulator für komplexe Szenarien bereitgestellt wird.

Eine Besonderheit ist, dass sie autark bezüglich der gewählten Agenten-Implementationstechnik ist. Zusätzlich ist durch die Modularität der Infrastruktur wenig Aufwand nötig, um das Simulationsszenario auszutauschen. Für die spätere Analyse werden sowohl eine Echtzeitüberwachung und Echtzeitbetrachtung des Simulationsverlaufs als auch zusätzlich animierte Videosequenzen bereitgestellt.

Lag der Fokus verteilter Simulationen bislang auf der Performance-verbessernden Parallelisierung und der Verteilung von Berechnungen, so wird es für die Zukunft vermehrt notwendig sein, das Verhalten von komplexen „Systems of Systems“ zu analysieren und zu simulieren. Unter „Systems of Systems“ versteht man dabei Systeme, die wiederum aus komplexen und heterogenen Systemen bestehen, in loser Kopplung miteinander interagieren und ein emergentes Verhalten haben.

Die traditionellen Methoden und Vorgehensmodelle der Simulation stoßen bei den Anforderungen dieser komplexen Systeme an ihre Grenzen, da sie die Dezentralität weder in der Ausführung, noch in der Modellerstellung nicht oder nur in Ansätzen unterstützen.



## Darstellung des Projekts

Die MASSim Plattform basiert auf der Idee einer diskreten runden- und zeitbasierten Spielesimulation, ähnlich zu dem bekannten Spiel Civilization. Durch die Plug-in-Architektur ist es jedoch möglich, davon stark abweichende Spieleszenarien zu erstellen. Solch ein Szenario, als Simulationsplug-in eingebunden, erlaubt die Realisierung einer Umgebung für eine MAS-Simulation.

Abbildung 1 zeigt die technische Infrastruktur. Die MASSim Plattform besteht aus sieben Komponenten, die über mehrere Computer verteilt sein können.

Der eigentliche Kern ist in Java geschrieben und dient als zentrale Komponente für die Interaktions- und Kooperationsmöglichkeiten der einzelnen Elemente untereinander. Außerdem implementiert er den Ablaufplan des Turniers.

Das Simulationsplug-in, implementiert in einer Java-Klasse, beschreibt ein diskretes, schrittbasierendes Spiel. Außerdem beinhaltet es die Logik sowie die Funktionalität der MAS-Umgebung. Bei der Kommunikation werden zwei Arten unterschieden.

Die Agenten-Server- und die Agenten-Agenten-Kommunikation. Während erstere über die dritte Komponente mittels TCP/IP und XML erfolgt, ist die zweite nicht über die Plattform realisiert und dem Agentenentwickler freigestellt. Eine Kommunikation der Agenten über den Server ist jedoch einfach zu implementieren.

Die MASSim Plattform besteht zusätzlich aus den Agententeams. Diese laufen nicht auf dem Server, sondern auf der Infrastruktur der Teilnehmer. Damit wird weder die Implementierungstechnik noch die Agentenkommunikationsmethode oder der Kooperationsmechanismus eingeschränkt.

Die fünfte Komponente ermöglicht die Darstellung des Spielgeschehens nach Simulationsablauf. Dazu existiert eine Java-Bibliothek, die beliebig skalierbare Animationen mit Hilfe von SVGs, also skalierbare Vektorgraphiken, und JavaScript erstellt. Sie sind plattformunabhängig in jedem Browser mit SVG-Unterstützung betrachtbar.

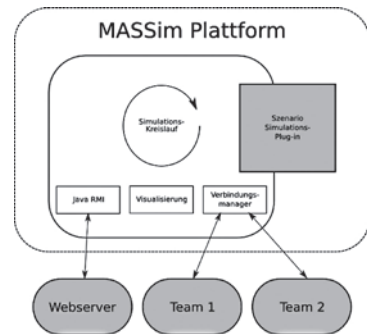


Abbildung 1: Übersicht über die MASSim Plattform

Um den Simulationsverlauf, also die Zwischenergebnisse schon während der Ausführung betrachten zu können, existiert zusätzlich ein Web-Interface. Es ist über Apache/Tomcat und den Java Server Pages realisiert und läuft unabhängig von der Kernkomponente. Mit dieser kommuniziert es über Java RMI. Des Weiteren bietet diese Komponente über einen Chat einen einfachen Kommunikationskanal für alle Teilnehmer an.

Schließlich existiert ein Debug-Monitor, der durch Java RMI mit der Serverkomponente verbunden ist, und Status- sowie Debuginformationen liefert.

### Stand der Forschung

Die MASSim Plattform ist in der Praxis erfolgreich benutzt worden. So wurde sie dieses Jahr zum dritten Mal beim Agent Contest [1] eingesetzt. In den Jahren 2006 bis 2007 ist das sogenannte Goldgräber-Szenario (Abbildung 2) verwendet worden. In einer gitterförmigen Umgebung suchen die Agenten in Kooperation mit ihren Teammitgliedern in einem Wald nach Gold, das sie dann auf der Karte an bestimmten Stellen, im Depot, in Punkte umwandeln können. Neben statischen Hindernissen, wie Bäumen, können die Agenten des gegnerischen Teams die Arbeit der Goldgräber behindern, indem sie sich in den Weg stellen oder den Zutritt zum Depot blockieren. Dasjenige Team gewinnt, das die meisten Goldklumpen gefunden hat. Bei diesem Szenario ist besonders auf die Informationen, die der einzelne Agent bekommt, zu achten. Sie ist nämlich nur lokal, was bedeutet, der Agent sieht nur einen kleinen Ausschnitt der Karte und muss sich mit Hilfe seiner Teamkameraden ein Bild von der Umwelt machen. Dieser Ansatz fördert also die Kooperationsfähigkeit der Agenten. Neben dieser entscheidenden Sichteinschränkung ist eine weitere wichtige Eigenschaft hervorzuheben: Aktionen des Agenten können fehlschlagen. Dadurch wird die Entwicklung von robusten und stabilen Agenten gefördert und ein fehlertolerantes Verhalten belohnt.

Für 2008 ist das Szenario (Abbildung 3) verändert und wesentlich erweitert worden. Die gitterförmige Welt ist geblieben, auch die Bäume sind noch vorhanden. Statt Goldklumpen existieren jetzt aber Kühe, die von Cowboys, den Agenten, in Korrale getrieben werden. Waren vorher also die einzusammelnden Ob-

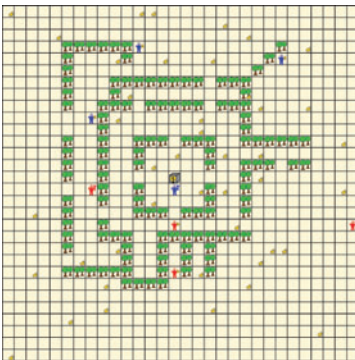


Abbildung 2: Spielfeld Goldgräberszenario 2006 und 2007

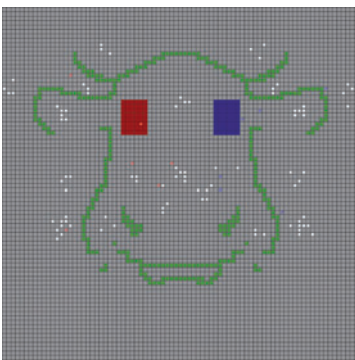


Abbildung 3: Spielfeld Cowboy-Szenario 2008

jekte statisch, so sind sie jetzt beweglich. Die Kühe haben dabei ein unabhängiges Verhalten, sie folgen einem Herdentrieb, zerstreuen sich und meiden die Cowboys. Diese scheinbar kleine Änderung hat das Verhalten der Agenten grundlegend verändert. War es vorher noch möglich, dass Agenten ohne Kooperation wenigstens teilweise Erfolg haben konnten, so erzwingt die neue Beschreibung eine sorgfältig geplante Koordination und Kooperation. Auch bei diesem Szenario hat der einzelne Agent nur lokale Informationen zur Verfügung und muss mit fehlgeschlagenen Aktionen umgehen können.

## **Forschungsaufgaben**

Durch die stetig steigende Anzahl der Teilnehmer und der damit verbundenen deutlich längeren Simulationsdauer ist es nötig geworden, diese Simulationsserver mehrfach, also parallelisiert, auszuführen. Dieses soll in Zukunft automatisch geschehen und nicht mehr manuell erfolgen. Dafür wird ein sogenannter Tournament Manager entwickelt, der eine einfache Möglichkeit bieten wird, diese mehreren Instanzen zu verwalten.

Daneben liegt der Fokus auf der Erweiterung der Ausfallsicherheit bezüglich Software- und Hardwarefehler. Dafür ist ein Proxy in der Entwicklung, mit dem es möglich ist, die Verbindungen zu den Simulationsservern zu halten, auch wenn ein Simulationsserver einen Defekt hat. Zusätzlich muss der Simulationsserver angepasst und um eine Backupfunktion erweitert werden.

Zudem soll die Visualisierung von SVG-Dateien auf Flash umgestellt werden, weil sich in den letzten zwei Jahren Flash als das Mittel zur Darstellung komplexer Inhalte auf Webseiten durchgesetzt hat. Durch diese Umstellung ist dann auch ein Livestream der Simulationen möglich.

Schließlich ist angedacht, nicht nur die Agenten verteilt auszuführen, sondern auch die Simulation verteilt zu berechnen. Damit können wirtschaftliche Prozesse wie das Supply Chain Management auf elegante Weise simuliert werden.

## **Fazit und Ausblick**

Der Agent Contest ist mittlerweile in seiner vierten Ausführung und die Teilnehmerzahl steigt stetig an. Das zeigt, dass die MASSim Plattform eine wichtige Rolle für die Entwicklung von Multiagentensystemen spielt. Für die Zukunft soll deshalb zum einen der Kooperationsaspekt weiter gefördert werden, zum anderen soll die Plattform auch stärker für anders geartete Simulationen benutzt werden.

Daneben wird gerade die Kontaktaufnahme zwecks Kooperation mit einem anderen Contest, dem ORTS-Contest [5], diskutiert.

## **Beteiligte Partner**

Während die Entwicklung der Plattform von der TU Clausthal vorangetrieben wird, wird der Agent Contest zusammen mit der Utrecht University und Dr. Dastani organisiert.

## **Literatur**

- [1] T. Behrens, M. Dastani, J. Dix, and P. Novák: Agent Contest Competition - 3rd edition, 2008.
- [2] M. Dastani, J. Dix, and P. Novák: The First Contest on Multi-Agent Systems based on Computational Logic. Proceedings of 6th Workshop on Computational Logic in Multi-Agent Systems (CLIMA VI), LNCS, 3900.
- [3] M. Dastani, J. Dix, and P. Novák: The Second Contest on Multi-Agent Systems based on Computational Logic. Proceedings of 7th Workshop on Computational Logic in Multi-Agent Systems (CLIMA VI), LNCS, 4371, 2006.
- [4] M. Dastani, J. Dix, and P. Novák: Agent Contest Competition - 3rd edition. Proceedings of 5th International Workshop on Programming Multi-Agent Systems, ProMAS'07, LNCS, 4908, 2007.
- [5] ORTS – A Free Software RTS Game Engine, <http://www.cs.ualberta.ca/~mburo/orts/>.

## 5.2 Visualisierung großer nichteuklidischer Datensätze

Angehts dramatisch wachsender Datenmengen wird die intuitive Visualisierung bei der Datenanalyse, Inspektion und Simulation zunehmend wichtig. Dementsprechend wurden in der Literatur unterschiedliche Visualisierungstools entwickelt, die aufbauend auf verschiedensten Paradigmen Daten in den auf dem Bildschirm darstellbaren zweidimensionalen Raum abbilden, zu nennen sind etwa Locally linear embedding, Isomap, Isotop, Self-organizing maps, Laplacian eigenmaps, Multidimensional scaling, Manifold charting, .... Trotz der Fülle von Tools bestehen an zwei Stellen Schwierigkeiten:

*Barbara Hammer;  
Institut für Informatik*

- Teilweise sind die Daten so groß, dass sie weder in den Hauptspeicher passen, noch mehr als ein Lauf über die Daten vom Aufwand her vertretbar ist. In diesem Fall müssen sogenannte Streaming Algorithmen entwickelt werden, die in maximal einem Lauf über die Daten mit begrenztem Speicher hinreichende Ergebnisse liefern. Ideal sollten die Algorithmen maximal lineare Laufzeit bezogen auf die Menge der Daten aufweisen.
- Die Daten sind häufig nichteuklidisch, sodass sie nicht durch übliche vektorielle Verfahren behandelt werden können, sondern durch eine Distanzmatrix dargestellt werden. Das tritt etwa bei Sequenzdaten der Biomedizin auf, die durch paarweises Alignment verglichen werden, bei Multimedialdaten, die durch allgemeine informationstheoretische Maße verglichen werden können, oder bei Sensordaten in technischen Bereichen, die etwa durch eine zeitliche Abhängigkeit in den Daten spezialisierte Metriken verlangen. Hier können übliche lineare Verfahren nicht angewandt werden, und bereits das pure Einlesen der gesamten Distanzmatrix bedeutet einen bei großen Datenmengen nicht realisierbaren quadratischen Aufwand für die Verfahren.

