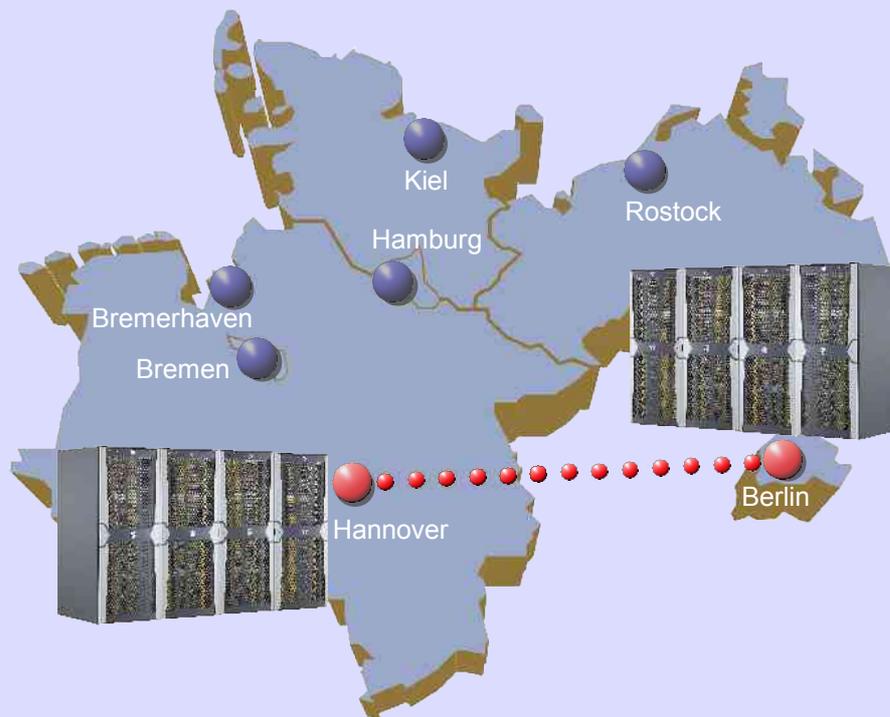


Forschung im HLRN-Verbund 2011





Norddeutscher Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen

Forschung im HLRN-Verbund 2011

HLRN-Website:

www.hlrn.de

PDF-Datei dieses Berichts:

www.hlrn.de/twiki/pub/NewsCenter/Publications/HLRN-Report-2011.pdf

Der Inhalt der Einzelbeiträge und deren Darstellung liegt in der Verantwortung der jeweiligen Autoren. Der HLRN kann für Interessierte Kontakt zu Autoren von Beiträgen herstellen. Anfragen richten Sie bitte an die E-Mail-Adresse contact@hlrn.de oder an die

Geschäftsstelle des Wissenschaftlichen Ausschusses des HLRN

c/o Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

Dr. Manfred Stolle

Takustraße 7, 14195 Berlin

Telefon: +49(0)30-84185-310

Telefax: +49(0)30-84185-311

E-Mail: zulassung@hlrn.de

Impressum:

Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin und
Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen, Hannover

c/o Takustraße 7, 14195 Berlin

Telefon: +49(0)30-84185-0

Telefax: +49(0)30-84185-125

E-Mail: board@zib.de

Redaktion und Konzept:

Prof. Dr. Volkard Linke, Freie Universität Berlin

Prof. Dr.-Ing. Thomas Rung, Technische Universität Hamburg-Harburg

Dr. Matthias Läuter, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

Dr. Wolfgang Baumann, Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

Gestaltung:

Dr. Bernhard Bandow, Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen, Hannover

Druck:

Rabe KG Buch- und Offsetdruck, Berlin

© 2011 Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin,
Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen, Hannover

ISBN 978-3-00-034131-1

Vorwort des Verwaltungsrates

Liebe Leserinnen und Leser,

der Norddeutsche Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN-Verbund) ist ein Zusammenschluss der Länder Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein mit dem Ziel, das Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Norddeutschland zu fördern und damit insbesondere die Spitzenforschung zu unterstützen.

Viele Wissenschaftsdisziplinen können sich im internationalen Wettbewerb nur durch die Nutzung geeigneter Rechnerinfrastrukturen behaupten. Typische norddeutsche Forschungsaktivitäten im Bereich der Spitzenforschung sind z.B. erst möglich geworden, nachdem die norddeutschen Küstenländer sowie Berlin ihren Wissenschaftlern ein Hochleistungsrechnersystem zur Verfügung stellen konnten. Vom Wissenschaftsrat ist diese einzigartige, gemeinsame Anstrengung der sechs Länder angemessen gewürdigt worden und wird damit seit Beginn vom Bund gefördert. Mit einem Vorlauf von mehreren Jahren konnten die Länder im Jahr 2002 erstmalig ein gemeinsames, über zwei Standorte verteiltes Hochleistungsrechnersystem in Betrieb nehmen.

Mit dieser Publikation wollen wir Ihnen einen Einblick in die Arbeit von Projekten geben, in denen mit Hilfe unseres Supercomputers (HLRN-II) die Forschung intensiviert und voran gebracht werden konnte. Der Ausschnitt dokumentiert die verschiedenen Wissenschaftsdisziplinen der norddeutschen Spitzenforschung, denen der Verbund ein beständiger und verlässlicher Partner ist.

Der Erfolg des HLRN-Verbundes ist nur durch das große Engagement seiner Mitglieder möglich geworden und wird auch nur durch dieses Engagement weiterleben. Der Verwaltungsrat möchte an dieser Stelle den beteiligten Personen, die nicht alle namentlich genannt werden können, ganz herzlich danken. Insbesondere gilt dieser Dank

- der Technischen Kommission und den beiden Betreiberzentren, dem Regionalen Rechenzentrum für Niedersachsen in Hannover und dem Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin, die in hervorragender Weise die Implementierung und den Betrieb des HLRN übernommen haben,
- den Fachberatern, die im unermüdlichen Einsatz überall an den Hochschulen der norddeutschen Länder Wissenschaftler bei der Nutzung des HLRN unterstützen und das Kompetenznetzwerk des Verbundes „leben“ sowie
- dem Wissenschaftlichen Ausschuss, der in gewissenhafter Weise dafür Sorge trägt, dass die hohe wissenschaftliche Qualität der Projekte auf dem HLRN-II gewährleistet wird.

Der Dank des Verwaltungsrates geht aber auch an die Nutzer des HLRN, denn ihre Projekte sind es, die das Hoch- und Höchstleistungsrechnen in Norddeutschland tragen.

Wenn nun Ihr Interesse geweckt wurde, liebe Leserinnen und Leser, dann sei ein kleiner Ausblick gestattet: Der HLRN-Supercomputer wird regelmäßig dem neuesten technischen Stand angepasst. Nach der Installation des HLRN-I in 2002 und dem seit 2008 genutzten HLRN-II hat der Verbund erste Schritte hin zum HLRN-III bereits erfolgreich unternommen, um das bestehende Rechnersystem in den nächsten Jahren zeitgerecht zu erneuern. Parallel dazu wird zukünftig die Entwicklung von Methoden und Algorithmen verstärkt, um solche Systeme effizienter nutzen zu können. Hierzu braucht es ebenso eine größere Anzahl an gut ausgebildeten Fachkräften. Nachwuchsförderung wird daher im HLRN-Verbund eine größere Rolle als bisher spielen.

Peter Waue
Niedersächsisches Ministerium für Wissenschaft und Kultur
Vorsitzender des Verwaltungsrates des HLRN

Das Hochleistungsrechnersystem HLRN-II wurde mit Mitteln des Bundesministeriums für Bildung und Forschung (BMBF) gefördert.

GEFÖRDERT VOM



Bundesministerium
für Bildung
und Forschung

Vorwort der Technischen Kommission

Im Jahr 2002, gut ein Jahr nach der offiziellen Gründung des HLRN-Verbundes, wurde der erste gemeinsame Hochleistungsrechner HLRN-I der beteiligten sechs Bundesländer an den Standorten Berlin und Hannover in Betrieb genommen. Das System wurde sofort gut angenommen und konnte mit seiner (nicht nur) im norddeutschen Raum einmaligen Leistung der Wissenschaft wichtige Impulse geben.

Zunächst wurde das Konzept, ein symmetrisches System an zwei Standorten zu betreiben, vielfach skeptisch gesehen. Erfolgreiche Forschungs- und Entwicklungsarbeiten zur Schaffung einer Ein-System-Eigenschaft, einer automatischen Datenspiegelung und eines Betriebskonzepts an zwei Standorten mit gegenseitiger Vertretungsmöglichkeit sowie die erhöhte Verfügbarkeit durch getrennte Infrastruktur und vieles mehr zeigten aber alsbald, dass die Vorteile die sicher vorhandenen Nachteile mehr als aufwiegen.

Mit dem HLRN wurde begonnen, ein über alle beteiligten Bundesländer verteiltes HPC-Kompetenznetzwerk aufzubauen und stetig weiterzuentwickeln. Dazu gehören spezielle HPC-Kompetenz in verschiedenen Wissenschaftsdisziplinen, Forschungsaktivitäten zur Verknüpfung von Anwendungs- und Methodenwissenschaften, Weiterbildungsangebote zur effizienten Nutzung von HPC im Verbund, Betrieb von HPC-Systemen und ein flächendeckendes, von den lokalen Rechenzentren organisiertes Netz von Beratern als Ansprechpartner für die Nutzer des HLRN.

Im Jahr 2008 wurde dann das Nachfolgesystem HLRN-II in Betrieb genommen. Mit seiner Gesamtleistung von ca. 300 TFlop/s liegt der HLRN-II in der Spitzengruppe der deutschen HPC-Systeme. Die bereits nach kurzer Zeit erreichte Auslastung von über 85% macht den Bedarf und die Bedeutung des Systems für die Wissenschaft deutlich. Der nun vorgelegte Bericht über wissenschaftliche Projekte am HLRN-II unterstreicht dieses sehr eindrucksvoll.

Die Wissenschaftler als direkte Nutznießer und alle am HLRN beteiligten Gremien sind der festen Überzeugung, dass es sich beim HLRN um ein Erfolgsmodell handelt, das im Interesse der Spitzenforschung fortgeführt werden muss. Aus diesem Grund ist inzwischen das Verfahren zur Beschaffung eines HLRN-III angelaufen. Auch beim HLRN-III wird es für die Technische Kommission eine große Herausforderung sein, Anforderungen wie höchste Rechenleistung durch modernste Technologie, deren Nutzbarkeit in konkreten wissenschaftlichen Fragestellungen, Energieeffizienz, Ein-System-Eigenschaft u.v.m. miteinander zu verknüpfen. Dieses wird nur auf der Basis unseres Kompetenznetzwerks gelingen, das kontinuierlich weiterentwickelt und ausgebaut wird.

Ralf Bröck
Rechenzentrum der Universität Kiel
Vorsitzender der Technischen Kommission des HLRN

Inhaltsverzeichnis

Einleitung	1
Chemie	3
Theoretische Untersuchung multivalenter Wechselwirkungen <i>D. Mollenhauer, B. Paulus</i>	4
Ab-initio-molekulardynamische Simulationen des Protonentransfers in Aminosäuren und kleinen Peptiden <i>B. Schmidt, T. Frigato, Ch. Schütte</i>	6
Periodic density functional theory calculations of methanol and vanadium oxide aggregates cerium oxide: geometrical electronic structures, vibrational properties, reactivity <i>C. Popa</i>	8
Moleküldynamiksimulation an licht- und spannungsabhängigen Enzymen <i>M.A. Mroginski, S. Kaminski, T. Utesch</i>	10
Quanteneffekte in Lithium-basierten Wasserstoffspeicher-Materialien <i>D. Sebastiani</i>	12
Theoretische Untersuchung von MgF ₂ -Oberflächen <i>C. Müller, B. Paulus</i>	14
Redox-Active MOF-5 Isotypes: Novel Entatic State Catalysts? <i>A. Mavrantakis, J. Sauer</i>	16
Selective oxidation of propane by vanadium oxide sites supported on silica <i>J.W. Liu, F. Mohamed, J. Sauer</i>	18
The interaction of Au with γ -Al ₂ O ₃ surfaces <i>G. Feng, M. V. Ganduglia-Pirovano, J. Sauer</i>	20
Ab Initio MD study of the solvation structure and EPR spectrum of Fremy's salt in water-methanol solutions <i>D. Sebastiani</i>	22
Hybrid Hartree-Fock/Dichtefunktionaltheoriestudie zur Rolle von Ceroxid in der oxidativen Dehydrogenierung von Methanol auf geträgertem Vanadiumoxid <i>J. Paier</i>	24
Molecular dynamics simulations of motor and proton transporter proteins <i>A.-N. Bondar</i>	26
Graphene on ferromagnetic surfaces and its functionalization with water and ammonia <i>E. Voloshina, B. Paulus, Yu. Dedkov</i>	28
Defect engineering in TiO ₂ – from bulk to nanostructures <i>P. Deák, B. Aradi</i>	30
First Principles Molecular Dynamics Simulations of Di- and Tripeptides on Titanium Dioxide Surfaces <i>W. Friedrichs, W. Langel, L. Colombi Ciacchi, S. Köppen</i>	32
Molecular simulation studies of the interaction of weakly coordinating ions with biological interfaces <i>D. Gabel, K. Karki, D. Roccatano</i>	34
Kollektive Phänomene in Lipidmembranen: Dynamik und die Rolle von Peptiden bei Porenbildung und Fusion <i>M. Müller, K.Ch. Daoulas, M. Fuhrmans, M. Hömberg, G. Marelli</i>	36
Simulation der Dynamik von Polymersystemen: Gleiten von Tröpfchen auf deformierbaren Oberflächen und Kinetik der Strukturbildung in mehrkomponentigen Systemen <i>M. Müller, A. Galuschko, F. Léonforte, M. Mülayim, N. Tretyakov</i>	38

Geowissenschaften	41
Planetenentwicklung und Leben	
<i>U. Langematz, M. Kunze, A. Hamann-Reinus</i>	42
Atmosphärische Dynamik und Chemie terrestrischer Exoplaneten	
<i>H. Rauer, M. Godolt</i>	44
Project on Solar Effects on Chemistry and Climate including Ocean Interactions (ProSECCO)	
<i>U. Langematz, A. Kubin</i>	46
Stratospheric Change and its Role for Climate Prediction (SHARP)	
<i>U. Langematz, S. Meul, S. Oberländer</i>	48
Berechnung der Wasserdampfkonzentrationen aus Limb-Messungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY	
<i>K. Weigel, W. Lotz, M. Vountas</i>	50
Global and regional ocean-ice simulations using FESOM: Toward applications with variable resolution and regional focus	
<i>P. Lemke, Q. Wang, D. Sidorenko, S. Danilov, J. Schröter, L. Nerger</i>	52
Die Entwicklung der tropischen Regenzone im späten Neogen	
<i>G. Jung, M. Prange, M. Schulz</i>	54
Modellierung und Simulation von Tsunami-Ausbreitung und -Überflutung	
<i>W. Hiller, N. Rakowsky, S. Harig, A. Fuchs</i>	56
Atmosphärische Feuchtetransporte und thermohaline Zirkulation: Untersuchung möglicher Rückkopplungsmechanismen für abrupte Klimaschwankungen	
<i>M. Prange, H. Liu, M. Schulz</i>	58
Der Effekt submesoskaliger Turbulenz auf den Gasaustausch zwischen Ozean und Atmosphäre	
<i>C. Eden</i>	60
Simulation von Zukunftsszenarien für das Ökosystem der Ostsee	
<i>T. Neumann, I. Kuznetsov, R. Friedland</i>	62
Ausbreitungswege von Nährstoffen und Zeitskalen von Nährstofftransporten in der Ostsee	
<i>H. Radtke, Th. Neumann</i>	64
Dichteströmungen in Hervey Bay (Australien)	
<i>U. Gräwe</i>	66
Regionale Anpassungsstrategien für die deutsche Ostseeküste (RADOST)	
<i>U. Gräwe, H. Burchard</i>	68
Simulation von Luftströmungen in Städten mit innovativen Turbulenzmodellen	
<i>S. Raasch, M. Letzel</i>	70
Auswirkungen des prognostizierten Klimawandels auf die Sediment- und Hydrodynamik im Ostfriesischen Wattenmeer	
<i>J.-O. Wolff, K.A. Lettmann, S. Grashorn</i>	72
Grobstruktursimulationen zum Einfluss der Turbulenz in Wolken auf das Tropfenwachstum	
<i>S. Raasch, T. Franke</i>	74
Darstellung der konvektiven Grenzschicht während Kaltluftausbrüchen in Wetter- und Klimamodellen	
<i>M. Gryschka, J. Kampmeyer</i>	76
Numerische Simulation zur Wechselwirkung der Atmosphäre mit der Tragflügelumströmung	
<i>S. Raasch, C. Helmke</i>	78
Entwicklung und Validierung eines Grobstruktursimulationsmodells zur Berechnung der Strömungsverhältnisse inner- und außerhalb von Offshore-Windparks	
<i>G. Steinfeld</i>	80
Hochauflösende Grobstruktursimulationen atmosphärischer Grenzschichtturbulenz	
<i>R. Heinze, S. Raasch</i>	82
Auswirkungen des Klimawandels auf die Zirkulation des Atlantischen Ozeans	
<i>E. Behrens, C.W. Böning</i>	84
Investigating the role of ocean ventilation in anthropogenic CO ₂ uptake and sequestration via Green functions	
<i>A. Oschlies, I. Kriest</i>	86
Einfluss von Remineralisierungsparametern auf globale biogeochemische Ozeanmodelle	
<i>A. Oschlies, I. Kriest</i>	88

Ventilation der Sauerstoffminimumzonen in den tropischen Ozeanen <i>F.U. Schwarzkopf, C.W. Böning</i>	90
Simulation des vergangenen, heutigen und zukünftigen Klimas <i>M. Latif, N.S. Keenlyside</i>	92
Ingenieurwissenschaften	95
Numerische Simulation der Aktiven Strömungsbeeinflussung auf einer Hochauftriebskonfiguration <i>T. Höll, F. Thiele</i>	96
Fluidik-Elemente zur aktiven Strömungskontrolle <i>J. Sesterhenn, M. Lemke</i>	98
Numerische Simulation und Analyse einer Stator-Kaskade mit aktiver Strömungskontrolle <i>C. Gmelin, M. Steger, E. Wassen, F. Thiele</i>	100
Optimal control to reduce supersonic jet-noise with porous media <i>J. Schulze, J. Sesterhenn</i>	102
Untersuchung und Beeinflussung von Breitbandlärm in Turbomaschinen mit neuartigen hybriden Simulationsverfahren <i>B. Greschner, F. Thiele</i>	104
Further development of DES for the simulation of complex turbulent flows <i>C. Mockett, B. Greschner, L. Wang, F. Thiele</i>	106
Untersuchung und Beeinflussung des Breitbandlärms von Triebwerksdüsen durch Modifikation der Düsenkante <i>D. Eschricht, F. Thiele</i>	108
Numerische Untersuchungen der Strömung von Kristallschmelzen beim Czochralski-Verfahren <i>R. Fornari</i>	110
Numerical Investigation of Noise Generation and Reduction in Turbofan Engines <i>M. Steger, U. Michel, F. Thiele</i>	112
Numerische Simulation und Analyse der Interaktion von Strömung und Schall in einem stehenden Verdichterringgitter <i>R. van Rennings, M. Steger, K. Ehrenfried, F. Thiele</i>	114
Numerical Simulation of the Flow around a Generic Vehicle Using Active Flow Control <i>S. Eichinger, F. Thiele, E. Wassen</i>	116
Untersuchungen zur Reduzierung des turbulenten Widerstands durch wellenförmige Lamellen <i>F. Kramer, E. Wassen, F. Thiele</i>	118
Oxidized silicon nanowires as biomolecular sensors: <i>ab initio</i> structural and electronic analysis <i>L. Colombi Ciacchi</i>	120
Computational Combinatorial Materials Science study to optimize the band gap for metal-oxide based materials for their usage in photoelectrolysis cells <i>L. Mädler, T. Heine</i>	122
3D Modeling of Hydrothermal Plumes <i>M. Walter, Y. Tao</i>	124
Thermalgetriebene Vermischung turbulenter Konvektionsströmungen in einem geschlossenen Container <i>R. Groll, C. Zimmermann</i>	126
Bestimmung der Rolldämpfung moderner Schiffsrumpfformen mit Hilfe von experimentellen und numerischen Untersuchungen komplexer Strömungsvorgänge <i>M. Abdel-Maksoud, S. Handschel, J.P. Soproni</i>	128
Entwicklung und Implementierung der hybriden RANS LES Modelle zur Berechnung der Strömung im Heckbereich von Schiffen <i>N. Kornev, A. Taranov, E. Shchukin, M. Walter</i>	130
Untersuchung der physikalischen Mechanismen zur Erhöhung des Wärmeüberganges auf Delenoberflächen <i>J. Turnow, N. Kornev, E. Hassel</i>	132
Untersuchung von reaktiven turbulenten Mischungsvorgängen bei hohen Schmidt-Zahlen mit besonderer Berücksichtigung der Mikromischung <i>M. Walter, N. Kornev, E. Hassel</i>	134