Im Rahmen des Projekts wurde versucht, intuitive prototypenbasierte Visualisierungsverfahren auf diese neuen Anforderungen, d. h. sehr grosse nichteuklidische Datenmengen zu erweitern.

## Stand der Forschung

Basis für die Untersuchungen bildet die von Kohonen vorgeschlagene Self-organizing map (SOM) und die von Ritter eingeführte Erweiterung, die hyperbolische SOM (HSOM). Beide Verfahren adaptieren in einem Online-Prozess a priori fixierte zweidimensionale regelmäßige euklidische bzw. hyperbolische Gitter gemäß gegebener Daten, sodass durch eine Abbildung der Datenpunkte auf die entsprechenden Stellen des zweidimensionalen Gitters eine Datenausdünnung und Visualisierung erreicht werden kann. Die Verfahren selbst sind heuristisch motiviert, und eine präzise mathematische Untersuchung erweist sich als schwierig. Einer der elegantesten Ansätze ist, die Dynamik minimal zu ändern, sodass die Adaptationsregeln auf der Basis einer Kostenfunktion als stochastischer Gradientenabstieg gedeutet werden können. Die Basisverfahren sind allerdings auf euklidische Daten beschränkt und verlangen in einem Online-Modus mehrere Läufe über die Daten. Sie sind daher ungeeignet für nichteuklidische Daten einerseits und den Fall von Streaming Daten andererseits. Es gibt einige Erweiterungen der SOM für generelle Daten, zu nennen sind etwa die von Graepel und Obermeyer vorgestellten Ansätze. Allerdings wird durch eine komplexe statistische Modellierung zusammen mit aufwendiger Optimierung der Aufwand so groß, dass realistische Datensätze mit Mühe, große überhaupt nicht verarbeitet werden können. Auch im euklidischen Fall gibt es kaum Algorithmen, die die SOM auf Streaming Daten erweitern. Anleihen können am verwandten (sehr viel einfacheren und weniger leistungsfähigen) k-means Verfahren genommen werden, das mit Hilfe sogenannter Patch Verarbeitung den Algorithmus Streaming-fähig macht.

## Forschungsaufgaben

Im Rahmen des Projekts wurden mehrere wesentliche Schritte vollzogen, die in der Gesamtheit zu einem sehr leistungsfähigen Visualisierungsverfahren für nichteuklidische Daten führten. Basis für die Entwicklungen ist dabei die Optimierung der der SOM zugrunde liegenden Kostenfunktion im sogenannten Batch Modus. Dieser optimiert wechselseitig Prototypen der SOM und Datenzuordnungen, bis Konvergenz eintritt und ein gutes (wenn auch nicht immer globales) Optimum der Kosten-

funktion gefunden ist, das einer Datenrepräsentation und Visualisierung dient. Ein die Anforderungen erfüllendes Verfahren wurde in drei Schritten realisiert:

### **1. Erweiterung für nichteuklidische Daten:**

Ein erster Schritt besteht in einer mathematisch präzisen Erweiterung der SOM und HSOM für allgemeine Distanzmatrizen. Dazu wird zunächst angenommen, dass die Distanzen durch einen Kern erzeugt wurden, d. h. es existiert eine unbekannte Einbettung der Daten in einen eventuell sehr hochdimensionalen euklidischen Raum. Unter dieser Voraussetzung kann man zeigen, dass sich Prototypen in diesem Raum als konvexe Kombinationen von Datenpunkten darstellen lassen und Distanzen von Prototypen zu Datenpunkten allein aufgrund der Kenntnis paarweiser Distanzen von Datenpunkten bestimmt werden können, ohne auf die unbekannte Einbettung zu referenzieren. Das bedeutet, dass sich das Standardverfahren im Batch Modus so formulieren lässt, dass nur auf die bekannte Distanzmatrix, nicht auf die unbekannte Einbettung zurückgegriffen werden muss. Dieses eröffnet die Anwendbarkeit des Verfahrens für allgemeine Situationen, sobald paarweise Distanzen der Datenpunkte gegeben sind oder berechnet werden können, die sogenannte relationale SOM bzw. HSOM. Es ergeben sich sinnvolle Visualisierungen, wie in Abbildung 1 für die relationale HSOM demonstriert wird. In dieser Anwendung wurden MIDI-Daten auf Basis einer allgemeinen informationstheoretischen Metrik, der sogenannten normalisierten Kompressionsdistanz, verglichen und im hyperbolischen Raum dargestellt. Man sieht deutlich, dass sich ähnliche Musikstücke von ähnlichen Komponisten adäquat im Raum anordnen.

### **2. Patch clustering:**

In einem zweiten Schritt wurden Standardverfahren (für euklidische Daten) auf das Szenario der Streaming Daten angepasst, die einen begrenzten Speicherplatz und maximal einen Lauf über die Daten erlauben. Basierend auf dem Batch-Verfahren wurde festgestellt, dass sich eine Statistik bereits geclusterter Punkte kanonisch durch die Prototypen zusammen mit der Größe ihrer rezeptiven Felder ergibt. Sofern die Zuordnungen der Datenpunkte zu diesem Zeitpunkt schon korrekt wären, erlaubte allein diese Information eine Inferenz der optimalen Prototypen für erweiterte Datenmengen. Ausgehend von dieser

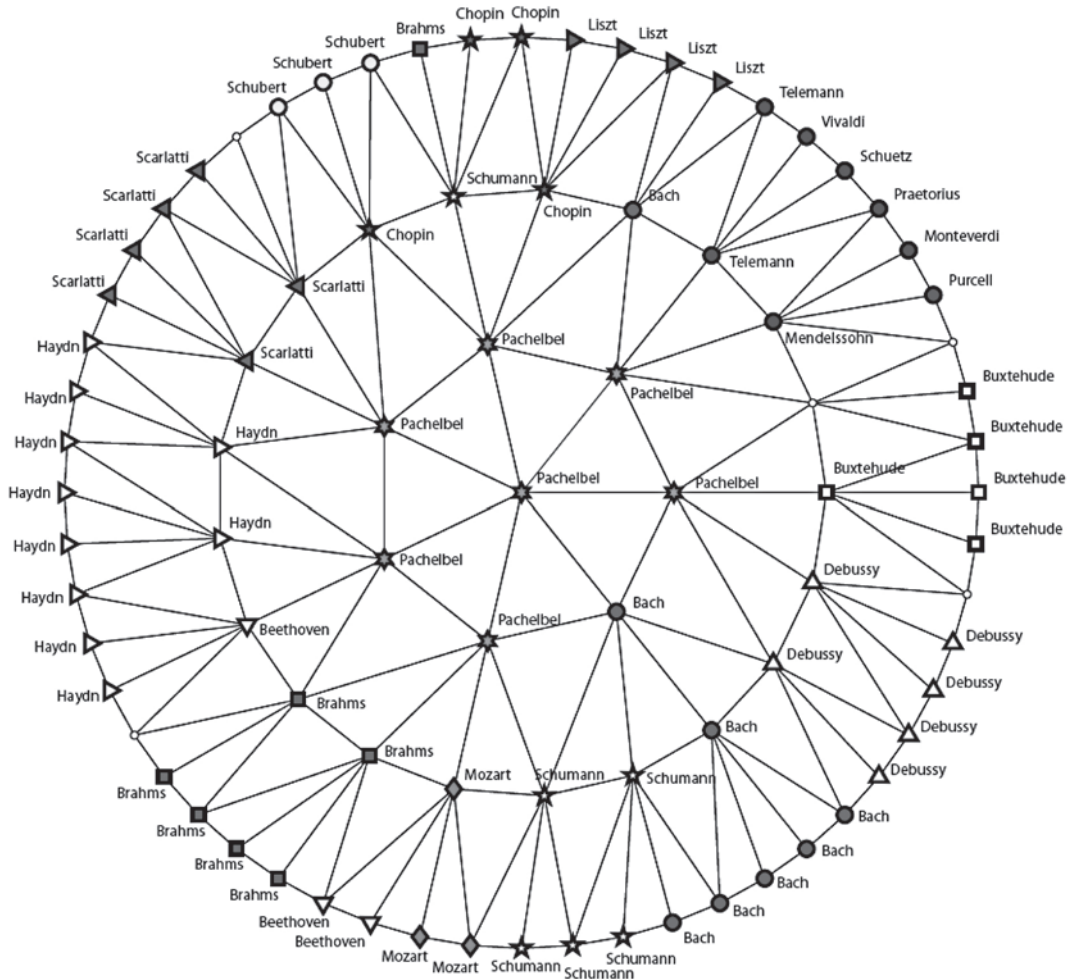


Abbildung 1: Visualisierung von im Midi-Format gegebenen Musikstücken mit Hilfe der relationalen HSOM. Die Daten werden paarweise durch eine allgemeine, im Limes informationsoptimale Metrik verglichen. Die Zuordnung zu den Komponisten zeigt deutlich, dass die Daten im hyperbolischen Gitter sinnvoll angeordnet werden und so einen verlässlichen visuellen Eindruck der Daten liefern. Der Fokus der HSOM ist dabei auf den Komponisten Pachelbel gerichtet, sodass hier der „Fischaugeneffekt“ der Poincaré-Einbettung des hyperbolischen Raums in die Ebene hervortritt.



11 Clouds	t avg (ms)	var · 10 <sup>-3</sup>	accuracy avg (%)	var	speed-up
batch	201565.48	82.7	99.80	0.18	
1 thread	135308.96	82.7	99.80	0.18	1
2 threads	67703.35	116.1	99.79	0.18	1.9986
3 threads	45161.47	119.3	99.78	0.24	2.9961
4 threads	33907.87	122.1	99.76	0.26	3.9905
5 threads	27366.69	122.5	99.65	0.35	4.9442
6 threads	22631.55	123.6	99.54	0.41	5.9787

Abbildung 2: Typische Ergebnisse der Parallelisierung von Patch Clustering für einen Mehrprozessor PC. Während die Güte nahezu gleich bleibt, ist ein annähernd linearer Speedup beim Einsatz mehrerer Prozessoren zu beobachten, d. h. der durch die Parallelisierung eingeführte Overhead und nicht parallelisierbare Operationen stellen nur einen minimalen Anteil dar.

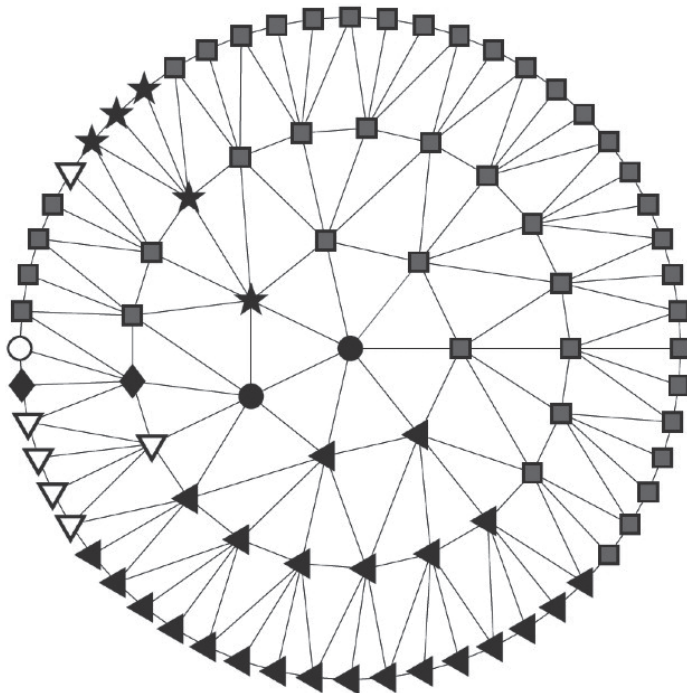
Beobachtung wurde die Batch-Verarbeitung abgewandelt, so dass Daten sukzessive in Patches beschränkter Größe eingelesen und, angereichert mit der Statistik des jeweils vorangegangenen Laufs, geclustert werden. Obwohl dieses ein approximatives Verfahren darstellt, ist der zu beobachtende Qualitätsverlust minimal, wie in Abbildung 2 an einem multimodalen Benchmark-Datensatz demonstriert wird. Zudem erlaubt die sehr natürliche Form des Algorithmus eine direkte Parallelisierung mit fast linearem Speedup, wie ebenfalls aus Abbildung 2 erkennbar ist.