Simulation des Überziehens von Triebwerkseinlaufströmungen mit fortschrittlichen Turbulenzmodellen <i>R. Radespiel, A. Probst</i>	136
Dreidimensionale Strömungssimulation einer gesamten Flugzeugturbine zur Untersuchung der Einflüsse von Temperaturunregelmäßigkeiten am Eintritt auf den Abgasstrahl <i>J. Seume, R. Adamczuk</i>	138
Unsteady Work Optimized Turbine <i>J. Seume, M. Biester, M. Henke</i>	140
Reynolds-Spannungs-Modellierung für komplexe 3D-Strömungsprobleme in der Flugzeug-Aerodynamik <i>R. Radespiel, R.-D. Cécora</i>	142
Berechnung von instationären Strömungen in Hochleistungsradialventilatoren <i>G. Brenner, Y. Yang, A. Lucius</i>	144
Numerical Simulation of Jet Actuation over Swept High Lift Airfoil <i>R. Radespiel, S. Mahmood</i>	146
Zeitaufgelöste Simulation von abgelösten Strömungen in Strömungsmaschinen mit Turbulenz auflösenden Modellen <i>G. Brenner, A. Lucius</i>	148
Numerische Simulationen zur Wirkungsweise laserinduzierter Beeinflussungsmethoden für Hochgeschwindigkeitsgrenzschichten <i>R. Radespiel, D. Heitmann</i>	150
Systemspezifische Schmierfilmdissipation in den radialen und axialen Lagerstellen von Abgasturboladern unter realen Betriebsbedingungen mit unterschiedlichen Ölzuführungsrandbedingungen <i>J. Seume, H. Rätz</i>	152
Numerical Investigation of Interference Effects of the Horizontal and the Vertical Tail Planes on Transport Aircraft <i>R. Radespiel, V. Nallapula</i>	154
Physik	157
Berechnung eichvarianter Greenscher Funktionen in der Gitter-QCD mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen <i>M. Müller-Preussker, E.-M. Ilgenfritz, A. Sternbeck</i>	158
Determination of upper and lower Higgs boson mass bounds from a chirally invariant lattice Higgs-Yukawa model <i>M. Müller-Preussker, K. Jansen</i>	160
Twisted Mass-Gitter-QCD bei endlicher Temperatur <i>M. Müller-Preussker (für die tmfT-Kollaboration)</i>	162
Precision charm physics with $N_f = 2$ dynamical quarks <i>R. Sommer, U. Wolff</i>	164
B-physics from lattice QCD <i>A. Shindler (for the European Twisted Mass Collaboration)</i>	166
Skalierungsgesetze für die Manteldynamik in Exoplaneten <i>J. Oberst, L. Noack</i>	168
Functionalization of semiconductor nanowires <i>A.L. da Rosa, N.H. Moreira, Th. Frauenheim</i>	170
Verschmelzung von Neutronensternen <i>C. Lämmerzahl, S. Rosswog</i>	172
Magnetic fields in galaxy clusters <i>C. Lämmerzahl, M. Brueggen</i>	174
3D Strahlungstransport & Rechnungen mit dem PHOENIX/3D Code <i>P. Hauschildt</i>	176
Ab initio Theorie elektronischer und magnetischer Störstellen in Graphen und verwandten Materialien <i>A. Lichtenstein, T. Wehling</i>	178
Lattice QCD at Physical Quark Masses <i>G. Schierholz</i>	180

Komplexer metallischer Magnetismus stark korrelierter Übergangsmetalloxide <i>F. Lechermann</i>	182
Ab-initio-Berechnung der thermophysikalischen Eigenschaften von Materie unter extremen Bedingungen <i>R. Redmer, M. French, B. Holst, W. Lorenzen, A. Becker, K.-U. Plagemann, C. Trötschler</i>	184
Nichtlineare Licht-Materie-Dynamik in finiten Vielteilchensystemen: Cluster in intensiven IR-, VUV-, und XUV-Laserfeldern <i>Th. Fennel, J. Köhn, M. Arbeiter, Ch. Peltz</i>	186
Adsorption of Organic Molecules on Wide-Gap Insulators <i>W. Chen, C. Tegenkamp, H. Pfnür</i>	188
Numerische Plasmasimulationen von Himmelskörpern <i>U. Motschmann, H. Kriegel, S. Wiehle</i>	190
Untersuchung der Plasmaumgebung des Kometen 67P/Churyumov-Gerasimenko <i>K.-H. Glaßmeier, C. Koenders</i>	192
Numerical simulations of an infalling subcluster: A comparative study <i>W. Schmidt, J. Schulz, E. Lévêque</i>	194
Quanten-Monte-Carlo für korrelierte Quantensysteme im und abseits des thermischen Gleichgewichts <i>Th. Pruschke, A. Honecker, S. Fuchs, A. Kalz, A. Dirks</i>	196
First principle simulations of classical and quantum charged-particle systems <i>M. Bonitz, K. Balzer, S. Bauch, T. Ott</i>	198
Nichtkollinearer Magnetismus auf Oberflächen durch Spin-Bahn-Kopplung <i>S. Schröder, P. Ferriani, S. Heinze</i>	200
Untersuchung strukturregulierender Parameter für kurze und lange Chromatinfasern durch Monte-Carlo-Simulationen <i>G. Wedemann</i>	202
Methodenentwicklung	205
MR-Search: Ein Framework für massiv-parallele Graphensuche mit MapReduce <i>A. Reinefeld, T. Schütt, R. Maier</i>	206
Effiziente Nutzung heterogener Manycore-Systeme <i>A. Reinefeld, Th. Steinke, K. Peter, S. Borchert</i>	208
Distributed branch-and-cut methods to solve previously intractable optimization instances <i>M. Grötschel, Y. Shinano</i>	210
Hochskalierende Datenassimilationsverfahren zur Kombination von numerischen Modellen mit Beobachtungsdaten <i>W. Hiller, L. Nerger</i>	212
Skalierbarkeit globaler Simulationen zur Bestimmung der weltweiten Zirkulation <i>W. Hiller, K. Fieg, S. Harig, J. Schröter, S. Danilov</i>	214
Effiziente Generierung interaktiv nutzbarer 3D-Filme aus massiv-parallelen Simulationen <i>S. Olbrich, M. Vetter</i>	216
Anhang	219
Organisationsstruktur des HLRN	220
Technik des HLRN-II-Systems	221

Einleitung

Der Norddeutsche Verbund für Hoch- und Höchstleistungsrechnen (HLRN) ist ein seit 2001 bestehendes Gemeinschaftsprojekt der sechs norddeutschen Bundesländer Berlin, Bremen, Hamburg, Mecklenburg-Vorpommern, Niedersachsen und Schleswig-Holstein. Es koordiniert die überregionale Verfügbarkeit eines Computersystems der höchsten Leistungsklasse und dessen Nutzung durch die Forschung. Der Verbund betreibt gemeinschaftlich einen Supercomputer, der anteilig an den beiden Standorten Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) und Regionales Rechenzentrum für Niedersachsen (RRZN) an der Leibniz Universität Hannover installiert ist. Die gegenwärtige Rechnergeneration HLRN-II stellt den Anwendern eine Spitzenleistung von 300 TFlop/s (das sind $3 \cdot 10^{14}$ Rechenoperationen pro Sekunde) zur Verfügung.

Der HLRN repräsentiert einen sehr ambitionierten und strukturell modernen Interessenverbund, dessen Aktivitäten die erfolgreiche Bearbeitung wissenschaftlicher Fragestellungen von nationalem und internationalem Interesse ermöglichen. Durch Bündelung der norddeutschen Ressourcen ist es gelungen, eine hervorragende Infrastruktur für anspruchsvolle simulationsbasierte Forschung auf Höchstleistungsrechnern zu etablieren.

Der HLRN-Verbund hat bislang etwa 500 Großprojekte unterstützt. Bei der Nachfrage der Wissenschaftler nach der Unterstützung durch den HLRN ist eine stark steigende Tendenz zu verzeichnen. Dies gilt insbesondere in Bezug auf den Höchstleistungssektor. Die Zuteilung von Ressourcen wird durch den Wissenschaftlichen Ausschuss gutachterlich geregelt. Der Ausschuss prüft die hohe wissenschaftliche Qualität der Fragestellungen wie auch die unabdingbare Notwendigkeit, sie auf einem Rechner der höchsten Leistungsklasse zu bearbeiten. Die deutliche Zunahme von Großprojekten, welche mit mehreren hundert bis mehreren tausend parallelen Rechenprozessen wissenschaftliche Untersuchungen durchführen, die bislang nicht realisierbar waren, unterstreicht die große Bedeutung des HLRN-Systems im Bereich des *Capability Computing*.

Mit der Zulassung auf dem HLRN-System erhalten die Projekte Zugriff auf das Netzwerk des Verbunds. Die inhaltliche Vielfalt und organisatorische Breite des HLRN-Netzwerks sind eine besondere Stärke des Verbunds, sie ermöglichen den Wissenstransfer zwischen den am HLRN tätigen Experten unterschiedlicher Disziplinen. Der Verbund bemüht sich besonders um die Verknüpfung von Anwendungswissenschaften, deren Fragestellungen nur durch den Einsatz von Hochleistungsrechnern beantwortet werden können, mit Methodenwissenschaften, deren Forschungsergebnisse die wirklich effiziente Nutzung der Hochleistungsrechner überhaupt erst ermöglichen: Im Zentrum der Zusammenarbeit steht die fortlaufende Erweiterung der Machbarkeitsgrenzen für Anwendungssimulationen durch den Einsatz und die Weiterentwicklung methodischer Kompetenz.

Das *Norddeutsche Kompetenznetzwerk Wissenschaftliches Rechnen* am HLRN wird durch seine aktive Nutzergemeinschaft wie auch durch eine Vielzahl von engagierten Beratern in den sechs beteiligten Bundesländern getragen: Jedem Forschungsprojekt ist ein Fachberater und ein lokaler Betreuer zugewiesen, deren Aufgabe die Unterstützung der Projektbeteiligten und die Einbindung in den Kompetenzverbund ist. Ein wichtiger Aspekt bei der Gestaltung des Beraternetzwerks ist das Bestreben, allen Projekten eine auf ihren Bedarf zugeschnittene duale methoden- und anwendungswissenschaftliche Unterstützung anzubieten. Wegen des breiten wissenschaftlichen Spektrums der Forschung am HLRN kann ein solches Ziel nur im Rahmen eines Netzwerks realisiert werden. Das Beratungsangebot wird von den Nutzern sehr umfangreich in Anspruch genommen. Das Kompetenznetzwerk stellt zugleich die hohe Ausnutzung der Infrastruktur sicher und bürgt für die Nachhaltigkeit der getätigten Investitionen.

Die signifikant veränderten Nutzungsmöglichkeiten der Hardware, welche mit dem Wechsel zur derzeit aktuellen zweiten Rechnergeneration *HLRN-II* verknüpft waren, konnten mit Unterstützung des Netzwerkes beeindruckend zügig durch die wissenschaftlichen Anwendungen nachvollzogen werden. Für den Betrieb des Computersystems resultierte daraus eine latenzfrei hohe Auslastung des gesamten verfügbaren Kontingents für alle Ausbaustufen. Zugleich war eine bemerkenswert rasche Fortentwicklung der Nutzungsprofile festzustellen, z.B. in Gestalt der Skalierung der Anwendungen. Diese Indika-

toren bestätigen die erfolgreiche Kompetenzentwicklung in Bezug auf die Verknüpfung von Methoden- und Anwendungswissenschaften im HLRN-Verbund.

Der HLRN bietet seinen Nutzern für ihre unterschiedlichen Bedürfnisse unterschiedliche Hardwarenutzungskonzepte im Supercomputingbereich an. Zur Sicherstellung einer nutzungsgerechten Hardwareausstattung in der Gegenwart und für die Zukunft stehen der Wissenschaftliche Ausschuss und die Technische Kommission über die Fachberater in ständigem Austausch mit den Anwendern. So werden unter anderem, koordiniert durch den Wissenschaftlichen Ausschuss, ausgewählte Simulationsverfahren, die einen signifikanten Anteil der verfügbaren Rechenkapazität in Anspruch nehmen, durch ein Expertenteam optimiert. Der Verbund führt ferner regelmäßig Workshops an verschiedenen HLRN-Standorten durch, deren Ziel die Förderung von Methodenkompetenz sowie die Unterstützung von neuen (aber auch altgedienten) Nutzern im Umgang mit der anspruchsvollen Hardware ist.

Der vorliegende Bericht fasst die auf dem Supercomputersystem des HLRN durchgeführte Forschung in Form von Projektberichten der derzeit aktiven Großprojekte zusammen. Die Gruppierung der ausgewählten Kurzbeiträge erfolgt getrennt nach den Themenbereichen *Chemie*, *Geowissenschaften*, *Ingenieurwissenschaften*, *Physik* und *Methodenentwicklung*. Er stellt nach Ansicht der Herausgeber einen eindrucksvollen Beleg für die Leistungsfähigkeit des Verbundes und seiner Wissenschaftler dar.

Für den Wissenschaftlichen Ausschuss des HLRN

Prof. Dr. Volkard Linke
Freie Universität Berlin
Institut für Theoretische Physik

Prof. Dr.-Ing. Thomas Rung
Technische Universität Hamburg-Harburg
Institut für Fluidodynamik und Schiffstheorie

Chemie

Mehrfachbindende Moleküle auf Goldnanopartikeln für die Medizin Theoretische Untersuchung multivalenter Wechselwirkungen

D. Mollenhauer, B. Paulus, Institut für Chemie und Biochemie, Freie Universität Berlin

Kurzgefasst

- Das Verständnis multivalenter Wechselwirkungen ist für die Beantwortung zentraler Fragestellungen im Bereich der Bio- und Materialwissenschaft von entscheidender Bedeutung.
- Die Wechselwirkung von Pyridinderivaten mit einem Goldnanopartikel wird in Bezug auf die Bindungsenergie, die Bindungsstruktur und die Bindungsnatur mit Hilfe von quantenchemischen Methoden untersucht.
- Der Einfluss einfacher Substituenten am Pyridin auf die Bindung zum Goldsystem wird erforscht.
- Quantenchemische Berechnungen von monovalenten im Vergleich zu multivalenten Pyridinderivaten in Wechselwirkung mit einem Goldnanopartikel können Einblick in die Rolle von elektronischen Effekten in multivalenten Wechselwirkungen geben.

Multivalenz beschreibt die Wechselwirkung zwischen einem Ligandensystem, welches mehrere identische Bindungsstellen besitzt, und einem mehrfach präsentem Akzeptorsystem. Multivalente Systeme zeigen einzigartige kollektive Eigenschaften, welche sich von denen der entsprechenden Monovalenten unterscheiden. Diese ermöglichen neue Strategien für die Herstellung von Medikamenten und Reagenzien für die Biochemie, die Biologie und die Materialwissenschaften. Im Rahmen eines Projektes mit experimentellen und theoretischen Ansätzen untersuchen wir die elektronischen Effekte in multivalenten Systemen mit Hilfe von quantenchemischen Berechnungen.

Das besondere Interesse unserer Untersuchungen gilt mono- und multivalenten Pyridinderivaten in Wechselwirkung mit Gold-Nanopartikeln. Anwendungen von Goldnanopartikeln, beladen mit Liganden, sind vor allem in der bioorganischen und medizinischen Chemie, wie beispielsweise der Diagnostik, zu finden. Pyridin ist eines der am häufigsten vorkommenden heterocyclischen Bausteine in Pharmazeutika und Naturprodukten und eignet sich somit als Modellsystem für unsere Berechnungen. Für Pyridin sind Wechselwirkungen mit Oberflächen (und Oberflächen von Nanopartikeln) generell durch eine Bindung über das freie Elektronenpaar des Stickstoffatoms oder durch eine Bindung des π -Systems möglich, wobei hier

das Molekül flach zur Oberfläche koordiniert. Die flache Bindung kann unterschiedlich erfolgen, so kann sich das Zentrum des Ringsystems oder verschiedene Atome des Pyridinringes über einem Goldatom befinden. Mit Hilfe der Untersuchungen soll die Bindungssituation von Pyridinderivaten mit einem Goldnanopartikel untersucht werden. Von hohem Interesse ist die Fragestellung, ob einfache Substituenten, wie die Methoxy- oder die Dimethylamino-Gruppe, in Position 4 am Pyridin die Bindungssituation verändern. Miteinander verlinkte Pyridinderivate werden als multivalente Moleküle in Wechselwirkung mit einem Goldnanopartikel untersucht und mit den entsprechenden monovalenten Wechselwirkungen verglichen. Der Einfluss von verschiedenen Linkern, die Einheit, welche zwei Pyridinmoleküle miteinander verbindet, wird dabei näher beleuchtet.

Zu Beginn des Projektes wurde nach einer quantenchemischen Methode gesucht, mit welcher die Pyridin-Gold-Wechselwirkung beschrieben werden kann. Dazu erfolgte die Untersuchung des Pyridin-Gold-Komplexes, also die Wechselwirkung von Pyridin mit einem Goldatom. Wellenfunktionsbasierte Methoden sowie verschiedene angenäherte Funktionale der Dichtefunktionaltheorie wurden für verschiedene Bindungsstellen getestet und mit einer Benchmark-Methode verglichen [1]. Ein DFT-Funktional, anzuwenden mit der entsprechenden Dispersionskorrektur D3 [2], welches die verschiedenen Bindungsstellen im Vergleich zur Benchmarkmethode akkurat beschreiben kann, wurde ermittelt und kann nun auf größere Systeme angewendet werden.

Ein Goldnanopartikel wird in unserem theoretischem Modell als Gold(111)-Oberfläche simuliert, welches die stabilste Oberfläche für Goldsysteme darstellt. Die Wechselwirkung zwischen dem Pyridin und der Gold(111)-Oberfläche kann durch einen Cluster-Ansatz oder einen periodischen Ansatz erfolgen.