### 3. Patch relational SOM:

Ein dritter Schritt zielte auf die Kombination dieser beiden Techniken, d. h. der Patch Verarbeitung von nichteuklidischen Daten im Rahmen einer relational SOM. Als Nebeneffekt wurde erhofft, dass eine volle Distanzmatrix (mit quadratischer Größe) überhaupt nicht betrachtet werden muss, sondern eine Restriktion auf die einzelne Patches betreffenden Informationen ausreicht. Eine direkte Übertragung allerdings erwies sich als nicht effizient möglich, da durch die implizite Berechnung von Prototypen und Abständen im Endeffekt die gesamte gegebene Information betrachtet werden müsste, was zu quadratischem Aufwand und Speicherplatz führte. Im Projekt wurde daher eine nur approximative Darstellung von Prototypen vorgeschlagen,

die den Speicherplatz auf eine a priori feste Größe beschränkt und eine kanonische Anwendung von Patch Clustering auch im Fall einer Ähnlichkeitsmatrix erlaubt. Da dieses Verfahren eine Approximation darstellt, muss ein in der Praxis allerdings meist sehr geringer Qualitätsverlust in Kauf genommen werden. Das entstehende Verfahren ist Streaming-fähig und reduziert die quadratische Laufzeit auf einen linearen Bedarf, da nur noch repräsentative Bereiche der gesamten Ähnlichkeitsmatrix betrachtet werden müssen. Patch relational SOM und HSOM wurden im Zusammenhang mit der Verarbeitung großer Textdatenbanken getestet. Abbildung 3 zeigt ein Ergebnis für einen Benchmark Datensatz bestehend aus fast 200.000 Newsgroup Artikeln. Die Artikel wurden auf übliche Art vorverarbeitet und mit Hilfe der normalisierten Kompressionsmetrik verglichen. Der Aufwand eines Clusterings, das auf die volle Matrix zurück-

*Abbildung 3: Visualisierung von 183.546 Newsgroup-Artikeln zu unterschiedlichen Themen in einer relationalen hyperbolischen SOM, die mit Hilfe von Patch Clustering trainiert wurde. Die unterschiedlichen Symbole an den Knoten entsprechen den Themen der betrachteten Artikel. Die volle Distanzmatrix würde 251 GB beanspruchen, die Verarbeitung in Patches zu je etwa 1000 Dokumenten reduziert diesen Aufwand erheblich zu etwa 300 MB, sodass ein standard PC ausreicht.*



greift, ist mindestens von der Größenordnung  $200.000^2$ , was einem Speicherplatz von über 200 GB und einer extrapolierten Laufzeit von über einem halben Jahr entsprechen würde. Die

Anwendung von Patch Clustering mit einer Patch Größe 1000 reduziert den Speicherplatz auf wenige 100 MB, sodass der Datensatz auf einem Standard PC in weniger als einem Tag verarbeitet werden konnte. Eine Inspektion der den News-Artikeln zugeordneten Themenfelder zeigt, dass die räumliche Anordnung der Daten durch diesen Ansatz sinnvoll ist.

## **Fazit und Ausblick**

Es wurde ein Verfahren entwickelt, dass die Visualisierung sehr grosser Datensätze, die nur durch paarweise Ähnlichkeiten charakterisiert sind, ermöglicht und somit die Anwendbarkeit intuitiver Visualisierungstools für sehr relevante Bereiche erweitert. Das Verfahren basiert dabei auf einer mathematisch präzisen Kostenfunktion und geeigneten Approximationen, die die extreme Datengröße handhabbar machen. Derzeit wird das Verfahren im Rahmen der Analyse biomedizinischer Daten eingesetzt.

## **Beteiligte Partner**

- Prof. Barbara Hammer, A. Hasenfuss, Institut für Informatik, TU Clausthal, Deutschland
- Dr. Fabrice Rossi, AxIS Project, INRIA Rocquencourt, Frankreich
- Prof. Frank Klawonn, Fachbereich Informatik, FH Braunschweig/Wolfenbüttel, Deutschland
- PD Dr. Thomas Villmann, Dr. Frank-Michael Schleich, Computational Intelligence Group, Medizinische Fakultät, Universität Leipzig, Deutschland

## **Literatur**

- [1] A. Hasenfuss, W. Börger, B. Hammer, Topographic processing of very large data sets, accepted for ANNIE 2008.
- [2] N. Alex and B. Hammer. Parallelizing single pass patch clustering. In M. Verleysen, editor, European Symposium on Artificial Neural Networks, pages 227-232. d-side publications, 2008.
- [3] A. Hasenfuss and B. Hammer. Single pass clustering and classification of large dissimilarity datasets. In Bhanu Prasad, Pawan Sinha, Ashwin Ram, and Etienne E. Kerre, editors, Artificial Intelligence and Pattern Recognition, pages 219-223. ISRST, 2008.

- [4] Alexander Hasenfuss, Barbara Hammer and Fabrice Rossi. Patch relational neural gas – clustering of huge dissimilarity datasets. In Lionel Prevost, Simone Marinai, and Friedhelm Schwenker, editors, *Artificial Neural Networks in Pattern Recognition, Third IAPR Workshop, ANNPR 2008*, Paris, France, July 2-4, 2008, Proceedings, volume 5064 of *LectureNotes in Computer Science*, pages 1-12. Springer, 2008.
- [5] Fabrice Rossi, Alexander Hasenfuss, and Barbara Hammer. Accelerating relational clustering algorithms with sparse prototype representation. In *Proceedings of 6th International Workshop on Self-Organizing Maps (WSOM 2007)*, Bielefeld, Germany, September 3-6, 2007, 2007.
- [6] Barbara Hammer, Alexander Hasenfuss, Fabrice Rossi, and Marc Strickert. Topographic processing of relational data. In *Proceedings of 6th International Workshop on Self-Organizing Maps (WSOM 2007)*, Bielefeld, Germany, September 3-6, 2007, 2007.
- [7] Nikolai Alex, Barbara Hammer, and Frank Klawonn. Single pass clustering for large data sets. In *Proceedings of 6th International Workshop on Self-Organizing Maps (WSOM 2007)*, Bielefeld, Germany, September 3-6, 2007, 2007.
- [8] A. Hasenfuss and B. Hammer. Relational topographic maps. In Michael R. Berthold, John Shawe-Taylor, and Nada Lavrac, editors, *Advances in Intelligent Data Analysis VII, Proceedings of the 7th International Symposium on Intelligent Data Analysis, IDA 2007*, Ljubljana, Slovenia, September 6-8, 2007, volume 4723 of *Lecture Notes in Computer Science*, pages 93-105, Berlin, 2007. Springer.
- [9] B. Hammer and A. Hasenfuss. Relational neural gas. In J. Hertzberg, M. Beetz, and R. Englert, editors, *KI 2007: Advances in Artificial Intelligence, 30th Annual German Conference on AI, KI 2007*, volume 4667 of *Lecture Notes in Artificial Intelligence*, pages 190-204, Berlin, 2007. Springer.
- [10] A. Hasenfuss, B. Hammer, F.-M. Schleif, and T. Villmann. Neural gas clustering for dissimilarity data with continuous prototypes. In F. Sandoval, A. Prieto, J. Cabestany, and M. Grana, editors, *Computational and Ambient Intelligence { Proceedings of the 9th Workconference on Artificial Neural Networks (IWANN), San Sebastian (Spain), LNCS 4507*, pages 539-546, Berlin, 2007. Springer.

## 5.3 Interaktive Visualisierung zeitabhängiger Oberflächen

Um die Ausbreitung und Bewegung von Flüssigkeiten numerisch zu simulieren, werden in der Regel die zugehörigen Differentialgleichungen diskretisiert und schrittweise auf einem dreidimensionalen Gitter gelöst. Am Ende der Simulation liegt die gesamte Simulationssequenz daher als Isofläche eines vierdimensionalen regulären Gitters vor, meist mit einem Datenvolumen von mehreren Gigabytes. Insbesondere interessiert uns dabei die Oberfläche der Flüssigkeit, deren Geometrie und Topologie in Abhängigkeit des Zeitparameters variieren.

Solche zeitabhängigen Oberflächen (Dynamic Geometry) treten nicht nur bei der Simulation, sondern auch bei der Animation virtueller Charaktere, dem sogenannten Mesh Morphing und allgemein immer dann auf, wenn dreidimensionale Objekte sich in Bezug auf die Zeit oder eine andere vierte Parameterdimension verändern.



*Kai Hormann, Federico Ponchio,  
Tim Winkler;  
Institut für Informatik*

*Abbildung 1: Momentaufnahme der interaktiven Visualisierung einer zeitabhängigen Oberfläche, die die simulierte Ausbreitung einer Wassermasse beschreibt.*

In diesem Projekt beschäftigen wir uns primär mit der interaktiven Visualisierung, aber auch mit der Weiterverarbeitung von Dynamic Geometry. Im Beispiel der Simulationssequenz extrahieren wir die Daten dabei zunächst als vierdimensionales Tetraedernetz aus dem regulären Gitter. Die Darstellung der Flüs-

sigkeit zu einem beliebigen Zeitpunkt der Simulation erreichen wir dann dadurch, dass wir einen zur Zeitachse orthogonalen dreidimensionalen Schnitt durch das Tetraedernetz berechnen und das sich daraus ergebende Dreiecksnetz anzeigen. Abbildung 1 zeigt ein Ergebnis dieser Methode.

Um diesen Prozess in interaktiver Geschwindigkeit ausführen zu können, haben wir hierarchische Datenstrukturen entwickelt, mit denen das Tetraedernetz segmentiert und in verschiedenen Auflösungsstufen gespeichert und verwaltet werden kann. Bei der Darstellung wird für verschiedene Teile der Fläche dann jeweils die Auflösungsstufe gewählt, die eine hinreichende Bildqualität garantiert. Zudem haben wir einen effizienten Algorithmus zur Berechnung und Darstellung der dreidimensionalen Schnitte implementiert, der die Programmierbarkeit moderner Grafikkarten ausnutzt [10].

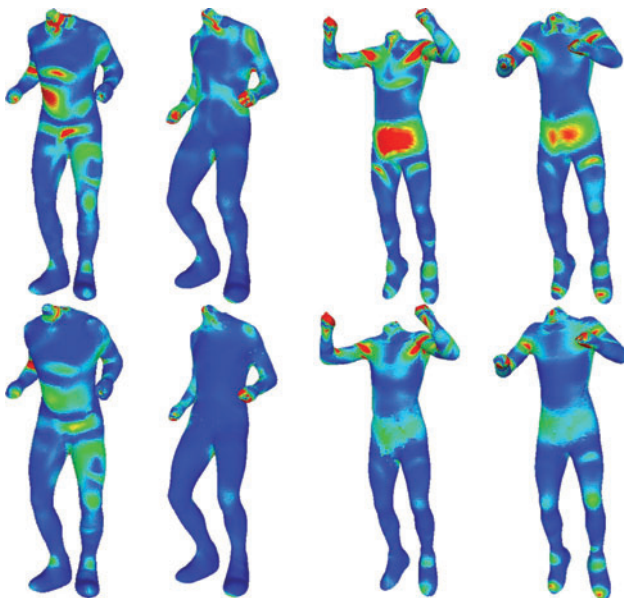


Abbildung 2: Texturverzerrung (blau: gering; grün: moderat; rot: hoch) einiger Flächen einer Animationssequenz vor (oben) und nach der Optimierung (unten).

Weitere Schwerpunkte dieses Projekts betreffen sowohl die Texturierung als auch die Kompression zeitabhängiger Oberflächen. Die Verwendung von Oberflächentexturen ist eine Standardmethode der Computergrafik, um Objekten ein realistisches Aussehen zu verleihen. Mit Hilfe einer sogenannten Texturkarte wird dabei jedem Oberflächenpunkt ein Farbwert in einem zweidimensionalen Bild (der Textur) zugeordnet. Die Schwierigkeit beim Einsatz dieser Technik zum Einfärben von Dynamic Geometry besteht nun darin, die Texturkarten der einzelnen Flächen, aus denen die Sequenz besteht, zu synchronisieren und die Texturverzerrung insgesamt zu reduzieren. Wir haben dazu einen allgemeinen Ansatz entwickelt [13], der nicht nur dieses Problem löst (siehe Abbildung 2), sondern auch in vielen anderen Situationen sinnvoll eingesetzt werden kann.

Wie eingangs erwähnt, haben Dynamic Geometry Datensätze in der Regel einen großen Speicherbedarf. Aufgrund der starken temporalen Kohärenz, die in der Sequenz vorhanden

ist, lässt sich dieser Speicherbedarf mit Hilfe geeigneter Kompressionsmethoden jedoch stark reduzieren. Unser bislang verfolgter Ansatz basiert darauf, einige wenige Zeitpunkte zu finden, an denen die zeitabhängige Oberfläche die prägnantesten und extremsten Formen annimmt und den Rest der Sequenz daraus zu interpolieren. Damit lässt sich das Datenvolumen bei zu vernachlässigendem Fehler in der Regel auf wenige Prozent reduzieren [12].

## **Stand der Forschung**

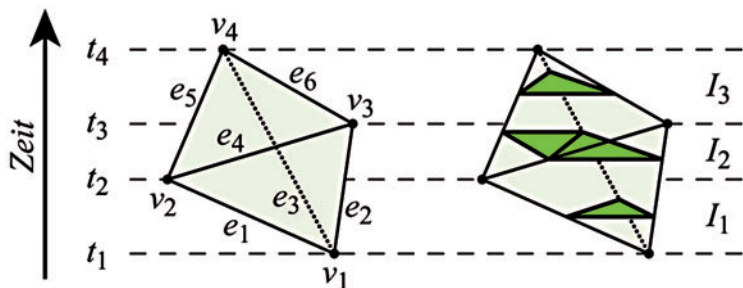
Ein großer Bereich der Computergrafik beschäftigt sich mit der Beschreibung und Bearbeitung von Flächen im Raum. Insbesondere möchte man die aus der Signal- (1D) und Bildverarbeitung (2D) bekannten Algorithmen, z. B. zur Kompression oder Rauschunterdrückung, so erweitern, dass sie auf digital beschriebene Geometrie (3D) angewendet werden können. Diese Vision wird oft unter dem Begriff Geometry Processing zusammengefasst, und in den letzten 15 Jahren hat es erhebliche Fortschritte in diesem Bereich gegeben.

Der nächste logische Schritt ist die Erweiterung und Anwendung dieser Algorithmen und Konzepte auf 4D Daten, insbesondere auf Dynamic Geometry, also 3D Flächen, deren Geometrie und Topologie sich in Abhängigkeit eines vierten Parameters verändern. Die Verarbeitung solcher typischerweise sehr großen Datensätze in Echtzeit wird jedoch erst langsam durch die kontinuierlich steigenden Rechnerkapazitäten möglich. Es fehlt daher bislang noch weitestgehend an geeigneten Datenstrukturen und Algorithmen für ein effizientes Dynamic Geometry Processing.

Bei der Visualisierung solcher Daten sind grundsätzlich zwei verschiedene Arten von Dynamic Geometry zu unterscheiden. Für die Animation virtueller Charaktere und die physikalisch-basierte Animation fester Gegenstände, bei denen sich die Topologie der Fläche nicht über die Zeit verändert, eignen sich explizite Flächendarstellungen. In der Regel sind dies Dreiecksnetze mit einer festen Konnektivitätsstruktur, die zu jedem Zeitpunkt der Sequenz identisch ist. Diese Flächen können problemlos mit den Standardmethoden der Computergrafik dargestellt werden.

Wenn sich jedoch die Topologie eines Objekts verändert, wie z. B. bei der Simulation von Wasser oder anderen Flüssigkeiten, dann ist eine implizite Beschreibung natürlicher und geeigneter als eine explizite Darstellung. Die gesamte Simulationssequenz ist dann eine Isofläche in 4D (drei Raum- und eine Zeitdimension) und das Simulationsergebnis zu einem beliebigen Zeitpunkt der Sequenz der Schnitt dieser Isofläche mit einer zur Zeitachse orthogonalen 3D Hyperebene. Für die Visualisierung gibt es nun zwei Möglichkeiten: zum einen kann man den Schnitt der 4D Isofläche lokal an diesem Zeitpunkt diskretisieren und so für jeden gewünschten Zeitpunkt ein 3D Dreiecksnetz erzeugen und darstellen. Dies ist effizient, so lange das simulierte Objekt nur für einige wenige Zeitpunkte visualisiert werden soll. Für die interaktive Visualisierung, bei der der Zeitparameter beliebig gewählt und verändert wird, empfiehlt es sich jedoch, die 4D Isofläche global zu diskretisieren und als 4D Tetraedernetz zu speichern. Zu jedem gewünschten Zeitpunkt wird dann der Schnitt dieses 4D Tetraedernetzes mit der 3D Hyperebene berechnet und das daraus resultierende Dreiecksnetz dargestellt. Es gibt verschiedene Ansätze, diesen Schnitt für jedes Tetraeder des Netzes effizient auf der GPU, dem Prozessor der Grafikkarte, zu berechnen (siehe z. B. [7] oder [1]). Im Rahmen dieses Projekts haben wir eine neue Idee für diese Aufgabe umgesetzt, die auf der Erkenntnis basiert, dass der Schnitt eines 4D Tetraeders mit einer 3D Hyperfläche aus entweder keinem, einem oder zwei Dreiecken besteht (siehe Abbildung 3). In einem Vorverarbeitungsschritt berechnen wir diese Fälle und konvertieren jedes Tetraeder in vier sogenannte Dynamic Triangles, die dann für die Visualisierung von der GPU in normale 3D Dreiecke umgewandelt werden. Unsere Messungen zeigen, dass diese Methode ungefähr 40 % effizienter ist als bisherige Ansätze.

Abbildung 3: Innerhalb der Zeitintervalle  $I_1=[t_2, t_3]$  und  $I_3=[t_3, t_4]$  besteht der Schnitt eines 4D Tetraeders mit einer zur Zeitachse orthogonalen 3D Hyperebene aus einem Dreieck, im Zeitintervall  $I_2=[t_2, t_3]$  aus zwei Dreiecken, ansonsten ist er leer.





Ein weiteres wichtiges Hilfsmittel für die interaktive Darstellung und Verarbeitung großer geometrischer Datenmengen ist die Verwendung geeigneter hierarchischer Strukturen. Die Grundidee effizienter Multiresolutionsansätze ist, ein großes Dreiecksnetz sukzessive zu vergrößern und in mehreren Auflösungsstufen zu speichern. Bei der Darstellung wird dann in Abhängigkeit von der Distanz des Beobachters diejenige Auflösungsstufe gewählt, die aus möglichst wenigen Dreiecken besteht, aber dennoch hinreichend viele Details besitzt, um aus der aktuellen Distanz korrekt auszusehen.



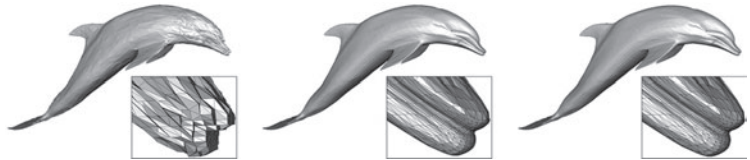
*Abbildung 4: Cluster-basiertes hierarchisches 4D-Modell für die interaktive Visualisierung der in Abbildung 1 gezeigten zeitabhängigen Oberfläche*

Bei den meisten Verfahren ist die hierarchische Struktur solcher Multiresolutionsmodelle auf der Ebene einzelner Dreiecke aufgebaut. In diesem Projekt verfolgen wir dagegen einen neuen Ansatz, bei dem die Hierarchie auf Clustern von Dreiecken basiert (siehe Abbildung 4), was zu einer kompakteren Darstellung des Multiresolutionsmodells führt. Diese Cluster-basierte Methode ist deutlich effizienter als herkömmliche Methoden, erfordert aber völlig neue Datenstrukturen und Algorithmen. Diese wurden zunächst für den Spezialfall von Geländedaten [1], dann für allgemeine Dreiecksnetze [4] und schließlich für Dynamic Geometry Datensätze entwickelt. Im Zusammenspiel mit der oben beschriebenen Methode zur Visualisierung können wir Dynamic Geometry Datensätze, die aus mehr als 1 Milliarde Tetraedern bestehen, mit einer Bildfrequenz von 40 Hz interaktiv darstellen [10].

Neben der effizienten Visualisierung kann dieser Multiresolutionsansatz auch zur Datenkompression benutzt werden. Dazu werden einfach im hierarchischen Modell von den Auflösungsstufen, die das feinste Detail beschreiben, gerade so viele weggelassen, dass eine vorgegebene Fehlertoleranz nicht überschritten wird. Zudem haben wir die Idee von Garland und Heckbert zur Vereinfachung von Dreiecksnetzen [7] auf unsere

4D Tetraedernetze übertragen und können auch dadurch das Datenvolumen unter Berücksichtigung gegebener Fehlertoleranzen erheblich reduzieren.

Im Prinzip kann dieses Verfahren auch für explizit beschriebene zeitabhängige Oberflächen verwendet werden, doch ermöglicht die bei diesen Daten vorhandene zusätzliche Struktur wesentlich effektivere Kompressionsmethoden. Einerseits muss die Konnektivitätsstruktur des Dreiecksnetzes nur einmal gespeichert werden, da sie für alle Flächen der Sequenz identisch ist. Andererseits lässt sich die Geometrie (also die Position der Eckpunkte des Dreiecksnetzes) einer bestimmten Fläche oft durch lineare Interpolation der zeitlich benachbarten Flächen beschreiben. Ein üblicher Ansatz ist daher, aus der gesamten Sequenz einige wenige Flächen so auszuwählen, dass sich alle anderen so gut wie möglich aus diesen Key Frames rekonstruieren lassen. Die meisten Arbeiten benutzen dazu das statistische Verfahren der Hauptkomponentenanalyse (PCA), welches einen minimalen Rekonstruktionsfehler bzgl. der  $\ell_2$ -Norm garantiert [8].



*Abbildung 5: Die Rekonstruktionen des Originalmodells (mitte) nach Quantisierung (links) und mit unserem Ansatz (rechts) haben denselben  $\ell_2$ -Fehler, unterscheiden sich aber deutlich in der visuellen Qualität.*

Diese Norm ist aber nicht unbedingt geeignet, um die visuelle Qualität der rekonstruierten Sequenz zu erfassen, wie wir im Rahmen dieses Projekts zeigen konnten (siehe Abbildung 5). Anstelle von PCA benutzen wir Batch Neural Gas, ein Cluster-Verfahren aus dem Bereich der neuronalen Netze [6], um die signifikantesten Key Frames zu finden. In der Regel werden weniger als 5 % der gegebenen Netze einer Animationssequenz als Key Frames benötigt, um den gesamten Datensatz mit zu vernachlässigendem Fehler rekonstruieren zu können [12]. Die Key Frames können dabei mit einer beliebigen Methode gespeichert und komprimiert werden, und der zusätzliche Spei-

cherbedarf für die Spezifikation der Linearkombinationen zur Rekonstruktion der einzelnen Flächen ist extrem gering.

Dieses Kompressionsverfahren setzt allerdings eine gewisse temporale Kohärenz der Daten voraus. Betrachtet man die Position eines beliebigen Eckpunkts des zeitabhängigen Dreiecksnetzes als Funktion über der Zeit, dann sollte diese Trajektorie glatt sein und keine Sprünge aufweisen. Für Animationssequenzen ist dies in der Regel garantiert, doch es gibt Situationen, in denen man nicht unbedingt davon ausgehen kann. Dieses Problem tritt unter anderem auf, wenn ein reales 3D Objekt über einen bestimmten Zeitraum mit einer Tiefenkamera aufgenommen und rekonstruiert wird [1], aber auch beim Mesh Morphing, also dem zeitabhängigen Überführen einer Ausgangsfläche in eine Zielfläche. Im Rahmen dieses Projekts haben wir eine Methode entwickelt, die diese Artefakte reduziert [13]. Mit Ausnahme des Dreiecksnetzes, welches den Beginn der Sequenz darstellt, wird dabei jedes weitere Dreiecksnetz durch ein optimiertes Netz ersetzt, das folgendermaßen berechnet wird. Wir minimieren einerseits die Verzerrung der Form eines jeden Dreiecks im Vergleich zu dem korrespondierenden Dreieck im Anfangsnetz und andererseits den geometrischen Abstand zwischen optimiertem und zu optimierendem Dreiecksnetz. Dabei lassen sich beide Terme als quadratische Funktionale formulieren, und das optimale Netz wird effizient durch Lösen eines dünn besetzten linearen Gleichungssystems gefunden.

Die so optimierten Sequenzen lassen sich nicht nur besser komprimieren, sondern können auch besser mit einer gemeinsamen Textur versehen werden (siehe Abbildung 2). Darüber hinaus lässt sich unser Optimierungsansatz auch in anderen Situationen anwenden, u. a. zur Verbesserung des sogenannten Remeshing. Dabei wird ein gegebenes Dreiecksnetz  $M_0$  durch ein neues Dreiecksnetz  $M_1$ , das Remesh, mit besseren Eigenschaften (z. B. mit weniger, gleichförmigeren oder krüm-

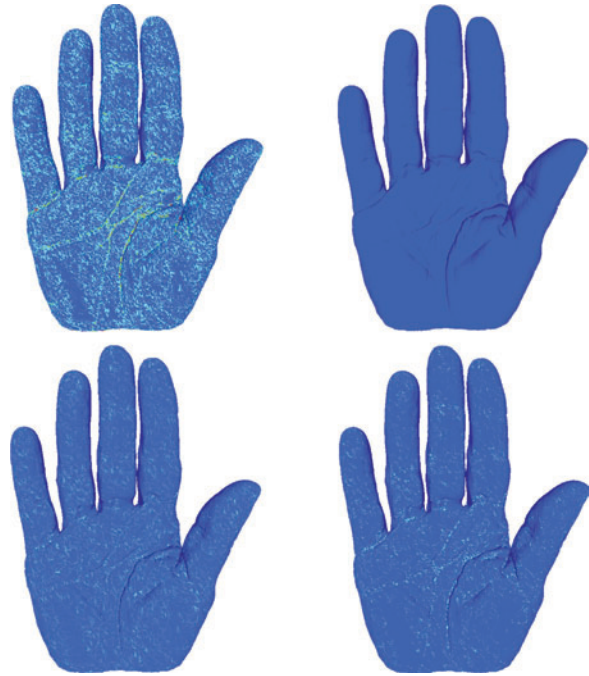


Abbildung 6: Einseitiger geometrischer Abstand (blau: gering; grün: moderat; rot: hoch) zwischen gegebenem Dreiecksnetz (links) und einem Remesh (rechts) vor (oben) und nach (unten) unserer Optimierung.

mungsadaptierten Dreiecken) ersetzt. Die Standardmethoden setzen dabei die Positionen der Eckpunkte des neuen Netzes auf die Dreiecke des gegebenen Netzes, was zwar zu einem relativ kleinen Abstand von  $M_1$  zu  $M_0$ , aber einem relativ großen Abstand von  $M_0$  zu  $M_1$  führt. Mit unserer Methode [13] lassen sich der große Abstand auf Kosten des kleinen und damit insgesamt der maximale Abstand um ca. 50 % reduzieren, ohne die guten Eigenschaften des neuen Netzes (Form und Anzahl der Dreiecke) zu beeinträchtigen (siehe Abbildung 6).