Berechnungen unter Zuhilfenahme des Cluster-Ansatzes haben den Vorteil, dass hoch korrelierte, wellenfunktionsbasierte Methoden, wie die Störungstheorie oder der Coupled-Cluster-Ansatz, verwendet werden können. So untersuchen wir Cluster der Größe $\text{Au}_7\text{-Au}_{10}$. Die Cluster werden so aufgebaut, dass sie einem Ausschnitt einer Gold(111)-Oberfläche ähneln. Die Adsorption von Pyridin und 4-Dimethylaminopyridin (DMAP), mit erhöhter Elektronendichte des aromatischen Ringes, wird in unterschiedlichen Bindungssituationen untersucht. Der Einfluss des Substituenten

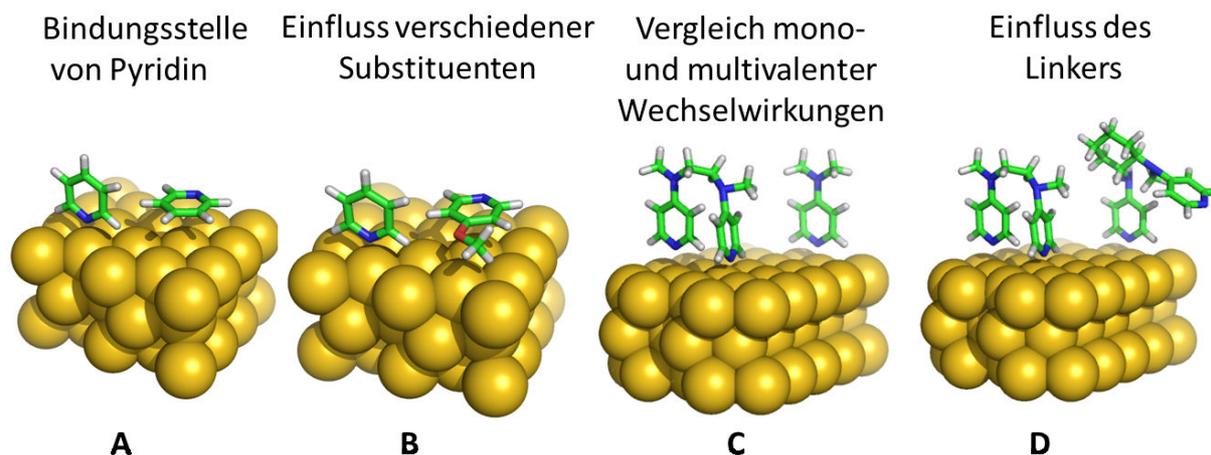


Abbildung 1: Die Wechselwirkung von verschiedenen Pyridinderivaten mit einem Goldnanopartikel. Fragestellungen unserer Untersuchungen sind:

- A) Bindet nicht substituiertes Pyridin mit dem Stickstoffatom oder flach an eine Gold-Oberfläche?
 B) Wie beeinflussen Substituenten am Pyridin die Bindungssituation zu dem Goldsystem?
 C) Spielen elektronische Effekte in multivalenten Wechselwirkungen eine Rolle? Vergleich mono- und multivalenter Wechselwirkungen am Beispiel DMAP vs 2-DMAP
 D) Wie ist der Einfluss des Linkers (starrer vs flexibler Linker)?

auf die Bindungsenergie in verschiedenen Bindungssituationen im Vergleich zum nicht substituierten Pyridin steht dabei im Mittelpunkt des Interesses. Des Weiteren wird der Einfluss von Goldatomen in der 2. Schicht und zusätzlichen Goldatomen auf der 1. Schicht untersucht. Bisherige Berechnungen zeigen, dass letztere eine starke Erhöhung der Bindungsenergie zum Pyridinderivat bewirken können. Größere Gold-Cluster (mit mehr als 19 Gold-Atomen) werden verwendet, um die Bindung verschiedener bivalenter Moleküle, wie dem 2-DMAP (zwei DMAP Moleküle verknüpft), zu studieren. Als Nachteil des Cluster-Ansatzes sei genannt, dass aufgrund der begrenzten Systemgröße keine ausgedehnte Oberfläche simuliert werden kann.

Mit Hilfe von periodischen Berechnungen kann die elektronische Struktur der Oberfläche sehr gut beschrieben werden. Allerdings sind standardmäßig nur effektive Einteilchen-Näherungen des Hamiltonoperators und damit HF und DFT-Rechnungen möglich. Diese Art von Methoden können dispersive Wechselwirkungen, welche wichtig für das zu beschreibende System sind, nicht erfassen, sodass post-DFT-Dispersionsskorrekturen notwendig sind. Die monovalenten Wechselwirkungen von Pyridin und substituiertem Pyridin, wie 4-Methoxypyridin (MP) oder DMAP, werden hier untersucht. So geschieht die Wechselwirkung für Pyridin mit einem Goldsystem über das Stickstoffatom, während sie für MP als flach anbindend vermutet wird. Die Untersuchung multivalenter Moleküle auf der Ober-

fläche führt sehr schnell zu sehr großen Systemen, da sich die Anzahl der Goldatome drastisch erhöht und die Einheitszelle so erweitert werden muss, dass Molekül-Molekül-Wechselwirkungen vernachlässigt werden können.

Quantenchemisch liefert der Cluster-Ansatz eine gute Beschreibung des Pyridin-Goldsystems, während der periodische Ansatz wiederum eine gute Beschreibung der ausgedehnten Oberfläche liefert. Beide Ansätze in Kombination und im Vergleich ermöglichen ein tieferes Verständnis der Wechselwirkung von verschiedenen Pyridinderivaten mit einem Goldsystem und lassen Aussagen über elektronische Effekte in multivalenten Wechselwirkungen zu.

Mehr zum Thema

1. D. Mollenhauer, J. Floß, H.-U. Reissig, E. Voloshina and B. Paulus, *J. Comp. Chem.*, *accepted*.
2. S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, H. Krieg, *J. Chem. Phys.* 132, 154104 (2010).

Förderung

DFG-Sonderforschungsbereich 765

Hüpfende Protonen als Brücke zwischen Wasser und Proteinen Ab-initio-molekulardynamische Simulationen des Protonentransfers in Aminosäuren und kleinen Peptiden

B. Schmidt, T. Frigato, Ch. Schütte, Institut für Mathematik, Freie Universität Berlin

Kurzgefasst

- Protonentransfer-(PT)-Reaktionen spielen eine wesentliche Rolle für Struktur und Funktion von Proteinen. In diesem Projekt wird die Bildung von Zwitterionen (PT zwischen Endgruppen) und die Bildung von Salzbrücken (PT zwischen geeigneten Seitenketten) untersucht.
- Als Modellsysteme für die PT-Reaktionen werden Aminosäuren bzw. kurze Peptidsequenzen gewählt. Unser Interesse gilt der Rolle des Wassers als Lösungsmittel, das in Computersimulationen schrittweise hinzugefügt wird.
- Die Dynamik der untersuchten Moleküle wird numerisch simuliert, wobei die auftretenden Kräfte in jedem Zeitschritt durch eine Berechnung der Elektronendichte ermittelt werden. Die entsprechenden Algorithmen profitieren von der massiv parallelen Architektur der HLRN-Computer.

In der Säure-Base-Chemie werden Protonen zwischen einer Säure (Protonendonator) und einer Base (Protonenakzeptor) übertragen, wobei die entstehenden Ionen in der Regel durch die Wechselwirkung mit einem polaren Lösungsmittel stabilisiert werden. Einen interessanten Spezialfall stellt Wasser dar, das sowohl als Säure als auch als Base agieren kann, wobei spontan Hydroxyl- und Hydronium-Ionen entstehen können. Durch das Hüpfen von Protonen entlang benachbarter Moleküle können Ladungen auch über Entfernungen auf der Nanometerskala in sogenannten Wasserbrücken oder „Wasserdrähten“ transportiert werden [1].

Neben der großen Bedeutung des Protonentransfers in wissenschaftlich-technischen Bereichen wie z. B. der Konversion von Sonnenenergie sowie der Energieumwandlung in Brennstoffzellen spielt dieser Reaktionsmechanismus vor allem in der Biochemie eine wesentliche Rolle. Die Struktur, und damit letztlich auch die Funktion, von Proteinen wird durch eine Vielzahl verschiedener intra- und intermolekularer Wechselwirkungen bestimmt. Diese hängen entscheidend vom Protonierungszustand eines Proteins ab. Dem Protonentransfer (PT) kommt dabei in zwei Zusammenhängen eine wichtige Bedeutung zu. (1) Zwischen den Enden von Proteinketten werden Protonen übertragen.

Dadurch liegen Proteine in wässriger Lösung typischerweise als Zwitter-Ionen vor, d. h. mit kationischen Amino- und anionischen Carboxyl-Enden. (2) Bei Vorliegen geeigneter Seitenketten können ebenfalls Protonen übertragen werden, z. B. zwischen einem sauren Glutamin- und einem basischen Lysin-Residuum. Nähern sich diese auf weniger als 400 pm an, spricht man von einer Salzbrücke.

Ziel des Projektes ist es, die Mechanismen des PTs auf molekularer Ebene zu verstehen, wobei wir uns zunächst auf Aminosäuren und kleinere Peptidketten beschränken müssen. Besonderes Augenmerk gilt dabei der Rolle des Wassers. Obwohl die weitaus meisten biologischen Prozesse in wässriger Lösung auftreten, beginnen unsere Untersuchungen bei isolierten Aminosäuren und Peptiden, um so die intra- von den intermolekularen Prozessen trennen zu können. Anschließend werden in unseren Simulationen nach und nach einzelne Wassermoleküle hinzugefügt, um so den Einfluss des Lösungsmittels kontrolliert zu untersuchen. So können Fragen beantwortet werden, die in Experimenten gar nicht oder nur sehr schwer zugänglich sind, wie z. B.: Wieviele Wassermoleküle sind erforderlich, um Aminosäuren oder Peptide von ihrer neutralen in ihre zwitterionische Form zu überführen? Was passiert mit einer Salzbrücke, wenn Wassermoleküle hinzugefügt werden? Wie ist der Einfluss der Protonierung und der (Mikro-)Solvatisierung auf die Sekundärstruktur eines Peptides? Darüber hinaus ist es interessant, diese Prozesse in ihrer Zeitabhängigkeit zu simulieren, um so auch die Zeitskalen der untersuchten Prozesse studieren zu können. Wesentliche Fragen sind z. B.: Wie schnell können Protonen von Termini bzw. von geeigneten Seitenketten abgelöst bzw. an diese angelagert werden? Auf welcher Zeitskala werden Protonen zwischen Protein und Wasser übergeben, und wie schnell ist der Transport von Protonen entlang von Wasserbrücken?

Bei den weitaus meisten Computersimulationen zur Struktur und Dynamik von Peptiden und Proteinen werden (semi-)empirische Modelle zur Berechnung von Energien und Kräften zwischen den Atomen angewandt. Neben Einschränkungen in der Genauigkeit und Übertragbarkeit solcher Modelle besteht die wesentliche Einschränkung darin, dass das Brechen und Bilden chemischer Bindungen in vielen Fällen nicht beschrieben wird. Daher wenden wir für die Untersuchung von PT-Reaktionen Verfahren an, bei denen in je-

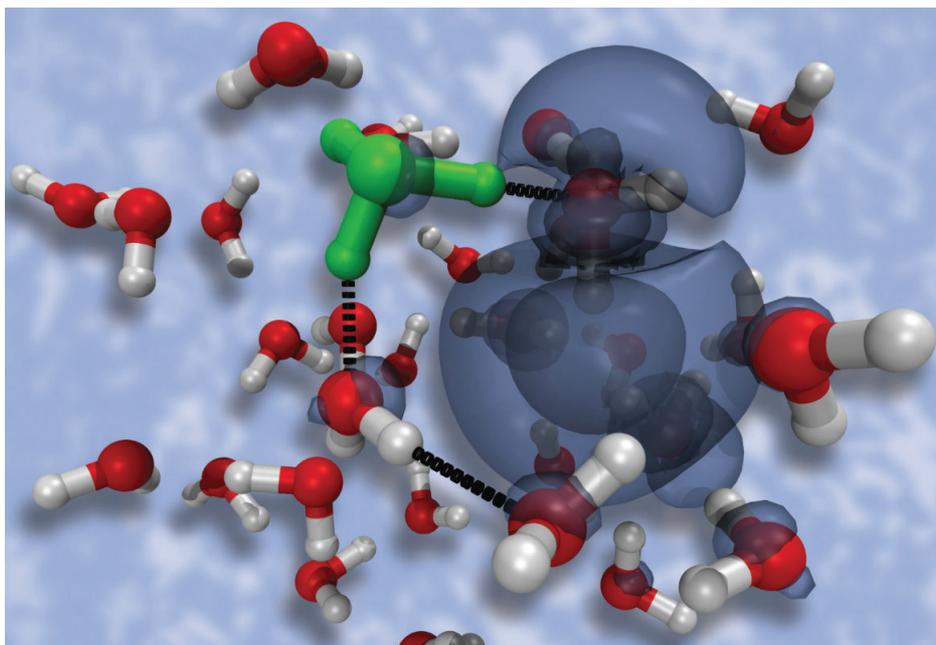


Abbildung 1: Schnappschuss einer „ab-initio“-Molekulardynamiksimulation der Rekombinationsreaktion eines Protons und eines Elektrons in einem Wassercluster, aus [4]

dem Zeitschritt der Simulationen die Energien bzw. Kräfte aus der Elektronenstruktur berechnet werden. Solche Ansätze werden als „ab-initio“-Molekulardynamik (AIMD)-Verfahren bezeichnet, weil sie ohne Modellannahmen die Schrödinger-Gleichung (für die Wellenfunktion) oder die Kohn-Sham-Gleichung (für die Dichte) der Elektronen lösen. Diese Ansätze haben sich in den letzten 25 Jahren, bedingt durch die Weiterentwicklung der Theorie und der Computer-Hardware, in weiten Bereichen der computergestützten Physik und Chemie etabliert und können heute auch zur Simulation mittlerer bis großer molekularer Systeme eingesetzt werden. Das an der Universität Zürich entwickelten Programmpaket CP2K implementiert die AIMD algorithmisch sehr effizient und profitiert von der massiv-parallelen Architektur der HLRN-Computer.

Erste Ergebnisse unserer AIMD-Simulationen von Elektronen und Protonen in Wasserclustern (aus einem vorhergehenden HLRN-Großprojekt) zeigen das Potenzial dieser Methoden und stellen einen wichtigen Zwischenschritt dar: So konnte in unserer Arbeit [2] die Struktur von solvatisierten Elektronen untersucht und zur Interpretation experimenteller Spektren heran gezogen werden. Weiterhin wurde die Dynamik der Elektron-Lokalisierung und der zugehörigen Re-Orientierung des umgebenden Wassers auch als Funktion der Temperatur untersucht [3]. In einer anderen Untersuchung [4] konnten wir zeigen, wie

die Dynamik der einfachsten Rekombinationsreaktion eines Protons mit einem Elektron von der (Mikro-)Solvatation in Wasser beeinflusst wird.

Mehr zum Thema

1. Marx, D.; Tuckerman, M. E.; Hutter, J.; Parrinello, M., 1999: The Nature of the Hydrated Excess Proton in Water. *Nature*, 397, 601-604. doi:10.1038/17579
2. Frigato, T.; Van de Vondele, J.; Schmidt, B.; Schütte, Ch. Jungwirth, P., 2008: Ab Initio Molecular Dynamics Simulation of a Medium-Sized Water Cluster Anion. *J. Phys. Chem. A*, 112, 6125-6133. doi:10.1021/jp711545s
3. Marsalek, O.; Uhlig, F.; Frigato, T.; Schmidt, B.; Jungwirth, P., 2010: Dynamics of Electron Localization in Warm vs. Cold Water Clusters. *Phys. Rev. Lett.*, 105, 043002. doi:10.1103/PhysRevLett.105.043002
4. Marsalek, O.; VandeVondele, J.; Bradforth, S. E.; Frigato, T.; Schmidt, B.; Schütte, Ch.; Jungwirth, P., 2010: Hydrogen Forms in Water by Proton Transfer to a Distorted Electron. *J. Phys. Chem. B*, 114, 915-920. doi:10.1021/jp908986z

Förderung

Center for Scientific Simulation (Exzellenzprogramm der FU Berlin)

Theory can explain and design materials with specific properties. Periodic density functional theory calculations of methanol and vanadium oxide aggregates cerium oxide: geometrical electronic structures, vibrational properties, reactivity

C. Popa, Institut für Chemie, Humboldt Universität zu Berlin

Abstract

- First-principles spin-polarized DFT + U calculations will be performed for the investigation of the structure, electronic and vibrational properties and the reactivity of vanadia and methanol on ceria model catalysts.
- First the thermodynamically stable monomeric and aggregated vanadia species are identified. Then the coadsorption of methanol and dissociated methanol with vanadia on ceria surfaces are considered. Further on the possible minimum energy paths for the oxidation in the presence of vanadia species of methanol to formaldehyde are investigated.
- The role of the ceria support and of the vanadia structures is a key aspect of the enhanced activity observed for ceria supported vanadia in certain oxidation reactions. The reaction energies, as well as the determination of the electronic, thermodynamic and vibrational properties are studied.

Understanding of the structure and properties of a system at atomic level has a big impact in many scientific and technological fields such as physics, chemistry, catalysis, medicine, microelectronics, astronomy. Theoretical approach of the designed models must embrace part of the complexity of the real system.

The production of most important substances involves catalysts, which change the rate of a reaction. The general goal is to discover alternative reaction pathways to the reaction product with lower activation energy than the reaction route not mediated by the catalyst.

Supported vanadium oxide catalysts have been studied quite extensively because of their high activity for selective oxidation reactions. The nature of the support has a key influence on the physico-chemical and catalytic properties of the supported vanadium oxide.

Vanadia supported on ceria shows a remarkably high activity as compared to silica- and alumina-supported catalysts. Notwithstanding the well-known promoting effect of ceria in oxidation catalysis, which is typically attributed to its ability to store,

release, and transport oxygen ions, the origin of the support effect on the activity of vanadia/ceria catalysts has remained a topic of continuous investigations.

The study of well-defined model systems of increasing complexity, both experimentally and theoretically, is of importance for analyzing the support effect on the structure and properties of vanadia/ceria systems. Statistical thermodynamics can account for the effect of oxygen partial pressure at a given temperature (or temperature at a given pressure) on the stability of the supported ad-species.

Using the previous allocated HLRN computer time, through a successful combination of density functional theory (DFT) calculations performed here and experimental techniques conducted in Fritz-Haber Institute, Berlin, the formation of monomeric $O=V^{5+}O_3$ species on the $CeO_2(111)$ surface at low vanadia loadings is demonstrated [1]. For the first time, a direct relationship between the nuclearity of vanadia species (monomeric vs. polymeric) and their vibrational properties is shown. Ceria stabilizes the vanadium +5 oxidation state, leading to partially reduced ceria upon vanadium deposition. The results indicate that ceria surfaces stabilize small vanadia species, such as monomers and trimers, that sinter into two-dimensional, monolayer islands.

Recently the support effect on the oxidative dehydrogenation activity for vanadia/ceria systems for the oxidation of methanol to formaldehyde using well-defined $VO_n/CeO_2(111)$ model catalysts was examined [2]. Density functional theory is applied and the energies of hydrogenation and oxygen vacancy formation also predict an enhanced reactivity of the vanadia/ceria system. At the origin of this support effect is the ability of ceria to stabilize reduced states by accommodating electrons in localized f -states.

In this stage of the project, the focus is on understanding the support effect on the ODH activity for vanadia/ceria catalysts. A well-defined $VO_n/CeO_2(111)$ model system is employed, for which the atomic surface structure has been determined [1] and the selective oxidation of methanol to formaldehyde as a prototype ODH reaction is studied. The energies for hydrogenation and oxygen vacancy formation are used as descriptors for ODH reactions. Upon H transfer from methanol (as upon other reduction reactions such as O defect forma-

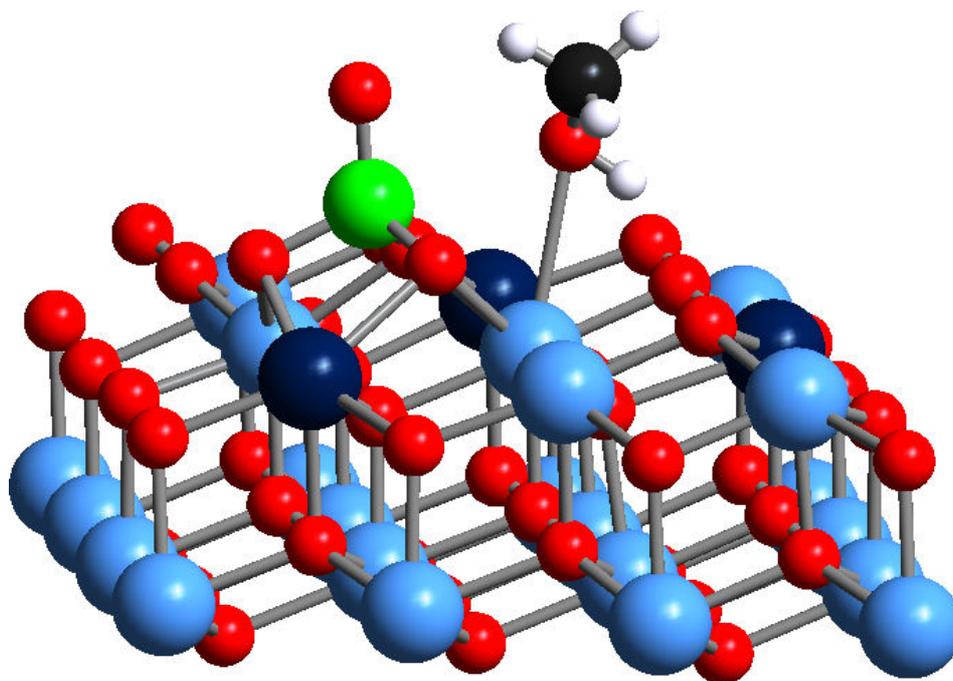


Figure 1: Ceria supported VO and CH₃OH.

tion), monomeric vanadia species remain in the +5 oxidation state, whereas Ce ions are reduced from Ce(f0)⁴⁺ to Ce(f1)³⁺. Reduction of the ceria support is the key factor determining the superior activity of ceria supported vanadia catalysts. The results obtained from DFT+*U* and hybrid approaches (HSE) show that both these methods are suitable, with the former being computationally less costly.

To this end, in this project the structure, electronic and vibrational properties and the reactivity of VO_{*n*}/CeO₂(111) model catalysts by means of DFT+*U* and hybrid functionals calculations were successfully investigated [3]. Under an oxygen ambient pressure at a given temperature thermodynamically stable monomeric and polymeric ad-species are identified.

The normal vibrational modes for the VO_{*n*} ad-species and their IR activity are described. The reactivity of these systems using reactivity descriptors, the oxygen defect formation and the hydrogenation reaction energies are evaluated. Further on the oxidation of methanol to formaldehyde, examining the role of the ceria support and the role of the VO_{*n*} structures, is investigated.

The first-principles spin-polarized calculations are performed using density functional theory with different exchange-correlation energy functionals, such as PBE corrected by the Hubbard parameter *U* (PBE+*U*) and the hybrid functional HSE. We employ the Vienna Ab-Initio Simulation Package (VASP) [4], which is one of the most efficient im-

plementations of the plane-wave based methods used for periodic solid state systems, especially for those containing *d* and *f* electrons.

More Information

1. M. Baron, H. Abbott, O. Bondarchuk, D. Stacchiola, A. Uhl, S. Shaikhutdinov, H.-J. Freund, C. Popa, M. V. Ganduglia-Pirovano, J. Sauer, 'Resolving the Atomic Structure of Vanadia Monolayer Catalysts: Monomers, Trimers and Oligomers on Ceria', *Angew. Chem. Int. Ed.*, 48, 1, 2009
2. M. V. Ganduglia-Pirovano, C. Popa, J. Sauer, H. Abbott, A. Uhl, M. Baron, D. Stacchiola, O. Bondarchuk, S. Shaikhutdinov, H.-J. Freund, 'The Role of Ceria in Oxidative Dehydrogenation on Supported Vanadia Catalysts', *J. Am. Chem. Soc.*, 132, 2345, 2010
3. C. Popa, M. V. Ganduglia-Pirovano, J. Sauer, 'Periodic density functional theory study of VO_{*n*} adsorbed on CeO₂(111) surfaces', *J. Phys. Chem. C*, 2011, *accepted*
4. <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp>

Funding

DFG Collaborative Research Centre 546 "Struktur, Dynamik und Reaktivität von Übergangsmetalloxid-Aggregaten"

Die geheimnisvollen Bewegungen der Enzyme Moleküldynamiksimulation an licht- und spannungsabhängigen Enzymen

M.A. Mroginski, S. Kaminski, T. Utesch, Institut für Chemie, Max-Volmer-Laboratorium, Technische Universität Berlin

Kurzgefasst

- Biomoleküle wie Enzyme sind keine starren Körper, sie stehen unter ständiger Bewegung.
- Die Aktivierung bzw. Deaktivierung von Enzymen erfolgt über strukturelle Änderungen, die durch große Reorientierungen von Proteindomänen oder durch geringe konformationelle Änderungen an aktiven Zentren erfolgen können.
- Zum Verständnis dieser experimentell nur äußerst schwierig zugänglichen Konformationsänderungen sind rechenintensive Moleküldynamik- (MD) und *steered* Moleküldynamiksimulationen (SMD) ein adäquates Werkzeug.
- Einen detaillierter Einblick in wichtige Enzymregionen, wie beispielsweise aktive Zentren, bieten sogenannte QM/MM Rechnungen, die eine Kombination aus MD und quantenmechanischen (QM) Simulationen darstellen.

Das Verständnis der Funktionsweise von Enzymen und deren katalytische Eigenschaften sind in vielen Forschungsfeldern, wie z. B. im medizinischen Bereich oder bei der Entwicklung von alternativen Energiequellen, von fundamentaler Bedeutung. Dazu sind neben experimentell bestimmten dreidimensionalen Strukturen auch rechenaufwendige Simulationen von großem Interesse, da strukturelle Fluktuationen von Enzymen auf atomarer Ebene experimentell nur extrem schwierig gewonnen werden können, aber einen wichtigen Teil zum Verständnis der Funktionsweise beitragen.

Moleküldynamik-(MD)-Simulationen unter Verwendung von vielen parallel genutzten CPUs bieten die Möglichkeit, Biomolekülen und deren Konformationsänderungen, die große Auswirkungen auf die Funktion des Enzyms mit sich führen können, auf einer Nanosekunden-Skala zu beschreiben. Längere Simulationen sind unter heutigen Rechenleistungen nur sehr selten umsetzbar, da die behandelten Systeme von Enzymen in Lösungsmittel Wechselwirkungen von mehreren hunderttausend Atomen beschreiben, die pro Zeitschritt von wenigen Femtosekunden berechnet werden müssen. Um Vorgänge auf längeren Zeitskalen realisieren zu können, werden *steered* Moleküldynamik (SMD) Berechnungen durchgeführt,

in denen große Molekülbewegungen mit Hilfe von externen Kräften beschleunigt werden.

Eine Kombination aus SMD- und MD-Simulationen wurde erfolgreich für die Sulfitoxidase (SO) höherer Vertebraten angewandt. Sulfitoxidasen sind wichtige Bestandteile des 'Metabolismus' schwefelhaltiger Aminosäuren und Defekte an ihnen spiegeln sich häufig in schwerwiegenden Behinderungen und Erkrankungen wieder. Während der Umwandlung von Sulfit zu Sulfat werden Elektronen vom aktiven Zentrum, dem Ort der Katalyse, zu der Cytochrom-*b5*-Untereinheit transportiert. Da einerseits der Abstand zwischen den beiden Redoxzentren in der kristallographischen Struktur sehr groß ist und andererseits andere Arbeitsgruppen experimentell sehr hohe Elektronentransferraten zwischen den Redoxzentren messen konnten, wurde vermutet, dass es zu einer erheblichen Reorientierung innerhalb der SO während der Katalyse kommen muss. Durch SMD- und MD-Simulationen wurde diese Bewegung simuliert und es konnte eine stabile Konformation des aktivierten Zustands gewonnen werden, in der Elektronentransferraten im Einklang mit experimentellen Daten berechnet werden konnten [1]. Des Weiteren soll zukünftig der Einfluss von Oberflächen, an denen die SO immobilisiert werden soll, untersucht werden, was rechenintensive Simulationen, bestehend aus Adsorptions- und Equilibrierungsphase, voraussetzt, wie sie das HLRN ermöglicht.

Ein Projekt, bei dem neben MD-Simulationen gezielt quantenmechanische Rechnungen zum Einsatz kommen, befasst sich mit Phytochromen, deren Kofaktoren durch Wechselwirkungen mit Licht in unterschiedlichen Konfigurationen vorliegen können. Hier wird keine große Reorientierung innerhalb des Enzyms wie bei der SO vermutet, sondern das Augenmerk auf Änderungen des Kofaktors gelenkt. Dabei wurde das Gesamtsystem mit MD-Simulationen dargestellt und in bestimmten Zeitintervallen Schnappschüsse des Kofaktors und dessen Umgebung extrahiert, von denen mit Hilfe von QM-Rechnungen Spektren berechnet wurden. Dadurch konnte gezeigt werden, dass die Ladungsverteilung der Kofaktorumgebung einen starken Einfluss auf die Spektren hat und bestimmte Konfigurationen weitaus günstiger sind als andere [2]. Außerdem zeigten lange MD-Simulationen von 45 ns, dass zwei unterschiedliche stabile Konfigurationen für den Kofaktor vorliegen [3].

An [NiFe]-Hydrogenasen (H_2 asen), die Wasserstoff reversibel in Protonen und Elektronen spal-

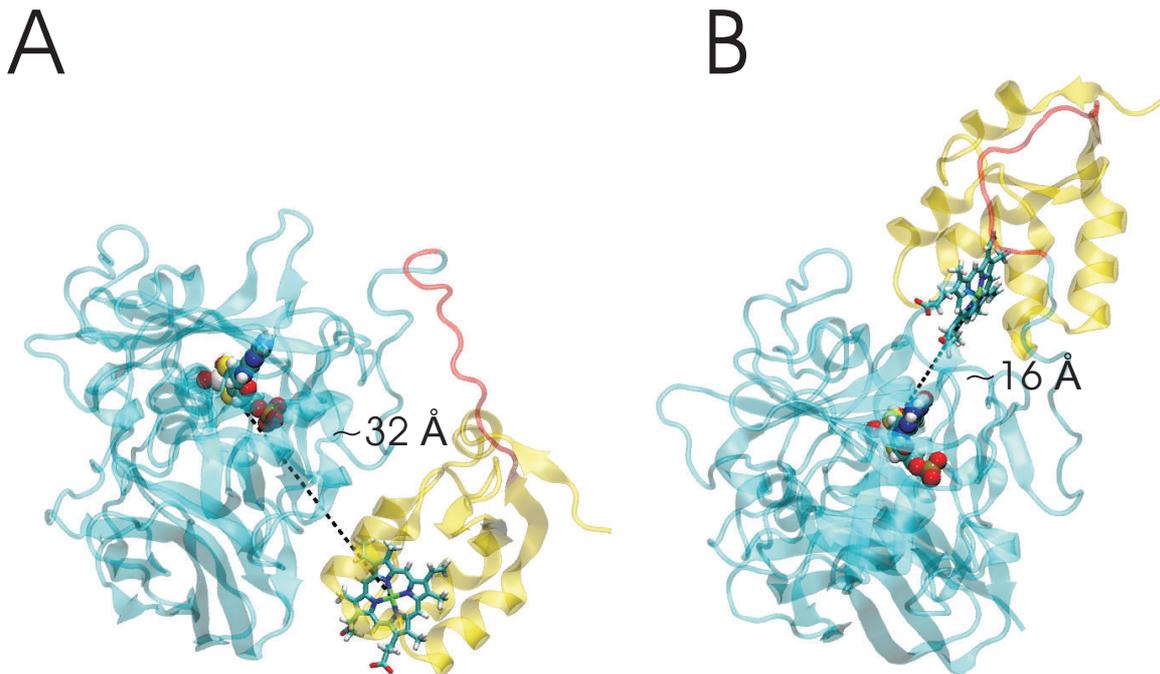


Abbildung 1: Darstellung des Sulfitoxidase-Monomers im inaktivierten (A Kristallstruktur: 1SOX) und in dem aktivierten Zustand (B). Der Abstand zwischen den Metallen der beiden Redoxzentren, die als Kugel- und Strichmodell dargestellt sind, verringert sich durch die Domänenbewegung von 32 auf 19 Å. Die Domänen sind in türkis (Hauptdomäne) und gelb (Cytochrom *b5*) dargestellt und werden durch den rot markierten, sehr flexiblen Strang verbunden, durch den die große Konformationsänderung der Cytochrom-Einheit ermöglicht wird, wobei die Hauptdomäne nur geringe strukturelle Fluktuationen durchläuft.

ten können und besonderes Interesse als alternative Energiequelle einnehmen, sollen sowohl Adsorptionsvorgänge an modifizierten Oberflächen als auch Infrarotspektren berechnet werden. Die Adsorption von H_2 asen ist von großem Interesse, da die Immobilisierung an Oberflächen sowohl die Stabilität des Enzyms als auch mögliche Reaktionen mit Interaktionspartnern stark beeinflussen kann, was zu einer Inhibition der Katalyse führen könnte. Ein weiterer wichtiger Punkt ist die unterschiedliche Sauerstofftoleranz von [NiFe]- H_2 asen. Der Kontakt der H_2 asen mit O_2 führt in einigen Spezies zu einer sofortigen Inaktivierung und in anderen zu weitaus geringeren Beeinträchtigungen in der Aktivität. Gründe für dieses Phänomen sind bisher nur teilweise erforscht, aber extrem wichtig für den industriellen Einsatz. Deshalb ist hier ein QM/MM-Ansatz zur Analyse von Mutationen ein vielversprechendes Werkzeug, um Auswirkungen auf die Konfiguration des katalytischen Zentrums zu erhalten.

Mehr zum Thema

1. T. Utesch and M.A. Mroginski: Three-Dimensional Structural Model of Chicken Liver Sulfite Oxidase in its Activated Form, *J. Phys. Chem. Lett.*, 1(23), 2159-2164, 2010
2. M.A. Mroginski et al.: Chromophore Structure of Cyanobacterial Phytochrome Cph1 in the Pr State: Reconciling Structural and Spectroscopic Data by QM/MM Calculations, *Biophys. Journal*, 96, 4153-4163, 2009
3. S. Kaminski, G. Daminelli and M.A. Mroginski: Molecular Dynamics Simulations of the Chromophore Binding Site of *Deinococcus radiodurans* Bacteriophytochrome Using New Force Field Parameters for the Phytochromobilin Chromophore, *J. Phys. Chem. B*, 113, 945-958, 2009

Förderung

DFG-Exzellenzcluster 'UniCat', DFG-Sonderforschungsbereich 498

Pack den Wasserstoff in den Tank Quanteneffekte in Lithium-basierten Wasserstoffspeicher-Materialien

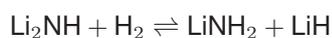
D. Sebastiani, Institut für theoretische Physik,
Freie Universität Berlin

Kurzgefasst

- Auf der Suche nach alternativen Energieträgern stellt Wasserstoff eine attraktive Möglichkeit da.
- Eines der Hauptprobleme bei Wasserstoff ist dessen Speicherung.
- Metallhydridspeicher sind eine vielversprechende Möglichkeit. Allerdings gibt es noch ungelöste technische Probleme.
- Durch quantenmechanische Simulationen soll das grundlegende Verständnis für die Vorgänge in diesen Materialien verbessert werden.
- Wir vermuten, dass Quanten-Delokalisierung der Protonen eine wichtige Rolle spielt.
- Um dies zu simulieren verwenden wir die moderne Methode der Feynman-Pfadintegrale, was nur durch den gleichzeitigen Einsatz mehrerer hundert CPU-Kerne möglich ist.

Die Klimaerwärmung sowie die Verknappung fossiler Brennstoffe haben zur Suche nach Alternativen Energieträgern geführt. Eine attraktive Möglichkeit stellt dabei Wasserstoff dar. Eines der Hauptprobleme der sogenannten Wasserstoffwirtschaft ist allerdings die Speicherung von Wasserstoffgas. Die herkömmlichen Verfahren zur Speicherung von Gasen in Druckbehältern gestalteten sich bei Wasserstoff schwierig. Aufgrund seiner geringen Teilchendichte lassen sich nur niedrige volumenbezogene Energiedichten erreichen. Dies bedeutet, dass ein extrem hoher Druck aufgewendet werden müsste. Dies führt aber wiederum auf weitere technische Probleme.

Ein vielversprechender Alternativansatz ist durch die Metallhydridspeicher gegeben. Dabei wird der Wasserstoff in den Lücken eines Metallgitters eingelagert und durch Erwärmung des Speichers wieder abgegeben. Eine sehr attraktive Materialklasse sind die besonders leichten Amide und Imide von Alkalimetallen. Diese Materialien sind in der Lage, Wasserstoff aufzunehmen und wieder abzugeben. Dieser Vorgang ist über Temperatur und Druck kontrollierbar. Die Speicherung geschieht reversibel mittels folgender chemischer Reaktion:



In diesem Material erreicht man über diese Reaktion eine sehr hohe Speicherdichte von 10% wt.

(Gewichtsprozent), siehe [1].

Leider existieren bei diesen Wasserstoffspeichern immer noch technische Probleme bei der Freigabereaktion. Um diese Schwierigkeiten zu bewältigen, wurden bereits viele Simulationen und experimentelle Untersuchungen unternommen.

Trotz dieser Anstrengungen sind selbst einfache Fragen wie zum Beispiel nach der statischen Struktur des Materials noch nicht abschließend geklärt. Basierend auf unserer bisherigen Forschung vermuten wir, dass die Protonen bei Li_2NH delokalisieren. Delokalisierung ist ein Quanteneffekt und bedeutet anschaulich, dass sich ein Teilchen an mehreren Orten gleichzeitig aufhält. Diese Quanteneffekte können insbesondere auch die Diffusionsprozesse von Wasserstoffatomen durch den Kristall erheblich beeinflussen. Diese Diffusion ist unbedingt erforderlich, damit die zu speichernden H_2 -Gasmoleküle ihre Zielorte erreichen, an denen die Speicherreaktion stattfindet. Das Ziel unseres Projekts ist es daher, insbesondere die dynamischen Eigenschaften der Protonen in Li_2NH besser zu verstehen.

Mathematisch werden quantenmechanische Systeme durch eine Wellenfunktion beschrieben. Die Wellenfunktion erhält man durch Lösen der Schrödingergleichung. Allerdings wächst der Aufwand für das Lösen der Schrödingergleichung exponentiell mit der Anzahl der Teilchen im System. Daher sind eine Reihe von Näherungen notwendig, um eine numerische Lösung mit vertretbarem Aufwand berechnen zu können.

Für unser Projekt verwenden wir dazu das sehr effiziente Elektronenstrukturprogramm CPMD. Eine wichtige Näherung bei Elektronenstrukturprogrammen ist es, die Kerne nur als klassische Teilchen zu simulieren. Da wir aber eine Quantendelokalisierung der Protonen vermuten, bedienen wir uns außerdem der Methode der Feynman-Pfadintegrale. Diese Methode ermöglicht uns, neben den Elektronen auch die Protonen als quantenmechanische Objekte zu simulieren. Trotz der verwendeten Näherungen und ausgefeilten Algorithmen bleiben diese Rechnungen sehr aufwendig und erfordern daher den gleichzeitigen Einsatz mehrerer hundert CPU-Kerne.