### **Forschungsaufgaben**

Schwerpunkt der zukünftigen Forschungsaufgaben ist die Weiter- und Neuentwicklung von Methoden zur Visualisierung und Verarbeitung von Dynamic Geometry. Im Bereich der zeitabhängigen Dreiecksnetze, bei denen sich nur die Geometrie, nicht aber die Konnektivitätsstruktur ändert, gibt es zum einen noch Verbesserungsbedarf bei der Interpolation zwischen zwei oder mehreren Netzen der Sequenz. Eine einfache Interpolation der 3D Koordinaten der Eckpunkte führt in vielen Fällen zu schlechten Resultaten und verzerrten Formen. Bessere Ergebnisse erzielt man jedoch, wenn man stattdessen die Orientierung der Normalen der Dreiecke interpoliert, doch schlägt auch diese Idee fehl, wenn sich entsprechende Teile der zu interpolierenden Netze um mehr als eine  $180^\circ$ -Drehung unterscheiden. Wir haben einige viel versprechende Ideen zur Lösung dieses Problems, die in naher Zukunft ausgearbeitet werden sollen. Zum anderen wäre es wünschenswert, die Interpolation auf der GPU durchführen zu können, um die Visualisierung solcher Animationssequenzen zu beschleunigen. Dazu wollen wir entsprechende Algorithmen entwickeln und implementieren.

Ein bislang nicht untersuchter Typ von Dynamic Geometry sind Sequenzen explizit beschriebener Dreiecksnetze, bei denen sich nicht nur die Geometrie, sondern auch die Konnektivität der Netze in Bezug auf den Zeitparameter verändern. Die einzige Möglichkeit, solche Daten zu verarbeiten, besteht momentan darin, jedes einzelne Dreiecksnetz der Sequenz so zu remeshen, dass am Ende eine einheitliche Konnektivitätsstruktur vorliegt. Dieser Remeshingschritt ist jedoch nicht trivial, erfordert in der Regel die Interaktion des Benutzers und kann nicht eingesetzt werden, sobald auch die Topologie der Netze variiert. Uns er-

scheint es dagegen sinnvoller, die Sequenz wie bei den implizit beschriebenen zeitabhängigen Flächen in ein allgemeines 4D Tetraedernetz umzuwandeln, und wir wollen dazu geeignete Algorithmen entwickeln. Darüber hinaus besteht noch ein großer Bedarf an Werkzeugen zur Verarbeitung solcher 4D Netze und der Übertragung und Adaption der Standardmethoden des 3D Geometry Processing. Insbesondere interessieren wir uns dabei für die Parametrisierung und die Texturierung von 4D Daten, wozu es bislang noch keine Untersuchungen gibt und es nicht einmal klar ist, wie in diesem Fall ein geeignetes Parametergebiet aussehen soll. Ein möglicher Ansatz besteht in der Erweiterung von Polycube-Maps [11] von 3D auf 4D, doch wir werden auch Atlas-basierte Methoden in Betracht ziehen.

## **Fazit und Ausblick**

Die in diesem Projekt erzielten Ergebnisse (siehe Abschnitt 2) haben die Forschung im Bereich des Dynamic Geometry Processing signifikant vorangebracht, was nicht zuletzt durch die in hervorragenden Fachzeitschriften und auf internationalen Konferenzen erschienenen Publikationen belegt wird. Insbesondere die Ergebnisse im Bereich der interaktiven Visualisierung sind dabei von großem Interesse für das Simulationswissenschaftliche Zentrum (SWZ) und neben den in Abschnitt 3 geschilderten Forschungsaufgaben wird für die kommenden zwei Jahre angestrebt, diese Methode in anderen Projekten des SWZ einzusetzen und gemeinsam weiter zu entwickeln.

## **Beteiligte Partner**

- Prof. Dr. Kai Hormann  
Institut für Informatik, TU Clausthal
- Mag. Math. Federico Ponchio  
Institut für Informatik, TU Clausthal und  
Visual Computing Lab, ISTI, CNR, Pisa, Italien
- Dipl.-Inf. Tim Winkler  
Institut für Informatik, TU Clausthal
- Dr. Paolo Cignoni  
Visual Computing Lab, ISTI, CNR, Pisa, Italien
- Prof. Craig Gotsman  
Center for Graphics and Geometric Computing, Technion,  
Haifa, Israel

## Literatur

- [1] N. Anuar, I. Guskov: Extracting Animated Meshes with Adaptive Motion Estimation, in: Proceedings of Vision, Modeling, and Visualization, Seiten 63–71, 2004.
- [2] L. Buatois, G. Caumon, B. Lévy: GPU Accelerated Isosurface Extraction on Tetrahedral Grids, in: Advances in Visual Computing, Band 4291 von Lecture Notes in Computer Science, Seiten 383–392, Springer, 2006.
- [3] P. Cignoni, F. Ganovelli, E. Gobbetti, F. Marton, F. Ponchio, R. Scopigno: BDAM: Batched Dynamic Adaptive Meshes for High Performance Terrain Visualization, Computer Graphics Forum, 22(3):504–514, 2003.
- [4] P. Cignoni, F. Ganovelli, E. Gobbetti, F. Marton, F. Ponchio, R. Scopigno: Adaptive TetraPuzzles: Efficient Out-of-Core Construction and Visualization of Gigantic Multiresolution Polygonal Models, ACM Transactions Graphics, 23(3):796–803, 2004.
- [5] P. Cignoni, F. Ganovelli, E. Gobbetti, F. Marton, F. Ponchio, R. Scopigno: Batched Multi Triangulation, in: Proceedings of IEEE Visualization, Seiten 207–214, 2005.
- [6] M. Cottrell, B. Hammer, A. Hasenfuß, T. Villmann: Batch and Median Neural Gas, Neural Networks, 19(6–7):762–771, 2006.
- [7] M. Garland, P. S. Heckbert: Surface Simplification using Quadric Error Metrics, in: Proceedings of SIGGRAPH '97, Seiten 209–216, 1997.
- [8] Z. Karni, C. Gotsman: Compression of Soft-Body Animation Sequences, Computers & Graphics, 28(1):25–34, 2004.
- [9] P. Kipfer, R. Westermann: GPU Construction and Transparent Rendering of Iso-Surfaces, in: Proceedings of Vision, Modeling, and Visualization, Seiten 241–248, 2005.
- [10] F. Ponchio, K. Hormann: Interactive Rendering of Dynamic Geometry, IEEE Transactions on Visualization and Computer Graphics, 14(4):914–925, 2008.
- [11] M. Tarini, K. Hormann, P. Cignoni, C. Montani: PolyCube-Maps, ACM Transactions on Graphics, 23(3):853–860, 2004.
- [12] T. Winkler, J. Drieseberg, A. Hasenfuß, B. Hammer, K. Hormann: Thinning Mesh Animations, In: Proceedings of Vision, Modeling, and Visualization, 2008.

- [13] T. Winkler, K. Hormann, C. Gotsman: Mesh Massage: A Versatile Mesh Optimization Framework, *The Visual Computer*, 24(7–9):775–785, 2008.

## 5.4 Combining Aspect-Oriented and Model-Driven Development for Supply Network Monitoring

The dissemination of sensor network infrastructures [15] as well as the application of positioning and automatic identification technologies enable a comprehensive monitoring of business processes in supply networks. To be able to implement supply network monitoring (SNM) applications it is required to integrate numerous sensors (event publisher) into a software system. To detect business-relevant events and thus filter the flood of events it is necessary to specify appropriate event aggregation processes. However, a method which supports the modeling of monitoring requirements related to business processes in a computation-independent manner is still missing. Thus, it is still not possible to generate IT applications for SNM in a largely automated fashion based on higher-level models.

*Alexander Hornung, Jörg P. Müller;  
Institut für Informatik*

We present a model-driven software development process for SNM applications. We describe in detail the reusable and maintainable encapsulation of aspect models for event aggregation in SNM. The integration of monitoring aspects into a process model is illustrated by a case study.

### Background and State-of-the-Art

#### Supply network monitoring

SNM refers to the monitoring of the state of physical objects transformed by business processes [14]. Furthermore SNM is a subset of supply network event management (SNEM). SNEM is about detecting and correcting disruptive events and malfunctions in material transforming business processes [16]. The task of detecting disruptive events based on measurements obtained during process execution is solved by SNM. Examples of disruptive events in supply networks are out-of-stock situations, machine breakdowns, a breakdown of an air conditioning system or the delay of transportation functions or manu-

facturing functions. Additionally an SNM application is able to detect regular events like the arrival of products at a products receipt. The goals of SNM are the visibility of work in process and stock amounts using localization information of products, more reliable material flows by monitoring environmental conditions and reduced exception handling costs by quicker detection of disruptive events. The visibility of stock amounts in a supply network removes one of the causes of the well-known bullwhip effect.

### **Aspect-oriented programming**

We apply ideas of aspect-oriented programming (AOP) to the instrumentation of business process models. Programming with aspects enables the encapsulation of cross-cutting concerns [7]. A cross-cutting concern like logging is functionality which cross cuts the main control flow of an application. AOP defines several language constructs. A join point is a well-defined point within program execution. It is selectable by a point cut. A point cut results in a set of selected join points. The point cut is basically a selection expression to determine where the application code has to be instrumented by advices. An advice is the implementation of an aspect using a point cut. An aspect is a reusable module consisting of advices and point cuts implementing a cross-cutting concern. We shall discuss computation independent models of aspects on event aggregation for SNM in Section 4.1. AOP deals with models of aspects and applications at code level. It avoids code duplication and increases maintainability and clarity. AOP also makes design decisions concerning cross-cutting concerns explicit, like every result of a method should be logged first before returning.

### **Model-driven software development**

Model-driven software development (MDSD) takes advantage of formal models in order to support the implementation and documentation of software systems. A model is the description of (parts of) a system [8]. A well-defined language is applied to create models. A metamodel is a model of the language describing the elements of the language. Models contain instances of elements of the metamodel. A metamodel itself conforms to a meta-metamodel which is self describing. The Figure 1 summarizes the main ideas of MDSD.



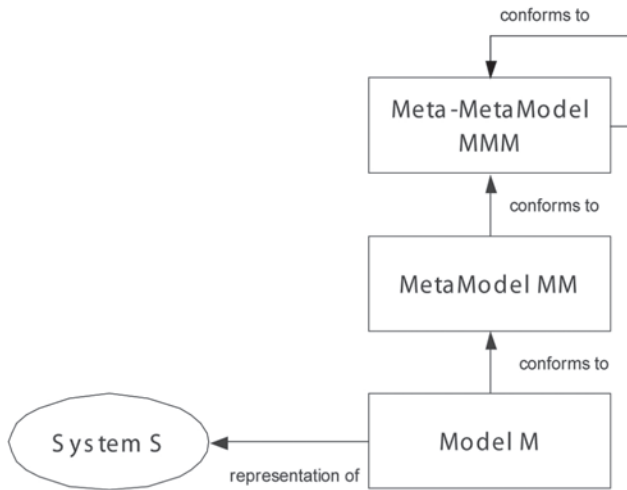


Figure 1: Model-driven software development [2]

The model-driven architecture (MDA) is a framework for MDSD provided by the OMG [8]. The MDA defines three levels of abstraction containing the models which describes a software system. The level of the computation independent model (CIM) describes business-process-related requirements. The platform independent model (PIM) contains a model of a software system implementing the CIM-level requirements. The PIM does not depend on a certain implementation technology. One or more platform specific models (PSM) are generated using a PIM. A PSM describes the software system in a technology-specific manner. The code of the software is generated by a tool which transforms a PSM to code. Applying MDA has several advantages. The productivity of developers will enhance due to technology-independent programming on the PIM level. Portability increases by using a PIM and several transformation definitions to transform to different PSM. Also interoperability between systems will improve using a common PIM for converting between the entities of different systems created using different PSMs.

A model transformation is a function which accepts one or more source models and results in one or more target models [8]. Model transformations are realized by a transformation engine. The transformation engine is controlled by a transformation definition. A transformation definition consists of a set of

transformation rules. A transformation rule defines a mapping between elements of the source model's metamodel elements and the target model's metamodel elements. A model modification is another model operator. It manipulates elements of a given model. Also new model elements (instances) are created by a model modification.

## Development process overview

### Abstraction levels and model types

Table 1 illustrates the MDA-related abstraction levels and the proposed model types.

Abstraction level	Model types
CIM	models of event aggregation for supply network monitoring and a model of the business process to monitor, both modeled as extended event driven process chains
PIM	a model of a supply network monitoring application in conformance to a metamodel for event-based software architectures
PSM	PSM of a supply network monitoring application, e.g. based on a CORBA event service metamodel or java message service metamodel

*Table 1: Model types*

Section 4 discusses the CIM-level for SNM applications. In the following Section 3.2 we sketch the design of a metamodel for the event-based software architecture which will be used as a language for PIMs. Section 3.3 contains the general steps necessary for modeling, implementing and deploying SNM applications. A PSM-level metamodel is a subject of future research and not described in this paper.

### A PIM-level metamodel for supply network monitoring applications

In order to obtain the advantages of the MDA we describe a metamodel for PIMs of SNM applications. The metamodel is presented in Figure 2. The PIM is restricted to the event-based

software architecture. Software architecture defines the structure of a software system in terms of system components and relationships among system components. The event-based software architecture constitutes of system components communicating business-process-relevant events utilizing a message-based communication infrastructure [9].