In unseren bisherigen Untersuchungen haben wir uns auf die statische Struktur von Li_2NH konzentriert [2] [3]. Abbildung 1 zeigt die berechneten Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für die Atomkerne. Insbesondere Lithiumatome erscheinen mobiler und ungeordneter als Röntgenexperimente vermuten ließen. Dieses Ergebnis ist konsistent mit

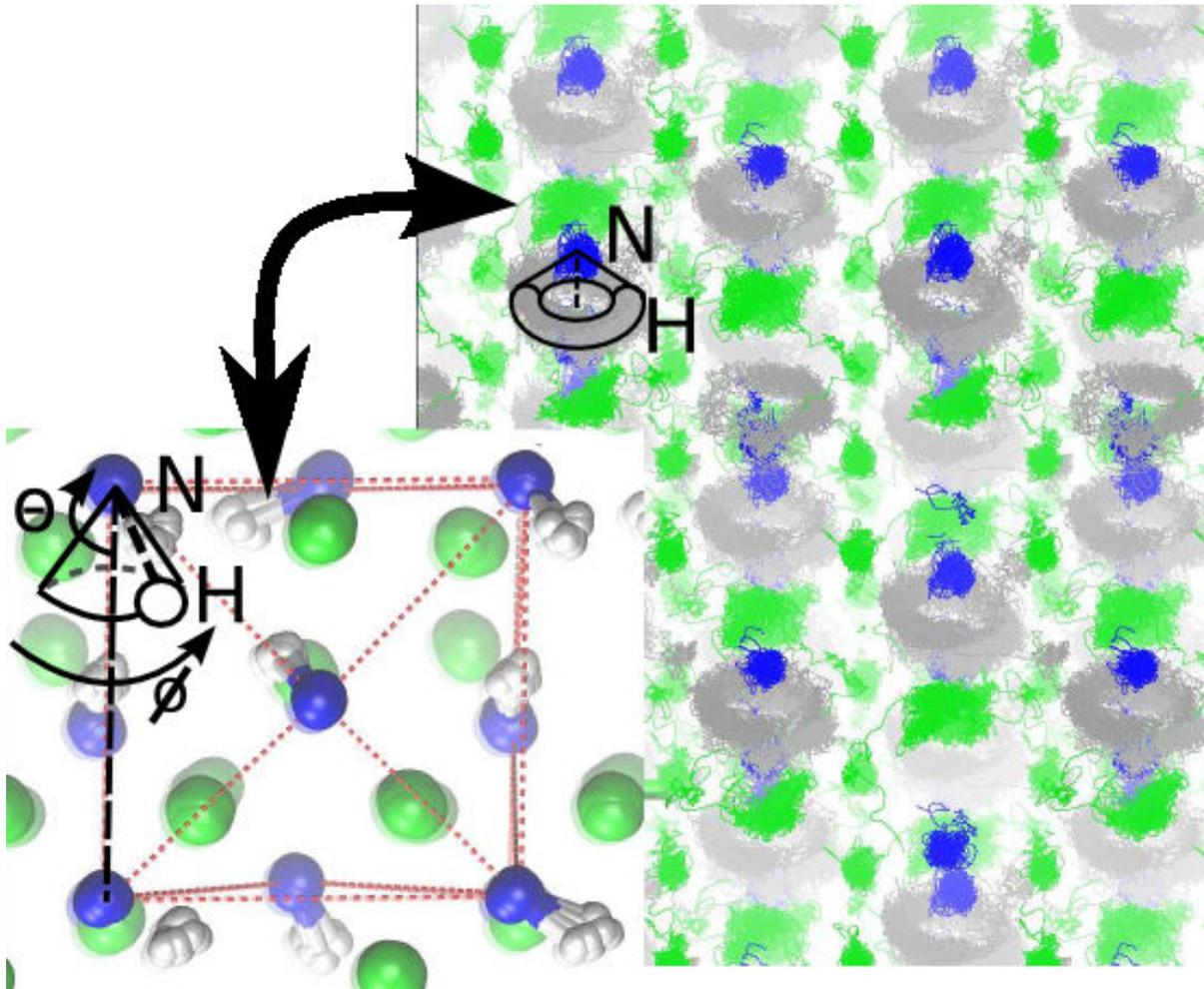


Abbildung 1: Mittels Pfadintegralen berechnete Aufenthaltswahrscheinlichkeit einzelner Atome im Li_2NH Kristall. (blau: Stickstoff, grün: Lithium, grau: Wasserstoff)

der experimentell beobachteten hohen Diffusionskonstante. Desweiteren ist erkennbar, dass die Orientierung der NH-Bindung relativ zum Stickstoffgitter 30 Grad beträgt und um die NN-Achse präzisiert. Die zudem aus den Simulationen abgeleiteten NMR-Parameter passen ebenfalls sehr gut zu experimentellen Messungen. Dies alles illustriert die ungewöhnliche chemische Umgebung des Wasserstoffatoms in diesem System. Gleichzeitig wird die Notwendigkeit für die rechenintensiven quantenmechanischen Simulation klar.

Zur Zeit gehen wir mit unseren Simulationen noch grundlegenden Fragestellungen nach. Auch müssen die verwendeten Simulationsmethoden noch weiter erprobt werden. Trotzdem sind wir zuversichtlich, durch unsere Forschung zum Verständnis von Li_2NH und zur Lösung technischer Problem der Wasserstoffspeicherung beizutragen.

Mehr zum Thema

1. W. I. F. David et al., J. Am. Chem. Soc. 129, 1594 (2007). A Mechanism for Non-stoichiometry in the Lithium Amide/Lithium Imide Hydrogen Storage Reaction.
2. G. A. Ludueña and D. Sebastiani, J. Phys. Chem. Lett., DOI: 10.1021/jz1012388 (2010). Possibility of Coherent Delocalized Nuclear Quantum States of Protons in Li_2NH
3. G.A. Ludueña, M. Wegner, L. Bjaalie and D. Sebastiani: Local disorder in hydrogen storage compounds – the case of lithium amide/imide ChemPhysChem 11, 2353-2360 (2010)

Förderung

Freie Universität Berlin

Oberflächen von Nanokristalliten

Theoretische Untersuchung von MgF_2 -Oberflächen

C. Müller, B. Paulus, Institut für Chemie und Biochemie, Freie Universität Berlin

Kurzgefasst

- MgF_2 -Nanopartikel spielen eine wichtige Rolle als Katalysatoren in modernen Synthesemethoden.
- Ihre katalytischen Eigenschaften hängen ganz wesentlich mit ihrer Struktur zusammen.
- Die Struktur wiederum wird durch Bedingungen bei der Herstellung der Nanopartikel beeinflusst.
- Mit quantenchemischen Methoden lässt sich der Zusammenhang zwischen Reaktionsbedingungen und Struktur aufklären.
- Optimale Synthesebedingungen sind vorhersagbar.

Magnesiumfluorid (MgF_2) zeigt besondere Eigenschaften, die es für verschiedene technische Anwendungen interessant machen. Als sehr dünne Schicht aufgetragen, eignet es sich zur Entspiegelung von optischen Linsen wie Brillengläsern oder Linsen in Kameraobjektiven und Ferngläsern. Im Gemisch mit Magnesiumoxid (MgO) oder anderen Metallfluoriden katalysiert es eine Vielzahl chemischer Reaktionen, indem es sie beschleunigt, ihre Ausbeute erhöht oder den Ausgang der Reaktion so beeinflusst, dass hauptsächlich eine ganz bestimmte Verbindung gebildet wird. So wurden MgF_2 -Katalysatoren in der Vergangenheit zum Beispiel für die Synthese von α -Tocopherol (Vitamin E) eingesetzt.

Für jede dieser Anwendungen muss das Magnesiumfluorid auf eine andere Art und Weise hergestellt werden. Eine neue Art der Herstellung ist die so genannte *sol-gel*-Synthese. Hierbei wird zunächst eine andere Magnesiumverbindung in einer Alkohollösung gelöst und mit Fluorwasserstoffsäure (HF) versetzt. So entstehen zunächst sehr kleine Magnesiumfluoridteilchen (Nanopartikel), die in der Alkohollösung weiter wachsen zu Mikrokristalliten (diese Lösung wird auch Sole genannt), und sich schließlich miteinander zu mehr oder weniger geordneten Netzwerken zusammenschließen (Gel). Wird nun der Alkohol unter hohem Druck und hoher Temperatur verdampft, bleibt das Netzwerk der Magnesiumfluoridteilchen erhalten, und es bildet sich ein hochporöser Festkörper mit einer sehr großen Oberfläche ähnlich einem Schwamm. Wichtig für die spätere Katalyse ist, wie genau sich die Alkohollösung zusammensetzt, und insbeson-

dere wieviel Wasser sie enthält. Sind Spuren von Wasser enthalten, so bilden sich auf den Oberflächen in den Poren den "Schwamm" Hydroxidgruppen (OH^-), die für die Verwendung von MgF_2 als Katalysator wichtig sind [1].

In unserem Projekt wollen wir untersuchen, wie die Magnesiumfluoridteilchen genau aussehen, aus denen sich hochporöses MgF_2 zusammensetzt. Dazu kombinieren wir eine sehr alte Methode, die sogenannte Wulff-Konstruktion [2], benannt nach dem russischen Kristallographen George Yuri Victorovich Wulff (1863-1925) mit Methoden der Statistischen Thermodynamik die erst seit Ende der 90er Jahre zur Aufklärung von Oberflächenstrukturen unter realen Bedingungen verwendet wird. Mit Hilfe der Wulff-Konstruktion lässt sich die Struktur von Kristallen anhand der Oberflächenenergien für verschiedene Oberflächen im Kristall simulieren. Je nachdem wie man einen Kristall zerschneidet, werden einmal mehr einmal weniger Bindungen zwischen Atomen getrennt. Dadurch kann die Arbeit, die zur Schaffung einer Oberfläche nötig ist, unterschiedlich hoch sein. Je höher diese Arbeit ist, umso weniger stabil ist die entsprechende Oberfläche. Im Bestreben, diese instabilen Oberflächen zu vermeiden, wird ein Kristall eine Form wählen, in der diese Oberflächen nur zu einem kleinen Teil vorkommen, und genau diese energetisch niedrigste Struktur erhält man auch als Ergebnis der Wulff-Konstruktion.

Oberflächenenergien können schon seit langem theoretisch berechnet werden. Dazu sind pro Oberfläche nur zwei Rechnungen nötig, eine für eine 2-dimensionale Oberfläche und eine für einen 3-dimensionalen Kristall. Selbst bei schlechter Übereinstimmung der absoluten Energien mit den tatsächlichen Werten kann der relative Wert der Oberflächenenergien sehr genau erhalten werden. Neu ist der Ansatz, Bedingungen bei der Herstellung der Mikrokristallite mit in die Berechnung der Oberflächenenergien einzubeziehen. In unserem Fall ist von Interesse, wie sich unterschiedliche Konzentrationen von Wasser und Fluorwasserstoffsäure (HF) auf die Stabilität einzelner Oberflächen auswirken. Von einer Untersuchung mit Aluminiumfluorid (AlF_3) ist bekannt, dass bei hohen Konzentrationen von HF zusätzliche Fluoratome auf der Oberfläche gebunden sind, während bei hohen Konzentrationen von Wasser Fluoratome auf der Oberfläche durch Hydroxidgruppen (OH^-) ersetzt werden [3]. Dies führt dazu, dass sich erstens die relative Stabilität der unterschiedlichen Oberflächen verändert, was wiederum zu anderen For-

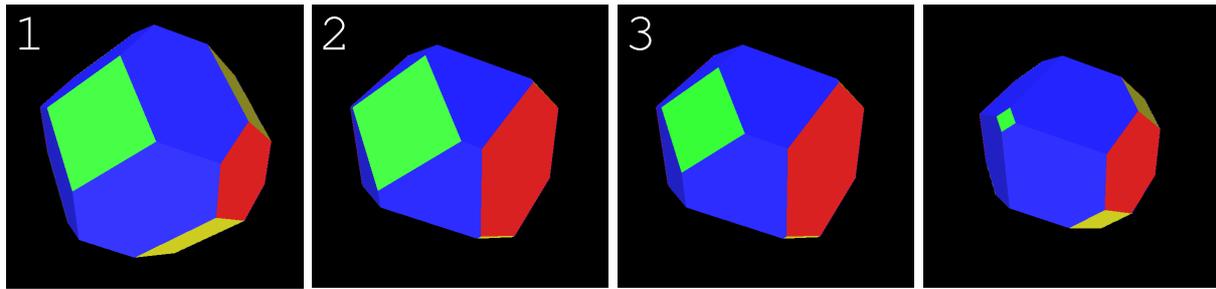


Abbildung 1: Vier verschiedene Ergebnisse einer Wulff-Konstruktion für einen MgF_2 Kristall (Rutilstruktur) im Vakuum. Das Verhältniss der Oberflächenenergien zueinander ist wie folgt: 1) Alle Oberflächenenergien sind gleich. 2) Die Oberflächenenergie roter Flächen sinkt (wird stabiler) um 30%. 3) Die Oberflächenenergie grüner Flächen steigt (wird instabiler) um 10%. 4) Die Oberflächenenergien gelber und blauer Flächen sinkt um 20%. Der Fall ganz rechts stimmt am besten mit der Realität überein.

men der Kristallite führt, und dass sich zweitens die Anzahl der Gruppen auf der Oberfläche, die für die Katalyse zuständig sind, ändert.

Um nun die Strukturen der MgF_2 Oberflächen bei unterschiedlichen Konzentrationen von Wasser und Flusssäure (HF) vorherzusagen, ist eine Vielzahl von Berechnung nötig. Bei einer sehr geringen Konzentration an HF, fehlen einzelne Fluoratome auf der Oberfläche, und bei einer sehr hohen Konzentration binden zusätzliche Fluoratome an die Oberfläche. Außerdem können sich einzelne HF-Moleküle an die Oberfläche anlagern, ohne gespalten zu werden. Analog führt eine hohe Konzentration von Wasser dazu, dass Fluoratome in der Oberfläche durch Hydroxidgruppen (OH) ausgetauscht werden, zusätzlich OH-Gruppen an die Oberfläche binden oder sich Wassermoleküle an die Oberfläche anlagern. Um auch alle Kombinationen dieser Prozesse zu berücksichtigen, sind insgesamt etwa 250 verschiedene Oberflächenstrukturen denkbar. Da MgF_2 in zwei verschiedenen Modifikationen kristallisieren kann, die jeweils fünf verschiedene Oberflächen haben, sind somit etwa 2500 Systeme zu untersuchen. Da für jedes System noch eine Vielzahl von verschiedenen Strukturen denkbar ist, aber die jeweils energetisch niedrigste gefunden werden muss, ist die Anzahl benötigter Rechnungen mindestens dreimal höher. Diese große Zahl an Rechnungen lässt sich nur bewältigen, wenn eine große Zahl an Prozessoren gleichzeitig zur Verfügung steht.

Sind all diese Rechnungen bewältigt und ausgewertet, können binnen kürzester Zeit für beliebige Temperaturen und Konzentrationen von Wasser und Flusssäure die jeweils stabilsten Oberflächenstrukturen bestimmt werden. Mit Hilfe der Wulff-Konstruktion sind dann Simulationen der Kristalle wie in Abbildung 1 möglich. Solche Simulationen erfüllen zwei Aufgaben. Zum einen las-

sen sich damit experimentelle Ergebnisse verifizieren. Zum anderen können Vorhersage getroffen werden. Die "Reaktionsbedingungen" lassen sich am Computer wesentlich schneller variieren als in jedem Labor, in dem dann nur noch Materialien mit solchen Kristalliten synthetisiert werden, die als besonders wichtig für die jeweilige Anwendung gelten. Unnötige Experimente werden vermieden, Zeit und Geld gespart.

Mehr zum Thema

1. S. Wuttke, G. Scholz, S. Rüdiger und E. Kemnitz, *Journal of Materials Chemistry*, 17 (2007) S. 4980-4988.
2. G. Wulff, *Zeitschrift für Kristallographie und Mineralogie*, 34 (1901) S. 449-530.
3. C. L. Bailey, S. Mukhopadhyay, A. Wander, B. G. Searle und N. M. Harrison, *Journal of Physical Chemistry C*, 113 (2009) S. 4976-4983.

Förderung

DFG-Graduiertenkolleg 1582/1 "Fluor als Schlüsselement"; Zentraleinrichtung für Datenverarbeitung der FU Berlin

Molecular Modeling and Simulation in Catalysis

Redox-Active MOF-5 Isotypes: Novel Entatic State Catalysts?

A. Mavrantakis, J. Sauer, Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin

Abstract

- Metal-organic frameworks (MOFs) containing transition metal ions are of great interest due to their intriguing 3D topologies, magnetic properties and potential applications in gas storage/separation or catalysis.
- Activation of molecular oxygen with transition metal compounds is of significant importance, because the metal - dioxygen adducts are important intermediates in oxidation reactions, without the need of using other oxidants. Furthermore, reversible binding of molecular oxygen to transition metal centers can be a key point in the separation of O₂ from air for industrial applications.
- In the present project, the structural properties of a cobalt(II) MOF are studied by ab-initio calculations. The Co-MOF (denoted as MFU-1) is composed of tetranuclear Co₄O cores bridged with bis-pyrazole type ligands.[1] The local conformation of the pyrazole rings around the Co₄O core is studied by periodic DFT calculations.
- The formation of various cobalt - dioxygen complexes within the MFU-1 is also investigated. The formation energy is compared to the experimental O₂ adsorption enthalpy. The calculations were carried out using the PBE functional employing the VASP program package. Due to the big system size (more than 110 atoms in the unit cell), the use of a large number of processors and faster communication between the processors on HLRN was highly required.

Metal-organic frameworks (MOFs) consisting of transition metal ions and organic ligands are of great technological interest due to their intriguing 3D topologies, magnetic properties and potential applications in different areas including gas storage/separation and catalysis. Recently, a MOF containing cobalt(II) atoms (MFU-1) was synthesized.[1] MFU-1 is showing interesting structural, catalytical and O₂ adsorption properties.[2] It is composed of tetranuclear Co₄O cores bridged with bis-pyrazole type organic molecules, which are linked into a 3D periodic network. The activation of molecular oxygen with MFU-1 was also studied, as it is of significant importance for Green Chemistry applications. It was reported that activation of molecular oxygen by

MFU-1 is successful by using a co-catalyst, thus serving as electron-transfer mediator. In this way, the use of additional solvent is avoided and the amount of waste is reduced.

DFT calculations were performed in order to study these properties. The gradient corrected Perdew-Burke-Ernzerhofer functional augmented with a semi-empirical correction for the dispersion interactions following the Grimme scheme (PBE+D), as implemented in the VASP program package, was used.[3]

The crystal structure of the MFU-1 was solved in the P $\bar{4}$ 3m space group. In this chosen space group, the phenylene moieties of the bridging pyrazole ligands occupy two alternative (symmetry equivalent) positions with 50% probability each. The crystallographic data showed a large residual electron density in the void regions of the crystal lattice, which can be attributed to the chiral distortion of the {Co₄O(3,5-dimethyl-pyrazol)₆} secondary building units. This distortion causes the reduction of the local symmetry of the {Co₄O(3,5-dmpz)₆} from T_d to T. This local symmetry reduction can be explained by a non-zero value of the Co-N-N-Co torsion.

The calculations show that the conformation of the pyrazole rings around the Co₄O core is flexible. The potential energy surface for the Co-N-N-Co torsion is very flat and several minima, which differ by less than 0.4 kJ/mol, have been located by the DFT calculations. Several initial conformations were tried as input structures, with the corresponding torsion ranging from 0 to 14 degrees. In these minima, no structure of T_d symmetry was obtained and the dihedral angle varies between 3 and 7.2 degrees. This suggests that even at temperatures around 100 K, MFU-1 can take various possible conformations and the torsion angle cannot be determined within the range of 3 and 7.2 degrees. The flatness of the potential explains the observed elongation of the thermal ellipsoid in the single crystal X-ray structure analysis.