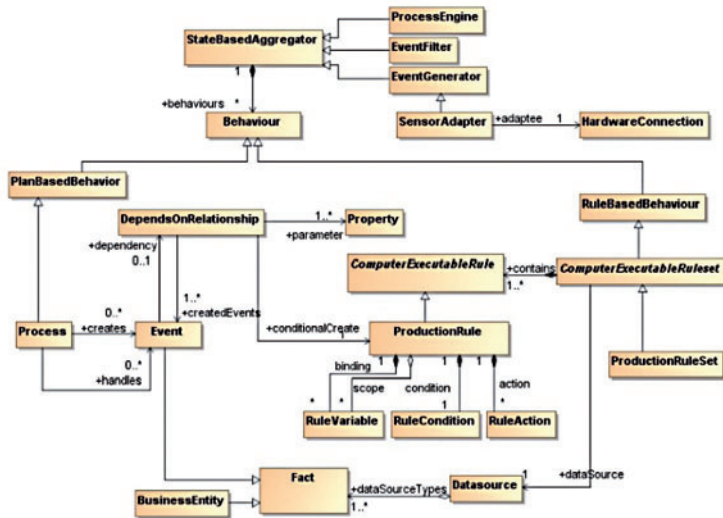


Figure 2: PIM-level metamodel for event-based architecture

During business process execution potentially many events will be generated. An event is a detectable condition that can trigger a notification [5]. A complex event is an event created by aggregation on other events. The aggregation is performed utilizing spatial and time-based conditions. A notification is a signal which is triggered by an event. The recipients of notifications are determined at runtime.

The subscription is the process of linking event publisher with event subscriber. Subscriber and publisher are the two roles of an event-based software system. An event publisher is able to detect and publish events. An event subscriber consumes events according to event filter conditions specified during subscription. Applying direct subscription a subscriber subscribes directly to event publishers. Event publishers are responsible for event generation and optionally for event filtering. In the

case of indirect subscription there is a third component which takes the role of the event filter.

We model SNM applications at PIM-level as event-based software systems with indirect event subscription. The intended software architecture comprises of the component types: event generator, event filter and process engine. The event generator is able to measure attributes of its physical environment. For this purpose it is able control sensor hardware. An event generator executes plans for preprocessing and correcting measurements. Furthermore he is optionally able to filter events. An event generator takes the role of an event publisher only. An event filter is at the same time event publisher and event subscriber. The event filter is a subscriber for events in event generators and publishes events to subscribed process engines. He is able to filter events and create complex events using filter rules. The behavior of an event filter type is modeled by an instance of RuleBasedBehavior. The ComputerExecutableRuleset is a RulebasedBehavior.

The ComputerExecutableRuleset is a metaclass of the production rule representation metamodel [10]. A production rule specifies the conditional execution of one or more actions. A RuleAction instance is for example the detection and creation of a complex event. The production rules work on a set of facts of certain types. This set of facts should be able to represent the state of the environment during business process execution. A process engine is able to enact several information transforming business process instances. The behavior of a process engine can be described by several types of business processes (instances of the Process metaclass). We can use the pim4soa process view (cf. [1]) to further detail the Process metaclass.

A business process (process metaclass) is triggered by events and may generate events of certain types. We can conclude that only the detection of business process related events is relevant in SNM applications. Also graphical client applications which display the execution state of business process instances are only interested in business process related events. This leads to the following consequences in modeling the requirements of event aggregation performed by the aforementioned event filters.

Event aggregations for SNM should be modeled by domain experts and modeling experts because they are in most cases able to describe appropriate event types. Thus a well-known modeling language should be applied for event aggregation specification. Models of business processes instrumented with event aggregation should be readable and maintainable by domain experts and modeling experts. Additionally, models of event aggregation may be reusable for the monitoring of other business processes.

### **Overall development process for supply network monitoring applications**

The process which is necessary to model, implement and deploy a SNM application consists of the following steps:

1. Create a model of the business process to monitor.
2. Combine the business process model with a set of pre-defined reusable models of event aggregations for SNM on CIM level.
3. Create a data model for event aggregation on PIM level containing entity types (instances of the BusinessEntity meta-class) to represent the execution environment of a business process.
4. Transform the instrumented business process model to instances of ProductionRule and Event in order to specify the behavior of an event filter type for the given type of business process.
5. Refine the production rules by adding additional fine-grained events and rules accessing facts on the data model.
6. Model instances of event generators and process engines on PIM level.
7. Transform the PIM to a PSM and finally to source code.
8. Instantiate and initialize the software components necessary for the monitoring of an instance of the business process modeled in step 1.
9. Execute the subscription process to wire all software components.

The remainder of this paper reports on ongoing work realizing the presented development process. In particular the implementation of the steps 1 and 2 are described in Section 4.

## Combining models of monitoring aspects and a business process model

### Business process model and aspect models

A specification of business-process-related events is created by combining a model of the business process under consideration with aspect models containing event aggregations for SNM. The elements of the aspect models contained in the resulting model of that combination are very similar but are treated as definition copies i.e. as different objects. We use the example of the business process given in Figure 3 to illustrate the model modifications necessary to combine aspect models with a business process model. To ensure reusability, maintainability and clarity monitoring aspects are modeled in separation to the business process model.

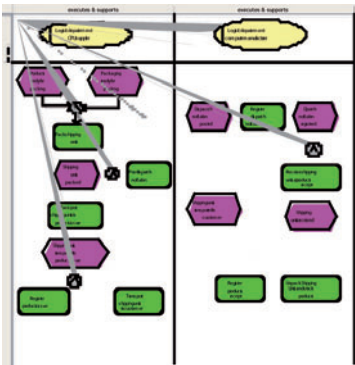


Figure 3: Cross-enterprise business process

The example in Figure 3 describes a cross-enterprise business process between a supplier for central processing units (CPU supplier, left swim lane) and a computer manufacturer (right swim lane). Other business processes like the delivery of food may have a similar structure. Note that this business process contains information flows as well as material flows. For example, if shipping units are packed, they will be transported to the products issue of the CPU supplier. Also the packed shipping units are the precondition for posting a dispatch notification to the computer manufacturer. The dispatch notification contains the delivery date, the estimated lead time of delivery and the identifications on all products contained in the shipment units of one delivery. Information-transforming functions like “Register products issue” have to be implemented by sub processes running on process engines. Neither the aspect models nor the model of the business process contain control flows for handling failure events. Also the reaction on regular events is only modeled by a function. Further modeling of reactions on event types will be contained in behavioral models for process engines and the business processes they enact.

Functions of the presented business process are monitored by other functions contained in aspect models of monitoring concerns. Table 2 shows the assignment relationships between aspect models for SNM and functions of the business process to be monitored. In the following, we present aspect models used by this example.

Function	Aspect-models to assign
Transport shipping units to products issue	Shipping unit localization aspect model
Receive shipping units at products receipt	Shipping unit localization aspect model
Transport shipping units to customer	Temperature control aspect model, delay detection aspect model
Unpack shipping units and stock products	Temperature control aspect model

Table 2: Assignment of aspect models

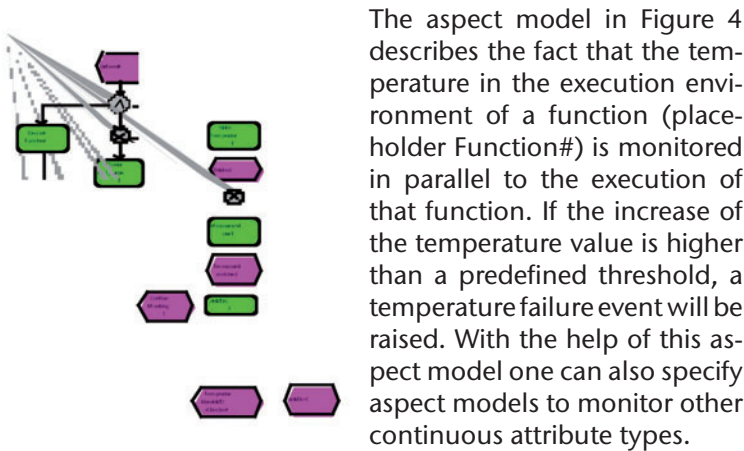


Figure 4: Temperature control aspect model

The delay detection aspect model is presented in Figure 5. In order to detect the delay of a monitored function (placeholder MonitoredFunction#) a timer is set. The time is set according to the start date and the estimated lead time of the monitored function. This information has to be accessible during the execution of the function “Determine start date D and lead time ld of the monitored function”. If the timer expires before the end of the monitored function a delay event is generated. The post condition for functions transporting shipping units is monitored by constructs contained in the shipping unit localization aspect model of Figure 6. The aspect model describes that a function can be treated as finished only if all shipping units of that function can be localized at a certain location (placeholder place#). If the localization fails for a predefined number of localization cycles a localization failure event is created.

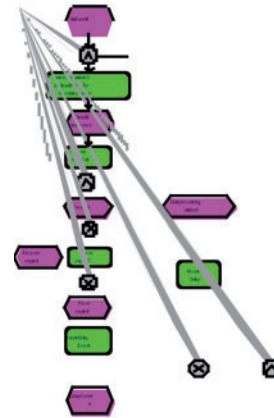


Figure 5: Delay detection aspect model

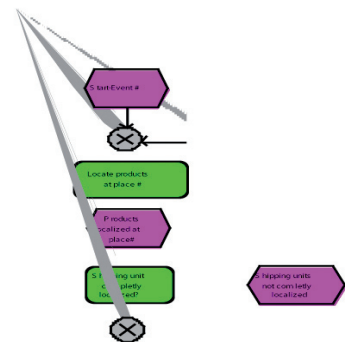


Figure 6: Shipping unit localization aspect model

### **Implementation approaches for model modification**

Having described all aspect models and the business process to monitor we are now ready for describing the combination of the various models which is called weaving in AOP terms. By model modification it is possible to combine aspect models and a business process model. We apply that combination of models on CIM level.

The model modification is performed using openArchitectureWare (OAW) [4]. OAW provides the Xtend language for model modification and model transformation. Xtend is an object constraint language (OCL)-based language. Unlike OCL Xtend supports the creation and manipulation of model elements. In order to create EPC models for model modification by OAW and Xtend the EPC metamodel was implemented using the ecore eclipse modeling framework (ecore EMF) meta-metamodel [13]. In the following we discuss three approaches for combining aspect models and a business process model.

1. Aspect models contained in the model modification source code and generated during model modification;
2. Maintain aspect models and model modification separately;
3. Apply aspect models, a model weaver and post processing operations.

#### **A) Aspect models generated during model modification**

This type of model modification contains the instructions for constructing aspect models in the source code of the model modification. For example to create model elements (instances) contained in a localization aspect model the `localizationProcess` operation has to be invoked during model modification. The `localizationProcess` operation is shown in Figure 7.



```

LocalizationProcess(Process process, String param, Integer
occl d):
    createFunctions(process, param, occl d) ->
    createEvents(process, param, occl d) ->
    createOperators(process, occl d) ->
    createEdges(process, occl d)
;
createFunctions(Process process, String param, Integer occl d):
    process.processEl ems.add(
        createFunction("Locate product at " + param,
            "LocateProduct", occl d) ->
        ...;
createFunction createFunction(String name, String id, Integer
occl d):
    this.setName(name) ->
    this.setIdentifier(id) ->
    this.setOccurrence(occl d);
...

```

Figure 7: Operation localizationProcess

The model modification process which instruments the given business process model with the entire set of aspect models works as follows.

1. Read the business process model from a file and instantiate all model elements.
2. Call the first model modification operation which creates elements of the temperature control aspect model for each function a temperature failure has to be monitored.
3. Call the second model modification operation which creates elements of the delay detection aspect model for each function to monitor a possible delay.
4. Call the third model modification operation which creates elements of the location aspect model for each function to monitor. This operation will replace the function to monitor by the event aggregation for shipping unit localization.
5. Serialize and store the modified business process model.

## B) Separation of aspect models and model-modification

This type of model modification separates model modification code and aspect models. As well as the EPC model of the business process the EPC models of the monitoring aspects are serialized and persistently stored. Figure 8 shows the shipping unit localization aspect model in an EMF-based editor for EPC models.

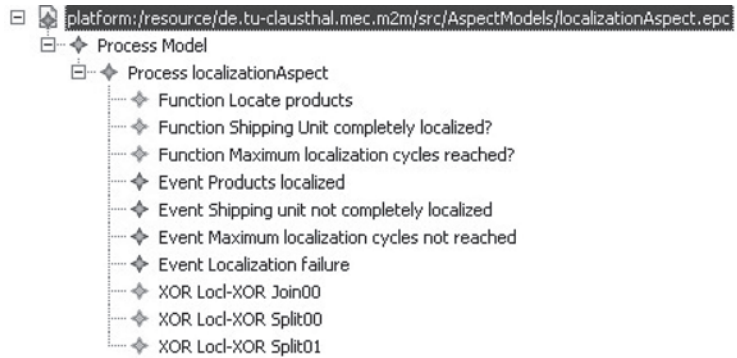


Figure 8: Shipping unit localization aspect model

For each aspect model we invoke the operation `add<AspectName>Aspect` during model modification. Figure 9 depicts the `addLocationAspect` operation. The functions “Transport shipping units to products issue” and “Receive shipping units at products supply” are each instrumented by a shipping unit localization aspect model. Instrumentation is performed by the overloaded operation `weaveElementsLocationMonitoringElements`. The input parameters of that operation are model elements which connects the business process model with an aspect model. These parameters are similar to point cuts in AOP.

```

addLocationAspect ( ProcessModel baseProcessModel , ProcessModel
aspectProcessModel ) :

    baseProcessModel . addAspectModel ( aspectProcessModel , 0 ) ->
    baseProcessModel . addAspectModel ( aspectProcessModel , 1 ) ->
    baseProcessModel . process . weaveElementsLocationMonitoringElements ( ) ;

private Void weaveElementsLocationMonitoringElements ( Process process ) :

process . weaveElementsLocationMonitoringElements (
    process . processElements . select ( e | e . identifier == "AndSplit00" ) . get ( 0 ) ,
    process . processElements . select ( e | e . identifier ==
"TransportShippingUnitsToProductsIssue" ) . get ( 0 ) ,
    process . processElements . select ( e | e . identifier ==
"ShippingUnitsTransportedToProductsIssue" ) . get ( 0 ) ,
    1 )
->
process . weaveElementsLocationMonitoringElements (
    process . processElements . select ( e | e . identifier == "AndJoin01" ) . get ( 0 ) ,
    process . processElements . select ( e | e . identifier ==
"ReceiveShippingUnitAtProductsReceipt" ) . get ( 0 ) ,
    process . processElements . select ( e | e . identifier ==
"ShippingUnitsReceived" ) . get ( 0 ) ,
    0 ) ;

```

Figure 9: Operation `addLocationAspect`

Figure 10 contains an excerpt of the overloaded operation `weaveElmsLocationMonitoringElements`. The operation shows that the edges between aspect model elements and the model elements of the business process model have to be created. For example the reference to the monitored function has to be removed from the successor collection of the startElement parameter. The value of the startElement parameter is the point cut selected in the business process model (which is the original predecessor of the monitored function, e.g. `AndSplit00`). A new reference has to be inserted into that collection to create an edge to the first element in the aspect model (`LoclXorJoin00`).

### C) Aspect models, model weaving and model modification

For this type of model modification we use the Xweave model weaver which is part of OAW. To insert model elements of aspect models into the business process model model-elements from both models must match. Matching works either by defining a point cut expression to select model elements in the base model (the business process model in this case) or by the equality of the names of the model elements.

```
private void weaveElmsLocationMonitoringElements(
    Process process, ProcessElement startElement, ProcessElement
    functionToMonitor, ProcessElement endEvent, Integer occurrenceId):

    startElement.setSuccessor(createList(
        startElement.successor.select(e|e.identifier !=
            functionToMonitor.identifier))
    ->
    startElement.setSuccessor(createList(
        startElement.successor,
        process.processElms.select(e|e.identifier ==
            "Locl-XorJoin00" && e.occurrenceId == occurrenceId).get(0))
    ->
    process.processElms.select(e|e.identifier == "Locl-XorJoin00" &&
    e.occurrenceId == occurrenceId).setPredecessor(
    createList(process.processElms.select(e|e.identifier == "Locl-
    XorJoin00" && e.occurrenceId == occurrenceId).predecessor,
    startElement))
    -> ...
    ;
```

Figure 10: Operation `weaveElmsLocationMonitoringElements`

The temperature control aspect model of Figure 11 states that processElement instances from the temperature control aspect model have to be inserted into the processElems collection of Process instances (Process \*) of the base model.



Figure 11: Aspect model applicable for model weaving

Model elements with the same name in both models (e.g. the function “Transport shipping units to customer”) are merged into one instance containing all the attribute values from its originating instances.

## Discussion and related work

We compare the approaches presented in Sections A, B, C with respect to maintainability and reusability of the aspect models.

The first approach (Section A) negates the opportunities of aspect orientation. By directly encoding the model in the modification code the definition of complex aspect models becomes unclear and poor maintainable in conclusion. Like all other approaches the first approach provides the advantage of an automatically created model of the instrumented business process. This modified model contains a specification of business-relevant event

types. The advantages of the second approach (Section B) are a clear separation between aspect models and model modification code, the possibility to graphically edit aspect models and the opportunity to reuse aspect models in other business process models. Creating or modifying complex EPC models in a simple EMF-based editor is problematic. The third approach for combining a model of a business process and aspect models (Section C) provides the same advantages as the second approach. The disadvantage of applying this approach is that an aspect model is now directly dependent on model elements in a business process model. Additionally the model resulting from model weaving has to be post processed in order to update relationships between model elements of the business process model and the model elements of the added aspect models.

Having investigated three approaches for combining aspect models for SNM and a business process model it points out that the separation of aspect models and the business process model without using a model weaver (the second approach) provides the greatest opportunities for reusability and maintainability of the event aggregation aspect models.

There are also other known approaches combining aspect models and a base model utilizing aspect oriented principles. The authors of [6] describe how to enhance core functionality of a software system by further functionality encapsulated in aspect models. Unlike our approaches [6] shows how to enhance a metamodel for home automation systems using aspects affecting the structure of that metamodel. [3] describes an approach of applying and deriving aspect models in agent-oriented requirements specifications. They use the Tropos formal language in order to create models of requirements on the interaction and on the task structure of plan-based intelligent software agents. The structure of certain aspects is extracted and separated into a new model element. The paper [3] contains algorithms to combine aspect model elements and models of agents. In comparison to this work we focus on modeling of the behavior and the structure of SNM applications. By using the development process of Section 3.3 we have explained how the result of weaving a business process model and several aspect models fits into a model-driven software development approach for SNM applications.

## Conclusion and outlook

The contributions of the paper are threefold. First, we introduced a model-driven development process for SNM applications. Second, a PIM-level metamodel for SNM applications restricted to the event-based software architecture has been presented. Requirements on event aggregations have to be modeled with respect to business processes monitored. The implementation and discussion of three approaches for combining a model of a business process to monitor and several aspect models for SNM is the third contribution of that paper. Specifying aspect models for business-process-related event aggregation in SNM provides advantages in reusability, clarity and model maintenance.

There are several areas of future research. First, algorithms are to be investigated for the transformation from the EPC model of the instrumented business process into production rules specifying the behavior of an event filter type on the PIM-level. To do so it is necessary to recognize certain structures of EPC metamodel elements and transform them into suitable ProductionRule instances of the metamodel proposed in Section 3.2. This transformation will generate coarse-grained event types and aggregation among them. Another area of future research is the transformation from the PIM of a SNM application into a PSM. Evaluation of this transformation should be done by determining an implementation technology (e.g. Java Message Service) and an appropriate PSM-level metamodel. Furthermore we have to demonstrate a complete tool chain for the MDSO process for SNM applications applied to a detailed implementation example.

## References

- [1] Bauer, B., Müller, J., P., Roser, S., A Decentralized Broker Architecture for Collaborative Business Process Modelling and Enactment, Proc. of the 2nd IESA, Bordeaux, France, 2007, pp. 115-126.
- [2] Bézin, J., Barbero, M., On the Applicability Scope of Model Driven Engineering, Proc. of the 4th Int. Workshop on Model-Based Methodologies for Pervasive and Embedded Software, Braga, Portugal, 2007, pp.3 -7.

- [3] Chakravarthy, K., Joshi, R., Capturing Task and Dependency Aspects in Agent Oriented Requirement Specifications, Proc. of the 7th AAMAS, Estoril, Portugal, 2008, pp. 25 - 36.
- [4] Efftinge, S., Open Architecture Ware Framework, available at: <http://www.openarchitectureware.org>, Accessed: 1st June 2008.
- [5] Faison, T, Event-Based Programming, Apress, New York, USA, 2006.
- [6] Groher, I., Voelter, M., XWeave: Models and Aspects in Concert, Proc. of the 10th Int. workshop on Aspect-oriented modeling, Vancouver, Canada, 2007, pp. 35-40.
- [7] Kiczales, G., Irwin, J., Lamping, J., Loingtier, J., M., Lopes, C., Madea, C., Mendhekar, A., Aspect-Oriented Programming, Proceedings of the European Conference on Object-Oriented Programming, Jyväskylä, Finland, 1997, pp. 220–242.
- [8] Kleppe, A, Warmer, J., Bast, W., MDA explained, Addison-Wesley, Boston, USA, 2003.
- [9] Michelson, B., M., Event Driven Architecture Overview, Patricia Seybold Group, 2006.
- [10] OMG, Production Rule Representation Specification, 2007.
- [11] Scheer, A., W., ARIS – Vom Geschäftsprozessmodell zum Anwendungssystem, Springer, Berlin, 2002.
- [12] Seel, C., Vanderhaeghen, D., Meta-model based Extensions of the EPC for Inter-Organisational Process Modelling, Proc. of 4. GI-Workshop, Hamburg, Germany, 2005.
- [13] Steinberg, D., Budinsky, F., Paternostro, M., Merks, E., EMF – eclipse modeling framework, Addison-Wesley, Boston, USA, 2008.
- [14] Strassner, M., Schoch, T., Today's impact of Ubiquitous Computing on Business Processes, Proc. of Pervasive2002, Zürich, Switzerland, 2002, pp. 62-74.
- [15] Weiser, M., The Computer for the 21st Century, Scientific American, Vol. 265, No. 3, USA, 1991, pp. 94-104.
- [16] Zimmermann, R., Winkler, S., Bodendorf, F., Agent-based Supply Chain Event Management – Concept and Assessment, Proc. of the 39th HICSS, Hawaii, USA, 2006, pp. 1-10.

## 5.5 Inner Sphere Trees for Proximity and Penetration Queries

Collision detection between rigid objects plays an important role in many fields of computer science, e.g. in physically-based simulations, robotics, and medical applications. Today, there exist a wide variety of freely available collision detection libraries, and nearly all of them are able to work at interactive rates, even for very complex objects. Most collision detection algorithms dealing with rigid objects use the very efficient data structure of bounding volume hierarchies (BVH). The main idea behind a BVH is to subdivide the primitives of an object hierarchically until there is only one single primitive left at the leaf level. Several kinds of bounding volumes have been proposed in the past, the most popular are axis aligned bounding boxes (AABBs), oriented bounding boxes (OBBs), oriented polytopes (k-Dops) and spheres. BVHs guarantee very fast responses at query time, as long as no further information than the set of intersecting polygons is required for the collision response. However, most applications require much more information in order to compute a proper force.

One way to do this is to compute the exact time of contact for the objects. This method is called continuous collision detection. Algorithms for this kind of collision detection are very time-consuming. Another approach, called penalty methods, is to compute repelling forces based on the penetration depth. However, there does not exist a universally accepted definition of the penetration depth between a pair of polygonal models. Mostly, the minimum translation vector to separate the objects is used, but this may lead to discontinuous forces. Another approach is to avoid penetrations or contacts before they really happen. In this case, the minimum distance between the objects can be used to compute repelling forces. However, it can be difficult for the simulation to guarantee that the objects never penetrate each other.

These problems get worse when the collision detection is not only needed to avoid visual artifacts, but the algorithm is used in a haptic environment. Hardware for haptic interaction requires update rates of at least 200 Hz up to 1 kHz to guarantee a stable force feedback. A remedy could be the use of constant



time collision detection algorithms, for example, voxel-based methods like the Voxmap Pointshell algorithm (VPS). In this approach, the world is divided into a static environment that is approximated by voxels, and dynamic objects that are approximated by point clouds and are allowed to move freely. It is independent of the objects' complexity and fast enough for haptic rendering.

However, it has to be known in advance which objects are fixed and which are moving. Moreover, collision detection is only available with the static environment, not between pairs of moving objects. Furthermore, the method is very memory consuming and produces strong aliasing artifacts due to the voxelization errors.

### **Our approach**

Our new geometric data structure, the Inner Sphere Trees (IST), combines the advantages and avoids most of the disadvantages of both prior approaches.



*Figure 1: Our Inner Sphere Trees are based on sphere packings of arbitrary polygonal objects.*

The main idea is that we do not build a hierarchy based on the polygons on the boundary of an object. Instead, we fill the interior of the model with a set of non-overlapping simple volumes that approximate the object's volume closely (See Figure 1).

In our implementation, we used spheres for the sake of simplicity, but the idea of using bounding volumes for lower bounds instead of upper bounds can be extended easily to all kinds of volumes.

On top of these inner bounding volumes, we build a hierarchy that allows very fast collision detection and proximity queries. Moreover, it enables us to estimate the penetration volume very

efficiently (See Figure 3). The penetration volume corresponds to the water displacement of the overlapping parts of the objects and leads to physically motivated and continuous repelling forces, in contrast to the discontinuous forces of voxel- or penetration depth-based algorithms. It is the most complicated yet accurate method to define the extent of intersection. However, to our knowledge, there are no algorithms to compute it efficiently as yet.