A dioxygen molecule can be bound in several ways in a metal complex: by forming one or two bonds with the metal atom, thus creating a superoxo or peroxo species, respectively. A third way is the formation of a van der Waals complex, in which no electron pair bond is formed between metal and oxygen. Several initial configurations and spin states were taken into account for the present study of the dioxygen adsorption on MFU-1. Among them, a van der Waals and a η²-Superoxo complex show the largest forma-

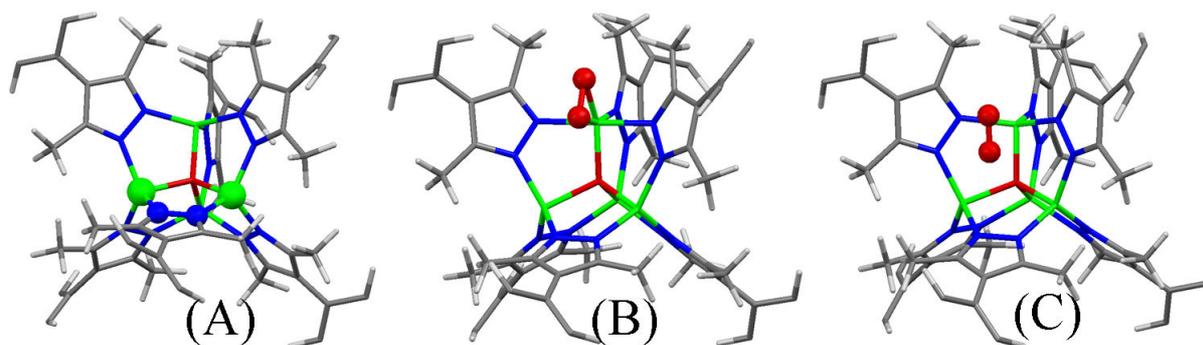


Figure 1: (A) MFU-1 (the Co and N atoms that define the above mentioned Co-N-N-Co dihedral angle are shown as ball and stick model), (B) η^2 -Superoxo and (C) vdW complex of MFU-1 with O₂. (The adsorbed dioxygen is shown as ball and stick model)

tion energy. Their computed adsorption enthalpies at room temperature from PBE+D are -7.7 and -52.7 kJ/mol respectively, whereas the experimental value is -11.1 kJ/mol. Although the η^2 -Superoxo complex has the largest adsorption enthalpy, the experimental observations below 120 °C suggest that only the van der Waals complex is observed, because no additional peaks due to the superoxo complex around 1100 cm⁻¹ appear in the IR spectrum. This implies that the formation of the η^2 -superoxo-Co(III) complex is prevented by an energy barrier.

The reactions of the dioxygen with the cobalt atoms of the MFU-1 are complicated and create products of different spin multiplicity. The reactions can be either exothermic or endothermic. However, this does not explain how fast these Co-dioxygen complexes are formed or if they are blocked by a barrier. The height of this point with respect to the initial state determines how fast the product is formed. In order to estimate the crossing point between the two surfaces, the method developed by Harvey and co-workers is employed.[4] The minimum energy crossing point is calculated 44.4 kJ/mol above the reactant. The height of the barrier at 44.4 kJ/mol provides a possible explanation why no superoxo species is formed below 120 °C, whereas at elevated temperatures O₂ reacts and starts decomposing MFU-1.

More Information

1. M. Tonigold, Y. Lu, B. Bredenkotter, B. Rieger, S. Bahnmueller, J. Hitzbleck, G. Langstein and D. Volkmer, *Angew. Chem. Int. Ed.* 2009, 48, 7546-7550.
2. M. Tonigold, Y. Lu, A. Mavrandonakis, A. Puls, R. Staudt, V. Hagen, J. Mollmer, J. Sauer and D. Volkmer, *Chem. Eur. J.* 2010, accepted.
3. T. Kerber, M. Sierka and J. Sauer, *J. Comput. Chem.* 2008, 29, 2088-2097.
4. J.N. Harvey, M. Aschi, H. Schwarz and W. Koch, *Theor. Chem. Acc.* 1998, 99, 95-99.

Funding

DFG Priority Programme 1362

Molecular Modeling and Simulation in Catalysis

Selective oxidation of propane by vanadium oxide sites supported on silica

J.W. Liu, F. Mohamed, J. Sauer, Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin

Abstract

- Oxidative dehydrogenation (ODH) of propane is a potential solution to produce propene, to feed faster-increasing demand industrially, while the coexistence of propane and O₂ leads to undesired combustion reactions. It is essential to understand the underlying mechanisms of the ODH process to improve the efficiency of the catalyst and to decrease the amount of by-products CO/CO₂.
- The ODH reactions, modeled with vanadyl and peroxovanadate, are studied using the quantum chemistry program package Turbomole. Subsequently, they are re-examined by meta-dynamics (MTD) simulations to explore favorable reaction channels and to discover unexpected paths. With multiple walker implementations in CP2K, it is very efficient to run MTD simulation on supercomputers such as HLRN.
- The main catalytic cycle of propene oxidation is activated by vanadyl, reducing vanadium from its oxidation state V to III. The re-oxidation of V(III) to V(V) generates the main catalyst peroxovanadate, which facilitates the oxidation of propene to the main product acrolein, via the intermediate propene oxide, with the recovery of V(III).
- With the formation of the main product acrolein, the main by-product acetone is also formed, which could decompose to formaldehyde together with aldehyde or acetic acid. The further oxidation of formaldehyde could lead to the formation of CO/CO₂ with very lower barrier.

With the development of modern chemical industry, the demand for olefins, such as ethylene and propene, is expected to increase significantly in the near future. [1] Present main sources of olefins are not enough to meet the increasing demands. Selective oxidation reactions are a potential solution, which functionalize low molecular weight paraffin with oxidative dehydrogenation (ODH) to produce olefins instead of other more expensive materials. The main challenge for the ODH process is that the coexistence of ethane/propane and O₂ leads to undesired combustion reactions, which will generate by-products CO/CO₂. It is essential to understand the underlying mechanisms of the ODH process. However, nowadays we are far away from com-

plete and thorough understanding of the oxidative dehydrogenation mechanisms. In this project we will uncover the detailed mechanism of selective oxidation of propane by vanadium oxide sites supported on silica, as an extension of previous work. [2] Special attention will be paid to the selectivity problems by considering steps that lead to CO and CO₂ formation.

Vanadyl and peroxovanadate substituted silsesquioxane are used to model the reactions. Density functional theory (DFT) with the hybrid functional B3LYP as implemented in Turbomole are employed, and triple- ζ plus polarization (TZVP) basis sets are applied on all atoms. Broken-symmetry calculation are performed for the open-shell singlets. The energies of singlets are obtained by spin projection from the energies of the broken-symmetry solution and the triplet solution for a given geometric structure. A damped dispersion term as parametrized sum over atom pair C6 contributions to DFT results, denoted DFT+D, is added to correct the long-range dispersion interactions. All the reactions are re-examined by meta-dynamics simulations to explore favorable reaction channels and to discover unexpected reaction paths.

To simplify the sophisticated reaction system, the oxidation of propene is divided into several successive steps : 1) Activation of propene to produce propyne, allylic alcohol, acrolein, propylaldehyde, propylene and acetone, propene oxide. 2) Further oxidation of propene oxide, allylic alcohol, acrolein, propylaldehyde, acrolein 3) Further oxidation of C2 species, such as acetic acid and aldehyde. 4) Further oxidation of C1 species, such as formaldehyde.

From the chemical point of view, propene is constituted by C-H and C-C bonds, which can be divided into four categories: C(SP³)-H, C(SP²)-H, C=C and C-C bonds. Activation of these bonds by vanadyl and peroxovanadate could generate propyne, allylic alcohol, propylaldehyde, acetone and propene oxide, among which the most favorable path is the formation of propene oxide. And propene oxide could be further oxidized to form acrolein, acetone or propylaldehyde. Among the complicated reaction systems, a catalytic cycle is mapped out: the ODH reaction is activated by vanadyl V(V) first by reducing V(V) to V(III), which form propyne, allylic alcohol, acrolein, propylaldehyde, propylene or acetone. Then the re-oxidation of V(III) to V(V) generate the main catalyst peroxovanadate, which is so active that it could

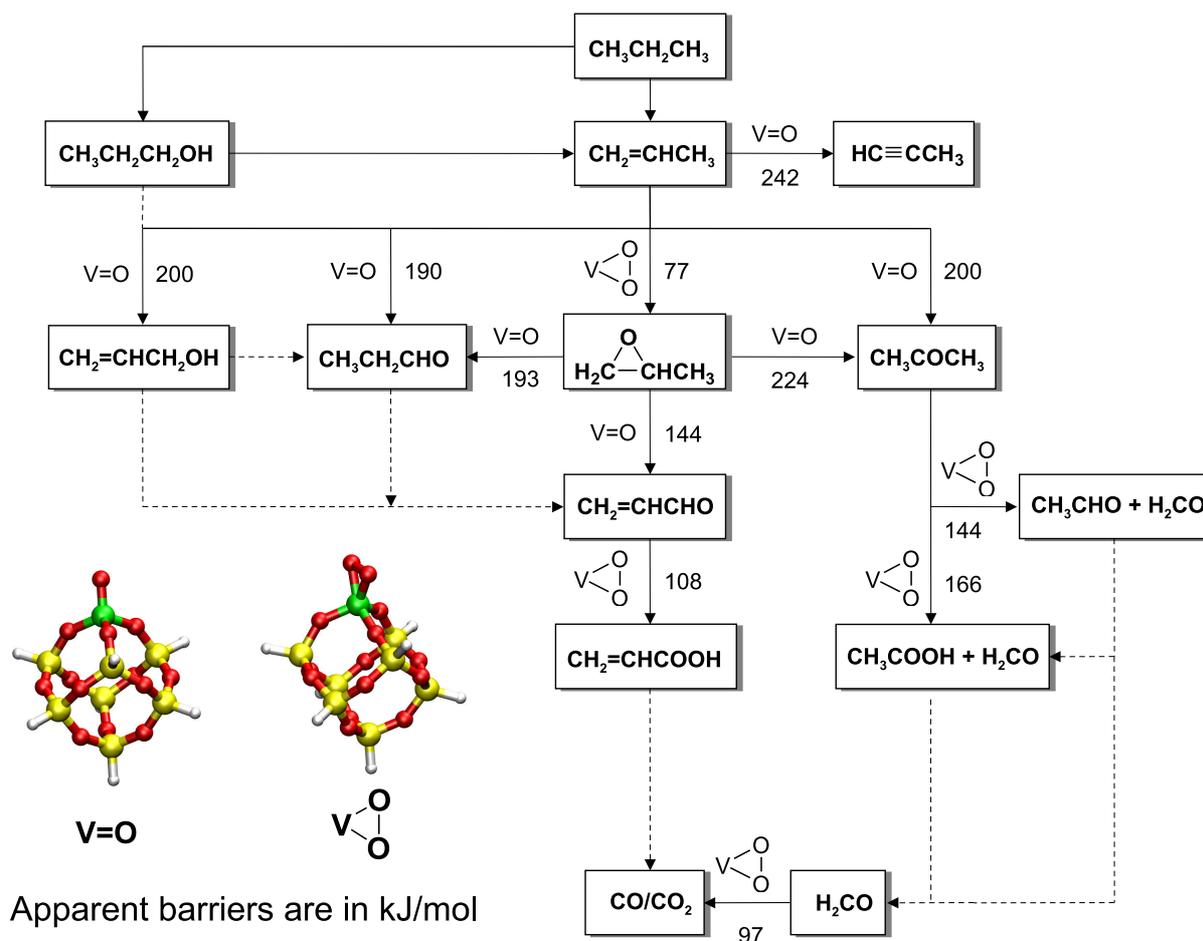


Figure 1: Reaction mechanisms for the oxidative dehydrogenation of propane

easily react with propene to produce acrolein via intermediate propene oxide, meanwhile V(V) is reduced to V(III) to form a catalytic cycle. Calculations indicate that the bridged oxygen (V-O-Si) is almost as active as a vanadyl group. The further oxidation of acrolein is to form acrylic acid with low energy barrier.

As the main by-product, acetone could be further decomposed to C2 species (aldehyde or acetic acid) and C1 species (formaldehyde). Formaldehyde could be easily oxidized to CO/CO₂. The results are comparable to the experimental observation. [3]

The further oxidation of allylic alcohol, propylaldehyde, aldehyde and acetic acid are still ongoing, which are shown as dashed lines in Figure 1.

More Information

1. F. Cavani, N. Ballarini, A. Cericola, *Catal. Today* 2007, 127, 113.
2. (a) X. Rozanska and J. Sauer, *Inter. J. of Quantum Chem.* 2008, 108, 2223. (b) X. Rozanska, E. V. Kondratenko and J. Sauer, *J. Catal.* 2008, 256, 84. (c) X. Rozanska, R. Fortrie and J. Sauer, *J. Phys. Chem. C* 2007, 111, 6041.
3. (a) C. Zhao, I.E. Wachs, *J. Catal.* 257 (2008)181. (b) C. Hess, R. Schlögl et al, *Chem. Commun.*, 2006, 451.

Funding

DFG Priority Programme 546 (Struktur und Reaktivität unterschiedlicher Übergangsmetalloxid-Aggregate mit quantenchemischen Methoden)

Molecular Modeling and Simulation in Catalysis

The interaction of Au with γ -Al₂O₃ surfaces

G. Feng, M. V. Ganduglia-Pirovano, J. Sauer, Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin

Abstract

- Metallic gold has long been regarded as a poorly active catalyst. However, as was discovered by Haruta et al., oxide supported gold nano-clusters show activities for many reactions at low temperatures. It has been reported that Au/alumina has high activities for CO oxidation, NO reduction with hydrocarbons on the presence of O₂ and H₂O, and olefins hydrogenation.
- The catalytic properties of nano-structured gold catalyst on alumina, owing to the nano-size effect and the support effect, are not well understood on the atomic scale.
- The studies of well defined model systems of increasing complexity, both experimentally and theoretically, are of importance for analyzing the factors influencing the reactivity of the active phase. Studies of the adsorption of individual Au atoms on a thin alumina film on NiAl have been reported in our previous works.
- In the present project, we use alumina surfaces to create theoretical models of alumina supported Au clusters and compare with our previous work on Cu/alumina. The calculations were carried out using density functional theory with the PW91 functional and a supercell approach as implemented in VASP. The typical system size to be considered within this project contains 80-180 atoms. The use of a large number of processors and faster communication between the processors on HLRN is highly required.

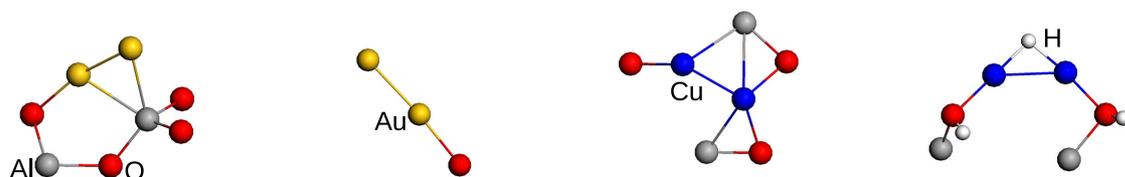
Metallic gold has long been regarded as a poorly active catalyst. However, as was discovered in 1987 by Haruta et al., oxide supported Au nanoparticles show a surprisingly high catalytic activity for the oxidation of CO at ambient temperature. It has been found that oxide supported gold nano-clusters show activities for many reactions at low temperatures. It has been reported that Au/Al₂O₃ has high activities for CO oxidation, NO reduction with hydrocarbons on the presence of O₂ and H₂O, and olefins hydrogenation. The catalytic properties of nano-structured gold catalyst on Al₂O₃, owing to the nano-size effect and the support effect, are not well understood. This is particularly due to the lack of knowledge on the complex catalyst structure on the atomic scale.[1] The studies of well de-

defined model systems of increasing complexity, both experimentally and theoretically, are of importance for analyzing the factors influencing the reactivity of the active phase. Studies of the adsorption of individual Au atoms on a thin Al₂O₃ film on NiAl have been reported. The experimental model of an Al₂O₃ support is two atomic layers thick and has been extensively studied. The charged nature of self-assembly Au chains on the alumina thin film has been demonstrated based on scanning tunnelling microscopy and spectroscopy combined with density functional theory calculations.[2]

In the present project, we use γ -Al₂O₃ surfaces to create theoretical models of Al₂O₃ supported Au clusters and compare with our previous work on Cu/ γ -Al₂O₃. [3] The objective is to elucidate the growth mode of Au clusters on the clean and hydroxylated γ -Al₂O₃ surfaces. The calculations were carried out using density functional theory with the PW91 functional and a supercell approach, with Digne's γ -Al₂O₃ surface models.[4]

In order to find the most stable adsorption structures, we tried the adsorption of Au clusters on both the perfect and the reconstructed clean γ -Al₂O₃ surfaces. For the hydroxylated surface, we tried the pure adsorption and the spillover reaction, which involves the Au clusters on the surface inserting into the surface hydroxyl O-H bonds. Our results show that the adsorption of Au on the perfect surface is stronger than on the reconstructed surface. On the hydroxylated surface, the spillover reaction is not as favored as the pure adsorption. In addition, Au_n interact with the clean surface stronger than with the hydroxylated surface. Compared with the Cu/ γ -Al₂O₃ system, the adsorption of Au_n clusters is weaker than that of Cu_n on the clean surface, indicating a weaker interaction between Au and the surface. On the hydroxylated surface, Cu can insert into surface O-H bonds and promote hydrogen spillover. In particular, desorption of H₂ from Cu₁ and Cu₃ clusters is exoenergetic. However, neither hydrogen spillover nor H₂ desorption are energetically favorable for Au_n clusters.

For discussing the growth (Au_{n-1} + Au → Au_n) and aggregation (n Au → Au_n) of Au on the surface, the growth and aggregation energies were defined as: $E_{growth}(n/n-1) = E_{surf}(n) - E_{surf}(n-1) - E_{surf}(1)$ and $E_{agg}(n) = E_{surf}(n) + (n-1)E_{surf}(0) - nE_{surf}(1)$, respectively. $E_{surf}(n)$ and $E_{surf}(0)$ are the total energies of a γ -Al₂O₃ surface cell with an Au_n and of the Au free surface cell, respectively. The larger $E_{growth}(n/n-1)$ and $E_{agg}(n)$ indicates the stronger ability of Au_{n-1} cluster to get one more Au atom



Local structures for Au₂ and Cu₂ on clean and hydroxylated alumina surfaces

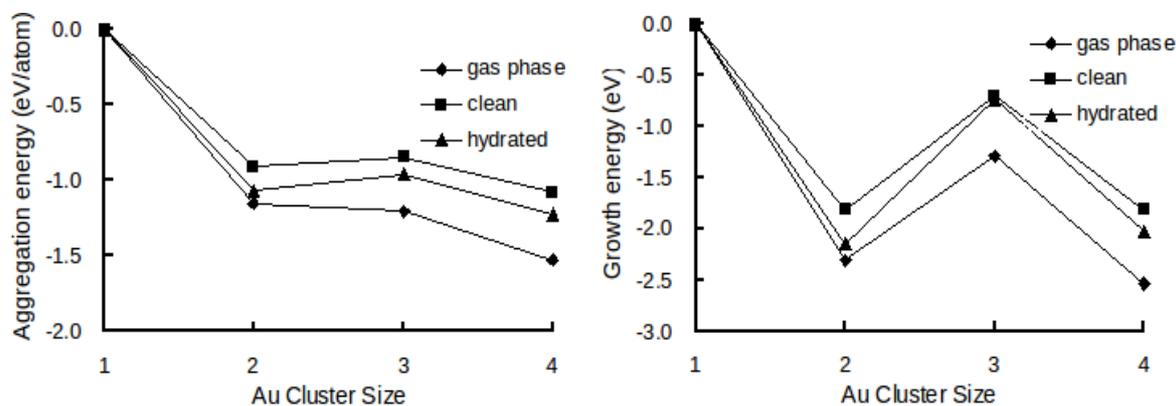


Figure 1: Local structures for Au₂ and Cu₂ on γ -Al₂O₃ surfaces, and the growth and aggregation energies for Au_n in gas phase and on γ -Al₂O₃ surfaces

from the surface, and the n-atom cluster is more stable on the surface.

As indicated in the figure, because the 6s1 electronic character of single Au atom, the even-atom clusters have larger growth energy than the odd-atom clusters both in gas and on surfaces. It indicates odd-atom clusters have stronger ability to get one more atom to become even-atom clusters, and Au would prefer to aggregate into even-atom clusters. Au clusters show larger growth energies in gas phase than on the surface, which indicates the interaction of Au with the surface inhibits its growth and aggregation. In addition, the negative growth and aggregation energies indicate the 3-dimensional growth of Au on γ -Al₂O₃ surfaces.

More Information

- (a) M. Haruta, T. Kobayashi, H. Sano, N. Yamada, *Chem. Lett.* 1987, 405-408. (b) M. Haruta, *CATTECH* 2002, 6, 102-115.
- (a) N. Nilius, M. V. Ganduglia-Pirovano, V. Brázdová, M. Kulawik, J. Sauer, H. J. Freund, *Phys. Rev. Lett.* 2008, 100, 4. (b) R. M. Jaeger, H. Kuhlbeck, H. J. Freund, M. Wuttig, W. Hoffmann, R. Franchy, H. Ibach, *Surf. Sci.* 1991, 259, 235-252. (c) M. Bäumer, H. J. Freund, *Prog. Surf. Sci.* 1999, 61, 127-198. (d) G. Kresse, M. Schmid, E. Napetschnig, M. Shishkin, L. Kohler, P. Varga, *Science* 2005,

308, 1440-1442.

- G. Feng, M. V. Ganduglia-Pirovano, C.-F. Huo, H. Jiao, J. Sauer, *J. Phys. Chem. C* 2011 In preparation.
- (a) J. P. Perdew, J. A. Chevary, S. H. Vosko, K. A. Jackson, M. R. Pederson, D. J. Singh, C. Fiolhais, *Phys. Rev. B* 1992, 46, 6671-6687. (b) M. Digne, P. Sautet, P. Raybaud, P. Euzen, H. Toulhoat, *J. Catal.* 2004, 226, 54-68.

Funding

DFG Cluster of Excellence UNICAT; Gang Feng thanks the International Max Planck Research School "Complex Surfaces in Materials Science" and the Chinese Academy of Sciences for a fellowship within the Joint Doctoral Program.

How does water arrange around a spin probe?

Ab Initio MD study of the solvation structure and EPR spectrum of Fremy's salt in water-methanol solutions

D. Sebastiani, Institute of Theoretical Physics, Free University Berlin

Abstract

- What is the difference between a properly working protein and a “prion”? We need to understand protein folding.
- Similar questions like self-assembly, and how enzymatic reactions work, require the same kind of investigation.
- These questions can be investigated by means of spectroscopy. Quantum mechanical simulations are extremely helpful in the “correct interpretation” of spectroscopic results.
- Electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy is a highly sensitive spectroscopic technique to study the details of such microscopic systems.
- The interpretation of the rich and detailed structure of an EPR spectrum poses serious challenges.
- We do ab initio calculations and molecular dynamics simulations combined with spectroscopy. Such a scheme facilitates the detailed understanding of EPR data.

The determination of the detailed microscopic structure and dynamics of complex systems is still a challenge for modern physics and chemistry. Specifically, the nature of the interactions of water with other species – whether these are simple ions, small dissolved molecules, or large complicated proteins and polymers – is crucial for a broad range of chemical, biological, and physical processes. In the field of biology for instance, biomacromolecular folding and self-assembly, and enzymatic reactions, i.e. the very basis of life, take place in aqueous solutions and are strongly affected by the microscopic surroundings.

A variety of experimental methods are successfully applied to investigate the solvation of ions and molecules, however, precise quantitative results are still rare due to severe difficulties in extracting accurate and unambiguous information from experimental data.

Electron paramagnetic resonance (EPR) spectroscopy is a well-known method for the examination of the local structure of paramagnetic molecules (e.g. molecules with an odd num-

ber of electrons). In proteins, such paramagnetic molecules can be naturally present as cofactors (e.g. metal ions), they can also be intermediates in an enzymatic reaction, or they can be artificially attached for the very purpose of probing the system (spin labels). The two observables from an EPR experiment – the A-tensor and the g-tensor – are well known to be highly sensitive to local environmental changes like solvent polarity and fluctuations in the hydrogen bonding network.[1] In contrast to nuclear magnetic resonance (NMR), EPR is not restricted to small proteins because the measurement can only see the local environment of the paramagnetic center.

Naturally, the richness and detailed information in an EPR spectrum comes with a price; the interpretation of EPR spectroscopy has always been challenging, and EPR spectroscopists are always looking for more elaborate tools to interpret their spectra, which basically comes down to assignment and interpretation of spin Hamiltonian parameters (A- and g-tensors) and of spectral line shapes.

The introduction of density functional theory (DFT) was a turning point for the calculations of the spin Hamiltonian parameters. Before DFT, ab initio calculations of these parameters were either prohibitively expensive for medium-sized radicals, or less reliable than semiempirical methods. DFT has been shown to provide remarkably accurate values at reasonable computational costs. As for spectral line shapes, molecular dynamics (MD) simulations provides the suitable link to statistical thermodynamics, enabling the simulation of the spectrum of an ensemble of randomly oriented spins.

As an example of the utility of our approach, we investigated the solvation of Fremy's salt (a well-known paramagnetic molecule) in a frozen mixture of water and methyl alcohol, by means of pulse electron nuclear double resonance (ENDOR) spectroscopy and molecular dynamics (MD) simulations.[2] From the analysis of the EPR spectra, which was facilitated by our theoretical calculations, we could form a clear picture of the interactions between the Fremy's salt and the solvent. We found that solvation is dominated by an interplay of electrostatic interactions (interactions due to electric charges) and steric properties (small molecules fit in small spaces where large molecules cannot).

The elucidation of the microscopic interactions in such a model system represents the first step for understanding the interactions in more com-

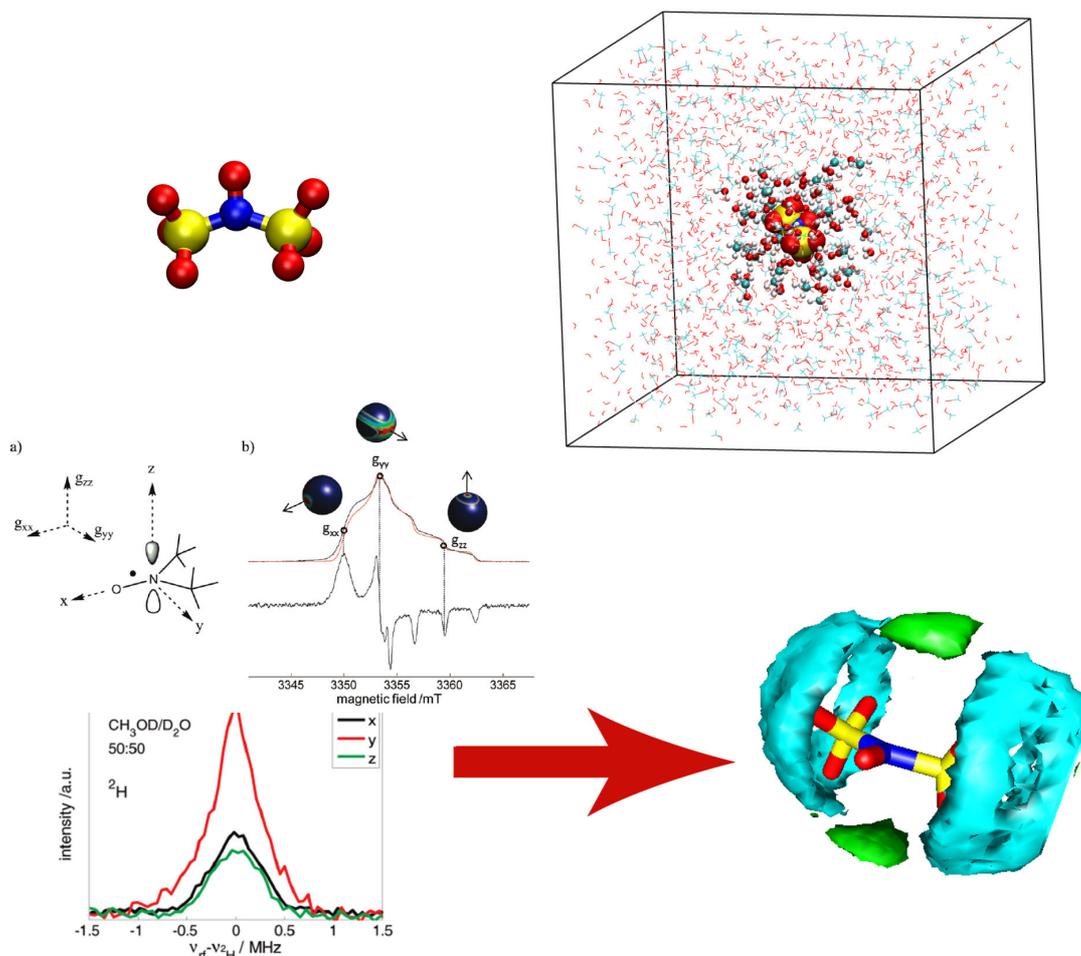


Figure 1: Top: The interactions between Fremy's salt (left) with water and methanol are simulated using quantum mechanical calculations and molecular dynamics simulations. The box on the right shows a snapshot of the system. Bottom: The spectra that were obtained experimentally were combined with the results from the theoretical calculations to understand the arrangement of water and methanol around the salt (right). The green and cyan surfaces show the distribution of different types of hydrogen atoms around the salt.

plex biochemical systems. What is most significant here is that the conclusions drawn from the theoretical calculations were in very good agreement with the EPR results that were obtained in the laboratory. This paves the way for applying the same combination of experimental work and theoretical calculations to larger more complicated systems, where the interpretation of the experimental measurements is even more challenging. For this aim, we are now working on a general efficient computational protocol for the calculation of the complete EPR spectrum from first principles.

More Information

1. J. Weil, J. Bolton. *Electron Paramagnetic Resonance*; Wiley: 2007.
2. J. Heller, H. Elgabarty, B. Zhuang, D. Sebastiani, D. Hinderberger: The Solvation of Small Disulfonate Anions in Water/Methanol Mixtures Characterized by High Field Pulse ENDOR and MD Simulations, *J. Phys. Chem. B* **2010**, 114, 7429-7438

Funding

Max-Planck-Institute for Polymer Research (Mainz, Germany); Free University Berlin (Germany); German Research Foundation (DFG)

Quantenchemische Modellierung hochaktiver Katalysatoren Hybrid Hartree-Fock/Dichtefunktionaltheoriestudie zur Rolle von Ceroxid in der oxidativen Dehydrogenierung von Methanol auf geträgertem Vanadiumoxid

J. Paier, Institut für Chemie, Humboldt-Universität zu Berlin

Kurzgefasst

- Trägermaterialien komplexer Übergangsmetall-oxidkatalysatoren beeinflussen maßgeblich deren Aktivität
- Vanadiumoxid (VO_x) auf Ceroxid wirkt katalytisch äußerst aktiv in der oxidativen Dehydrogenierung von Methanol zu Formaldehyd, einer Reaktion von hoher Relevanz in der chemischen Industrie
- Detailliertes Verständnis durch eine präzise thermodynamische und kinetische Beschreibung einzelner Reaktionsschritte mittels quantenchemischer Methoden ermöglicht die gezielte Optimierung von Katalysatoren
- Derartige Simulationen stellen nicht nur aufgrund der Systemgröße, sondern auch wegen der Notwendigkeit der genauen Beschreibung von Austausch- und Korrelationseffekten eine Herausforderung dar

Erst der Einsatz von Katalysatoren ermöglicht den Ablauf von vielen chemischen Reaktionen bei angemessenen Bedingungen und hohen Reaktionsgeschwindigkeiten. Das gilt nicht nur für viele Synthesen der chemischen Industrie, sondern auch für lebenswichtige biochemische Prozesse. Ihre Aufklärung und das daraus gewonnene Verständnis der Reaktionen auf atomarem Niveau sind zentrale Anliegen moderner chemischer Forschung. Simulationen und Berechnungen basierend auf quantenmechanischen Prinzipien können hierzu wesentliches beitragen.

Ein Katalysator bindet die Reaktionspartner kurzfristig so, dass Reaktionswege mit möglichst niedrigen Reaktionsbarrieren ablaufen können. Ein Beispiel ist der Transfer eines Wasserstoffatoms bei der oxidativen Dehydrogenierungsreaktion von gesättigten Kohlenwasserstoffen oder einfachen Alkoholen wie Methanol. Übergangsmetalloxide, wie z. B. VO_x , sind ausgesprochen aktive Katalysatoren für diese Reaktion. VO_x ist in geringen Konzentrationen auf einem Trägermaterial aktiv. Es hat sich herausgestellt, dass VO_x gemeinsam mit Ceroxid als Träger hochaktive Katalysatoren für die Oxidation von Methanol zu Formaldehyd bildet, im Gegensatz zu den chemisch eher inerten Oxiden des Siliziums oder Aluminiums [1].

Trotz der für Physik und Chemie bahnbrechenden Entwicklung der Dichtefunktionaltheorie (DFT) durch Hohenberg, Kohn und Sham um 1964, stellt die atomistische Simulation von festkörperchemischen Reaktionen wie der oben genannten Methanoloxidation auf VO_x /Ceroxid eine große Herausforderung an Rechner und Software dar. Die Gründe hierfür liegen in der Notwendigkeit (i) die Konzentration an VO_x möglichst klein zu halten, was große Superzellen der Oberfläche erfordert (siehe Abbildung) und (ii) Austausch- und Korrelationseffekte zwischen Elektronen möglichst genau zu beschreiben. Diese Effekte bilden den Schlüssel zur hohen katalytischen Aktivität von VO_x mit Ceroxid. Für (ii) hat sich der Einsatz von sogenannten Hartree-Fock/DFT-Hybridfunktionalen nicht nur in der Quantenchemie, sondern auch in der computergestützten Halbleiterphysik sowie in Simulationen von sogenannten stark korrelierten Materialien, wie z. B. Ceroxid, als sehr erfolgreich erwiesen. Wichtiger Bestandteil von Hybridfunktionalen ist die Hartree-Fock-Austauschenergie (HFA) zwischen Elektronen gleichen Spins, deren Berechnung aber gleichzeitig numerisch aufwändig ist. Abhängig von der Systemgröße erfordern Hybridfunktionalrechnungen um ein bis zwei Größenordnungen längere Simulationslaufzeiten verglichen mit Standard-DFT.

Wir verwenden in unserem Projekt das Programmpaket VASP [2] basierend auf ebenen Wellen und Pseudopotentialen als Basis zur Darstellung des Kohn-Sham Hamilton-Operators unter periodischen Randbedingungen. Für große Systeme verringert die sogenannte abgeschirmte HFA in gleichnamigen Hybridfunktionalen [3] den Rechenaufwand erheblich, was aber den Bedarf an Massivparallelrechnern keineswegs mindert. Die parallel kodierte Software VASP erlaubt Hybridfunktionalrechnungen mit einer optimalen Nutzung von bis zu mehreren Hundert Rechenkernen. Dies ist für relativ aufwendige Strukturoptimierungen von Systemen dieser Größe unverzichtbar. Mit diesen "Tools" ist es möglich, Gleichgewichtsstrukturen und Übergangszustände zu finden, die den Reaktionsweg der Methanoloxidation auf VO_x /Ceroxid vollständig charakterisieren.

In Zusammenarbeit mit Experimentatoren der Gruppe um H.-J. Freund am Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft in Berlin wurden durch effiziente Synergien zwischen computergestützter Simulation und Experiment schon

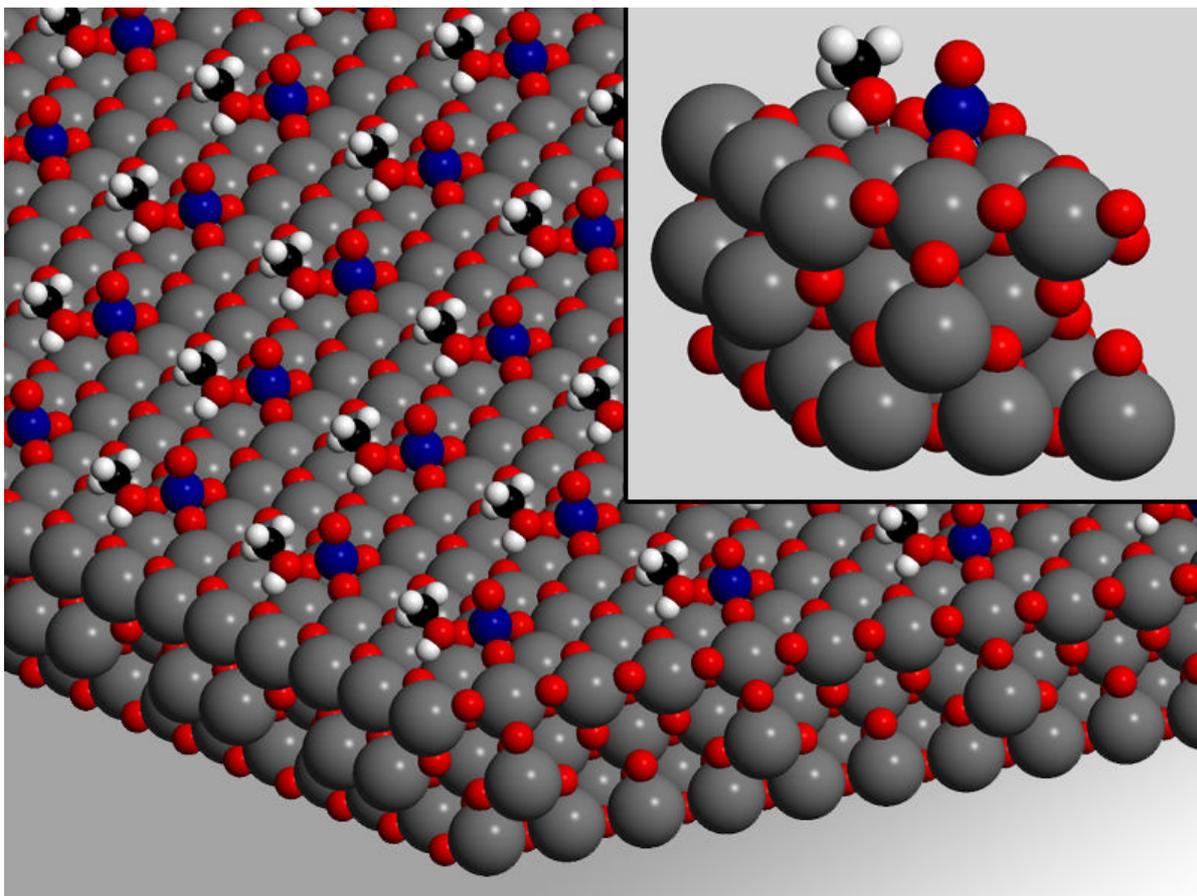


Abbildung 1: Modell einer Ceroxidoberfläche mit Vanadiumoxid und Methanol als Adsorbate. Das Vanadium (dunkelblau) ist tetraederförmig von rot dargestellten Sauerstoffatomen umgeben. Benachbart dazu liegt ein Methanolkemkül (CH_3OH ; C: schwarz, H: weiß). Das vergrößerte Schaubild zeigt eine sogenannte (3×3) -Superzelle der Oberfläche. Gut erkennbar sind die drei aus Cer-Atomen bestehenden Lagen, welche gemeinsam mit Sauerstoff ein sogenanntes 9-Lagen-Modell der Oberfläche bilden.

viele wichtige Erkenntnisse in Bezug auf Katalysatorstruktur und Kooperativität zwischen Trägermaterial und Katalysator gewonnen [4].