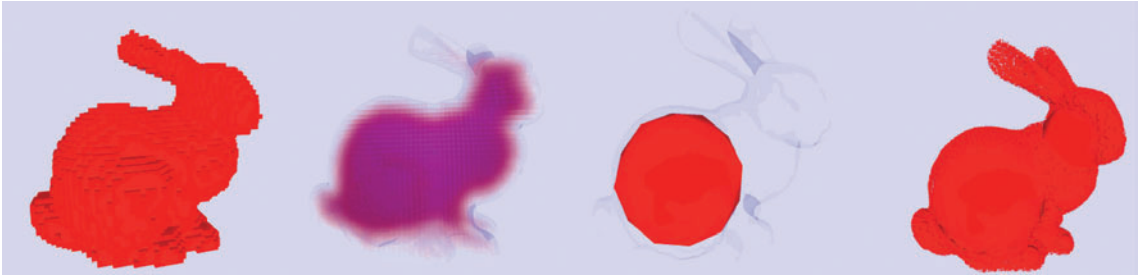
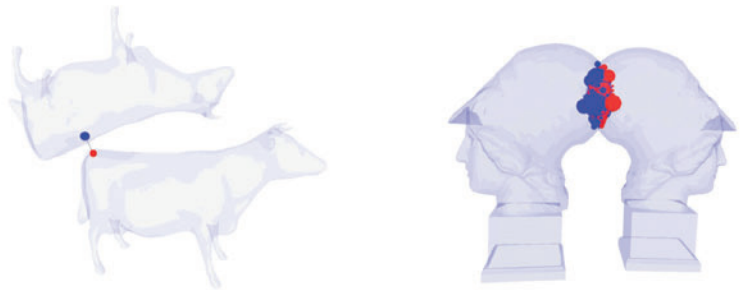


Figure 2: The stages of our sphere filling method. First, we voxelize the object (left). Additionally, we compute distances from the voxels to the closest triangle. The resulting distance field is visualized in the second image (for the sake of visualization, the transparency is modulated by the distance). Then, we pick the voxel with the largest distance and put a sphere at its center, with its radius set to the distance. We proceed incrementally and, eventually, obtain a dense sphere filling (right).

The construction of our data structure consists of two main tasks. The first task is to fill an arbitrary object densely with a set of spheres (See Figure 2). Our data structure supports all kinds of objects, e.g. polygon meshes or NURBS surfaces. The only precondition is that they be watertight. We use an extended version of a flood filling voxelization in combination with a new sphere creation algorithm for this part. The second task is to build a hierarchy upon these inner spheres.

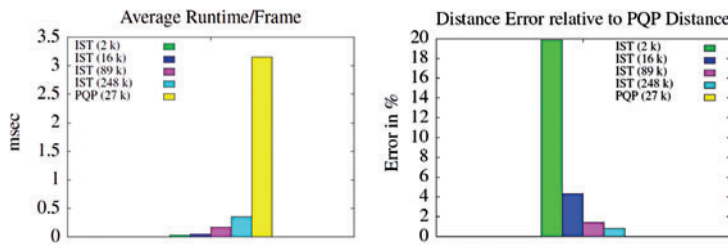
Figure 3: Inner Sphere Trees are suitable for different kinds of geometric queries, namely proximity queries (left) and our new method for computing the penetration depth, the penetration volume (right).



Therefore, we utilize the recently proposed batch neural gas clustering algorithm, which allows us to work in an adaptive manner. Our inner sphere tree not only allows to compute both separation distance and penetration volume, but it also lends itself very well to time-critical variants, which run only for a pre-defined time budget.

## Conclusions and future work

The results of our benchmarks show, that, the inner sphere trees supports proximity queries and penetration volume computations at rates of about 1 kHz (which makes the algorithm suitable for haptic rendering) even for very complex objects with several hundreds of thousands of polygons (See Figure 4). For proximity computations, inner sphere trees achieve runtimes more than 10 times faster than PQP, a state-of-the-art library, with a negligible loss of accuracy of about 0.5 %. The



balance between accuracy and speed can be defined by the user, and this is independent of the object complexity, because the number of leaves of our hierarchy is mostly independent from the number of polygons. Finally, our algorithms for both kinds of queries can be integrated into existing simulation software very easily, because there is only a single entry point, i.e., the application does not need to know in advance whether or not a given pair of objects will be penetrating each other.

Memory consumption of our inner sphere trees is similar to other bounding volume hierarchies, depending on the pre-defined accuracy. This is very modest compared to voxel-based approaches. Another big advantage of our penetration volume algorithm over voxel-based approaches is that it yields a continuous measure for penetration and that it utilizes the same data

Figure 4: Benchmark of the proximity query. Left: average total query time of the IST and PQP (a state of the art distance proximity query library); the number in parentheses gives the sphere resolution and the number of triangles, resp. Even with a very large number of inner spheres, the IST is 10 times faster than PQP, and this factor increases up to 120 when we reduce the number of spheres. Right: the error of approximate proximity based on ISTs is relatively small; for the IST with highest resolution, the distance error is less than 0.5% compared to the accurate distance computed by PQP, and even with the IST containing only 89k inner spheres, the error is  $< 1\%$  while the runtime is two times faster.

structure for both static and dynamic objects. This implies, that there is no time consuming re-sampling and re-voxeling needed when the roles of the objects or the environment change. Last but not least, inner sphere trees are perfectly suited for SIMD acceleration techniques and allow algorithms to make heavy use of temporal and spatial coherence.

Our novel approach opens up several avenues for future work. First of all, the intermediate step of voxelization in order to obtain a sphere packing should be replaced with a better algorithm. This is probably a challenging problem, because several goals should be met: accuracy, query efficiency, and small build times.

Another interesting task is to explore other uses of “inner bounding volume hierarchies”, such as ray tracing or occlusion culling. Note that the type of bounding volume chosen for the “inner hierarchy” probably depends on its use.

An interesting question is the analytical determination of exact error bounds. This could lead to an optimal number of inner spheres with well-defined errors, and it could further improve the heuristics for the time-critical traversal.

It should be straight-forward to derive more contact information, like contact normals, to compute forces. Finally, a challenging task would be to extend our approach also to deformable objects.

### **Research partners**

Gabriel Zachmann, René Weller, Institut für Informatik;  
in collaboration with Volkswagen and ICIDO

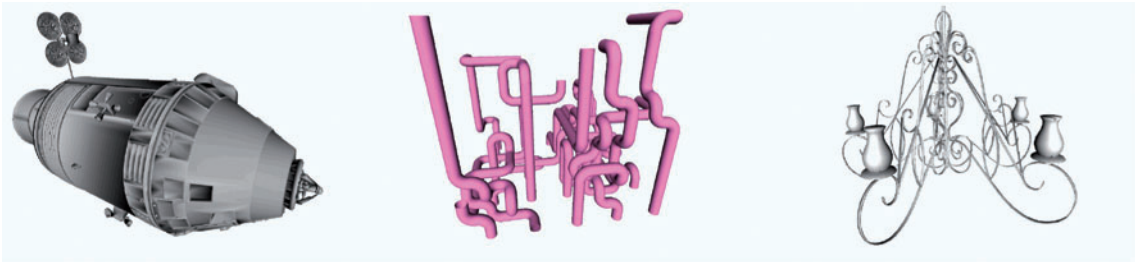
### **References**

- [1] R. Weller, G. Zachmann: Inner Sphere Trees, Technical Report, Ifi-08-09, 2008.

## 5.6 A Benchmarking Suite for Static Collision Detection Algorithms

Fast algorithms for collision detection between polygonal objects are needed in many fields of computer science, e.g. in physically based simulations, computer games, or robotics. In many of these applications, collision detection is the computational bottleneck. In order to gain a maximum speed of applications, it is essential to select the best suited algorithm. There are a number of algorithms for collision detection between rigid objects. Unfortunately, it is extremely difficult to evaluate and compare collision detection algorithms, because in general they are very sensitive to specific scenarios, i.e. to the relative size of the two objects, the relative position to each other, the distance, etc.

*Gabriel Zachmann;  
Institut für Informatik*



The design of a standardized benchmarking suite for collision detection would make fair comparisons between algorithms much easier. Such a benchmark must be designed with care, so that it includes a broad spectrum of different and interesting contact scenarios. However, there are no standard benchmarks available to compare different algorithms. As a result, it is non-trivial to compare two algorithms and their implementations. We propose a simple benchmark procedure which eliminates these effects. It has been kept very simple so that other researchers can easily reproduce the results and compare their algorithms. The user only has to specify a small number of parameters, namely: The objects he wants to test, the number of sample points, and, finally, a set of distances. Our algorithm then generates the required number of test positions and orientations by placing the object in the given distances (See Figure 3).

*Figure 1: Some of our test objects*

Our benchmarking suite is flexible, robust, and it is easy to integrate other collision detection libraries. Moreover, the benchmarking suite is freely available and could be downloaded together with a set of objects in different resolutions that cover a wide range of possible scenarios for collision detection algorithms, and a set of precomputed test points for these objects.

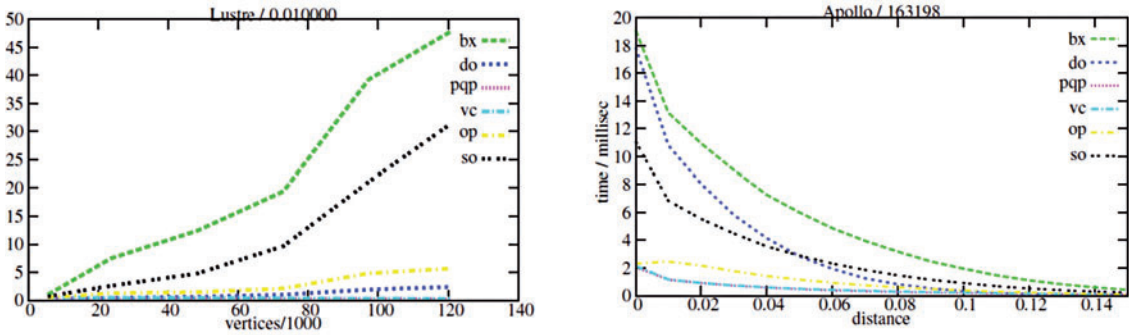


Figure 2: Results generated with our benchmarking suite.

We used our benchmarking suite to test several freely available collision detection libraries with a wide variety of objects (See Figure 1 for some examples). The comparison of several algorithms yields a simple rule for choosing the optimal algorithm (See Figure 2 for some example plots).

In the future, we plan to extend our benchmarking suite also for penetrating objects. Therefore, we will have to determine

Figure 3: Generation of the configurations: The sphere-method uses a fixed rotation for every cycle. The moving object is rotated around the fixed object. After a cycle is finished, the rotation is changed.



the penetration depth of a pair of objects. Another promising future project is the design of a benchmarking suite for more than 2 objects and for continuous collision detection algo-

rithms. Moreover, a standardized benchmarking suite for deformable objects is still missing and could be very helpful for users.

### **Research partners**

Gabriel Zachmann, René Weller, Institut für Informatik;  
in collaboration with Volkswagen

### **References**

- [1] R. Weller, G. Zachmann: Inner Sphere Trees, WSCG, Plzen, Czech Republic, January 29 - February 1, 2007.
- [2] Gabriel Zachmann. Rapid Collision Detection by Dynamically Aligned DOP-Trees. In Proc. of IEEE Virtual Reality Annual International Symposium; VRAIS '98, pages 90–97. Atlanta, Georgia, March 1998.
- [3] G. Zachmann. The BoxTree: Exact and Fast Collision Detection of Arbitrary Polyhedra. In SIVE Workshop, pages 104–112, July 1995.

# Simulationswissenschaftliches Zentrum

## Vorstand

Prof. Dr. Gunther Brenner	Institut für Technische Mechanik
Prof. Dr. Thomas Hanschke (Sprecher)	Institut für Mathematik
Prof. Dr. Michael Kolonko	Institut für Mathematik

## Mitglieder

Prof. Dr. Lutz Angermann	Institut für Mathematik
Prof. Dr. Hans-Peter Beck	Institut für Elektrische Energie- technik
Prof. Dr. Wolfgang Blendinger	Institut für Geologie und Palä- ontologie
Prof. Dr. Peter Blöchl	Institut für Theoretische Physik
Prof. Dr. Uwe Bracht	Institut für Maschinelle Anlagen- technik und Betriebsfestigkeit
Prof. Dr. Wolfgang Busch	Institut für Geotechnik und Markscheidewesen
Prof. Dr. Otto Carlowitz	Institut für Umweltwissen- schaften
Prof. Dr. Jürgen Dix	Institut für Informatik
Prof. Dr. Eberhard Gock	Institut für Aufbereitung, Depo- nietechnik und Geomechanik
Prof. Dr. Barbara Hammer	Institut für Informatik
Prof. Dr. Stefan Hartmann	Institut für Technische Mechanik
Prof. Dr. Kai Hormann	Institut für Informatik
Prof. Dr. Tom Kirchner	Institut für Theoretische Physik



Prof. Dr. Karl-Heinz Lux	Institut für Aufbereitung, Depo- nietechnik und Geomechanik
Prof. Dr. Jörg P. Müller	Institut für Informatik
Prof. Dr. Heinz Palkowski	Institut für Metallurgie
Prof. Dr. Günter Pusch	Institut für Erdöl- und Erdgas- technik
Prof. Dr. Harald Richter	Institut für Informatik
Prof. Dr. Gudrun Schmidt	Institut für Technische Chemie
Prof. Dr. Roman Weber	Institut für Energieverfahrens- technik und Brennstofftechnik
Prof. Dr. Volker Wesling	Institut für Schweißtechnik und Trennende Fertigungsverfahren
Prof. Dr. Gabriel Zachmann	Institut für Informatik
Prof. Dr. Gerhard Ziegmann	Institut für Polymerwerkstoffe und Kunststofftechnik