4. M. V. Ganduglia-Pirovano, C. Popa, J. Sauer, H. Abbott, A. Uhl, M. Baron, D. Stacchiola, O. Bondarchuk, S. Shaikhutdinov, and H.-J. Freund, 2010: Role of Ceria in Oxidative Dehydrogenation on Supported Vanadia Catalysts. *J. Am. Chem. Soc.*, 132, 2345-2349.

Mehr zum Thema

1. J. Döbler, M. Pritzsche, and J. Sauer, 2005: Oxidation of Methanol to Formaldehyde on Supported Vanadium Oxide Catalysts Compared to Gas Phase Molecules. *J. Am. Chem. Soc.*, 127, 10861-10868.
2. G. Kresse and J. Hafner, 1994: *Ab initio* molecular-dynamics for open-shell transition metals. *Phys. Rev. B*, 48, 13115-13118; see <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp>.
3. J. Heyd, G. E. Scuseria, M. Ernzerhof, 2003: Hybrid functionals based on a screened Coulomb potential. *J. Chem. Phys.*, 118, 8207-8215.

Förderung

DFG-Sonderforschungsbereich 546, Teilprojekt C5

Transport across biological membranes

Molecular dynamics simulations of motor and proton transporter proteins

A.-N. Bondar, Free University Berlin, Department of Physics

Abstract

- Dynamics and conformational coupling are necessary for the functioning of motor and transporter proteins. Changes in hydrogen-bonding interactions between protein amino acids can be directly involved in large-scale conformational changes of the protein.
- The cytosolic SecA motor is an essential component of the Sec translocation system in bacteria. SecA couples the hydrolysis of adenosine triphosphate (ATP) with remarkable conformational changes of the SecA-SecYEG translocase that lead to the translocation of secretory proteins across the membrane. To begin to understand the molecular mechanism that ensures long-distance coupling in SecA, we will perform prolonged Molecular Dynamics (MD) simulations of SecA in a box of water molecules.
- Channelrhodopsin-2 (ChR-2) is a light-gated cation channel with applications in neurobiology. The crystal structure of ChR-2 has not been solved yet. To gain insight into the functional role of putatively important hydrogen-bonding interactions, we will investigate the dynamics of homology models of ChR-2, and mutants of the bacteriorhodopsin proton pump.

Proteins are synthesized in the cytoplasm, a fluid matrix that fills the space between the compartments of the cell. To ensure their proper structure and functional state, newly synthesized proteins often require transport to specific subcellular compartments. These tasks are performed by sophisticated machineries present in all branches of life. The Sec system, whose essential components are the cytosolic SecA motor and the membrane-embedded SecYEG channel, is a major route for protein secretion in bacteria; toxins are among the proteins secreted via the SecA path. Understanding how SecA works is a critical point for understanding protein biosynthesis, and can have important applications for developing antimicrobial agents.

SecA is a large protein that contains several domains (Figure 1). Crystal structures indicate that the changes in the structure of SecA during protein translocation are indeed remarkable. The Protein Binding Domain (PBD) is the structural element that exhibits the largest conformational vari-

ability among the SecA crystal structures: it had been suggested that opening of SecA involves a large rigid-body rotation of the PBD [1]. The conformation of the PBD could, however, be affected by the crystallization conditions, and the similarity between the overall structures of the Nucleotide Binding Domains (NBDs) in different nucleotide-binding states could imply that important conformations sampled by SecA are not represented by the crystal structures [2]. As a key step towards understanding how SecA works, we will perform prolonged all-atom MD simulations to characterize the structure and dynamics of the SecA motor in the open and closed states. This work will provide the foundation for future investigations of the mechanism of chemo-mechanical coupling in SecA.

Computer simulations are a well-established, cost-effective method that allows us to probe the geometry and the motions of proteins. The simulations require the coordinates of each atom of the protein, which are known from X-ray crystallography, and use a set of equations describing the interactions of each protein atom with other protein atoms and with the environment. The simulation consists of solving numerically the classical time-dependent equations that describe the motion of the collection of atoms making up the protein and its environment (such as water and molecules).

Prolonged simulations of 50–100 nanoseconds are required to equilibrate thoroughly large systems (approx. 200.000 atoms) consisting of proteins and solvent molecules. High-performance parallel computing made possible by the HLRN will allow us to sample efficiently the long-timescale dynamics of SecA in a large box of water molecules.

The microbial-type ChR-2 is a light-gated cation channel that consists of a transmembrane rhodopsin domain, and a cytosolic C-terminal domain. Absorption of light by the retinal chromophore triggers a reaction cycle in which conformational changes of the protein are associated with opening and closing of the channel. Several amino acids critical for the ion pumping or sensory activity of other members of the microbial-type rhodopsins are replaced in ChR-2, where they are likely implicated in function. For example, important differences are observed between the sequences of amino acids of ChR-2 and the proton-pumping bacteriorhodopsin in regions that in bacteriorhodopsin are directly involved in proton uptake and release.

Investigating the specific roles of these amino acids offers a unique opportunity to understand the

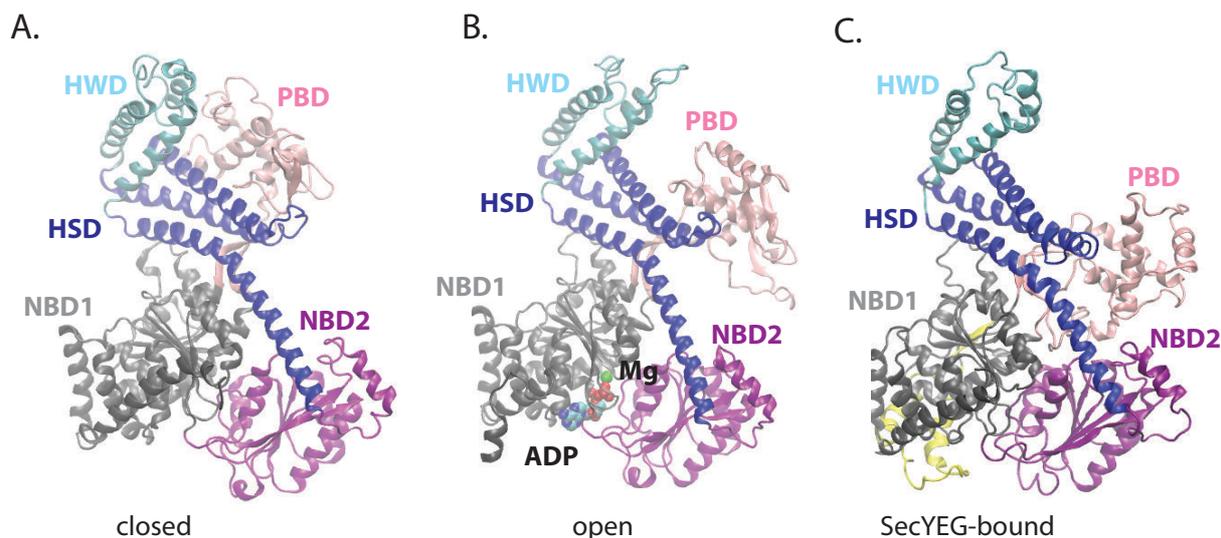


Figure 1: Large-scale conformational changes of the SecA motor during protein translocation. (A-C) SecA in the closed (A), open (B), and SecYEG-bound states (C) from refs [3], [1], [4], respectively. The nucleotide binds at the interface between NBD1 and NBD2. HSD and HWD denote, respectively, the Helical Scaffold Domain and the Helical Wing Domain. In panel (B), the atoms of the ADP molecule are colored as follows: carbon - cyan, nitrogen - blue, oxygen - red, and phosphorus - brown; the magnesium ion is depicted in green. The crystal structures of SecA closed and open states are from *B. subtilis*, and that of SecYEG-bound SecA is from *T. maritima*. Note the differences in the orientation of the PBD relative to the remaining of the protein in the closed, open, and SecYEG-bound states of SecA.

general concepts that govern the design of membrane transporters and receptors. We will perform MD simulations to assess the dynamics and lipid interactions of ChR-2 homology models, and of bacteriorhodopsin mutants. Particularly important is to derive information about the dynamics of internal water molecules. The work on understanding how specific amino-acid interactions affect the structure and dynamics of the protein, and the dynamics of the internal water molecules, will contribute to deriving a molecular understanding of how ChR-2 works.

More Information

1. Osborne AR, Clemmons WM Jr, Rapoport TA (2004). A large conformational change of the translocation ATPase SecA. *Proc Natl Acad Sci USA* 101: 10937-10942.
2. Robson A, Booth AEG, Gold VAM, Clarke AR, Collinson I (2007). A large conformational change couples the ATP binding site of SecA to the SecA protein channel. *J Mol Biol* 374: 965-976.
3. Hunt JF, Weinkauf S, Henry L, Fak JJ, McNicholas P, Olivier DB, Deisenhofer J (2002). Nucleotide control of interdomain interactions in the conformational reaction cycle of SecA. *Science* 297: 2018-2026.
4. Zimmer J, Nam Y, Rapoport TA (2008). Structure of a complex of the ATPase SecA and the protein translocation channel. *Nature* 455: 936-943.

Funding

Freie Universität Berlin, Department of Physics

Functionalization of graphene on metals

Graphene on ferromagnetic surfaces and its functionalization with water and ammonia

E. Voloshina, B. Paulus, Yu. Dedkov, Institut für Chemie und Biochemie, Freie Universität Berlin; Institut für Festkörperphysik, Technische Universität Dresden

Abstract

- Graphene has attracted enormous interest in the past years due to its unusual electronic properties. Numerous applications have been proposed for this material.
- In order to construct graphene-based electronic devices, an energy band gap has to be induced.
- Layers of graphene on ferromagnetic (FM) surfaces may effect ideal spin filtering in FM/graphene/FM sandwich-like structures. To develop such a spintronic unit, the electronic, magnetic, and interfacial properties must be fully understood.
- Adsorbed molecules may induce subtle changes in the electronic structure and can also serve to modify the function of the graphene layer.

Graphene, a two-dimensional layer of carbon atoms packed in a honeycomb lattice [Fig. 1(a)], is a unique physical object and it is under intense attention for the last several years due to its fascinating properties [1]. Starting from the first experimental works on the observation of ambipolar field effect and quantum Hall effect in graphene, this material still continues to astonish scientists via demonstration of various interesting phenomena, like high carrier mobility, integer and half-integer quantum Hall effect, Klein tunneling, etc. In 2010, A. Geim and K. Novoselov were awarded the Nobel Prize “for groundbreaking experiments regarding the two-dimensional material graphene”. As from the practical point of view, many interesting graphene-based applications were demonstrated and proposed. Among them are high-frequency field-effect transistors, flexible touchscreens, single-molecule gas sensors and many others. Almost all graphene-based devices, which are presently realized or will be implemented in the future, are based on the fact that in the neutral state of graphene, the density of states at the Fermi level is zero and can be easily changed upon particular conditions leading to dramatic variation of the conductance response of the graphene conductive channel [Fig. 1(b-d)]. Such conditions can be realized in different ways, like in the field-effect

transistor via application of different-sign voltages to the back-gate electrode (controllable change of the conductivity of graphene from n - to p -type), via adsorption of graphene on different substrates (e.g. a graphene ribbon can connect two different metal contacts which induce different types of graphene doping, thus allowing the realization of $n-p$ junctions in graphene), or via adsorption of atoms or molecules with different electron affinity on graphene (as was demonstrated in recent works, graphene can be used for realization of precise gas sensors [1]). In the last two cases the strength of interaction of graphene adsorbed on a substrate or adsorbing another molecule defines the changes in the density of states of graphene around the Fermi level and has to be carefully examined.

Focusing on the graphene/metal systems, several graphene-based hybrid structures were theoretically proposed. The first example is the so-called “spin-filter” which exploits the perfect match of graphene lattice and close-packed surfaces of ferromagnetic materials, Co and Ni. The spin-filtering effect in this system originates from the unique overlap of the electronic structures of graphene and the close-packed surfaces of ferromagnetic Ni and Co [2]. The interaction between graphene and ferromagnetic materials will however change the electronic properties of the interface, partially quenching the spin-filtering, but a sizable effect can still be detected by choosing a proper combination of ferromagnetic materials or via increasing the number of the graphene layers. Beyond the utilization of its unique electronic properties, graphene may also be exploited for many other applications, for example, using a graphene layer as a template for the growth of regular arrays of nanostructures. On close-packed noble metal surfaces, such as Ir(111), Rh(111), or Ru(0001) graphene forms periodically corrugated moiré patterns with a period of several nanometers, and such superstructures can act as templates for the preparation of exceptionally well-ordered nanocluster lattices. Monodisperse metal cluster arrays on the inert graphene surface can be used in catalysis or magnetic data storage.

Recently, investigations of the lattice-matched interface between graphene and ferromagnetic surfaces were performed by means of angle-resolved photoemission (ARPES), near edge x-ray absorption fine structure spectroscopy (NEXAFS), and density functional theory (DFT) [3]-[4]. We

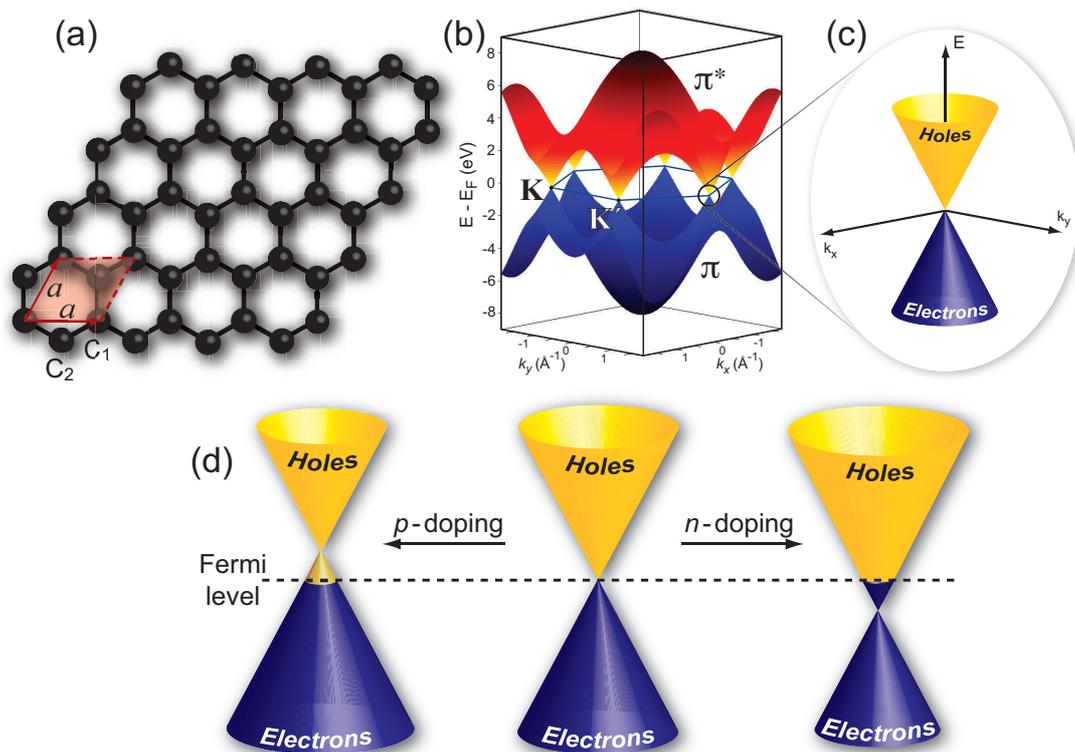


Figure 1: (a) Crystal structure of graphene where carbon atoms are arranged in the honeycomb lattice. Unit cell of graphene with lattice constant a has two carbon atoms per unit cell, C1 and C2. (b) Electronic dispersion of π and π^* states in the honeycomb lattice of free-standing graphene obtained in the framework of tight-binding approach. These branches have linear dispersion (c) in the vicinity of the K points of the Brillouin zone of graphene. (d) Position of the Dirac point and the Fermi level as a function of doping for the free-standing graphene.

observed noticeable modifications of the graphene and substrate band structures in the system. The strong hybridization of the graphene π and spin-polarized $3d$ valence band states of ferromagnetic material results in formation of interface states. This leads to the appearance of induced magnetism in the carbon atoms of the graphene layer. When considering the graphene/FM interface, where FM = Ni(111), Co(0001), 1ML Fe/Ni(111), the magnetic response from the graphene layer grows with increasing magnetic moment of the underlying FM substrate.

Our joint experimental-theoretical work is currently directed towards studying the adsorption of polar molecules on the graphene layer, epitaxially grown on ferromagnetic surfaces. ARPES and NEXAFS data of the H_2O (NH_3)/graphene/Ni(111) system give information about the kind of interaction between adsorbed molecules and graphene on Ni(111). However, the preferable position for the molecule cannot be easily determined from the experimental observations. Therefore, from the theoretical side, we plan to investigate different adsorp-

tion sites and orientations of the molecules of interest. Combinations of DFT and wavefunction-based correlation methods are applied in order to obtain detailed information.

More Information

1. A. K. Geim, *Science* **324**, 1530 (2009).
2. Yu. S. Dedkov and M. Fonin, *New J. Phys.* **12** 125004 (2010).
3. M. Weser, E. N. Voloshina, K. Horn, M. Sicot, M. Fonin, A. B. Preobrajenski, E. Goering, and Yu. S. Dedkov, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 012504 (2010).
4. E. Voloshina and Yu. S. Dedkov, in: *Graphene: Theory, Research and Applications*, INTECH Education and Publishing, Vienna (2011); ISBN 9789537619XX.

Funding

DFG Collaborative Research Centre 765

Tailoring the electronic properties of TiO₂

Defect engineering in TiO₂ – from bulk to nanostructures

P. Deák, B. Aradi, Bremen Center for Computational Materials Science, University Bremen

Abstract

- TiO₂ is a versatile material which is already used in many applications.
- In order to achieve better performance and to extend the spectrum of applications, the electronic properties of bulk and nanostructured TiO₂ have to be investigated.
- Defects have a significant effect on the electronic properties, therefore, they must be included when such properties are investigated.
- TiO₂ is a very challenging material for electronic structure calculations, making the application of new methods necessary.

TiO₂ is a wide band gap crystalline oxide with many existing and potential applications, from the pigment industry and photocatalytic air- and water purification, through water splitting and hydrogen storage, high-k dielectric and room-temperature ferromagnetic semiconductors, to electron transmitters in electrochemical solar cells, and transparent conductive oxides in optoelectronics. In most of these applications the understanding of charge carrier generation and recombination is of crucial importance. Such phenomena are governed by intrinsic defects, impurities and dopants. Our research strategy is to establish first a knowledge base about defects and their interactions in bulk materials, by means of high-level quantum mechanical computations. Once that is achieved, we will analyze the behavior of defects in the presence of surfaces and in nanostructured material. The task is made difficult by the fact that the “standard tool” of defect calculations – (semi)local approximations of density functional theory (DFT) – fails for defects in most wide band gap metal oxides. We have chosen to go beyond the standard approximations by testing the screened hybrid functional HSE06. Although this is essentially a semi-empirical approximation, we have shown that for defects of traditional group-IV semiconductors the total energy computed with this functional shows the correct linear dependence on the (fractional) occupation number of the defect level. As a consequence of that, the ionization energy of a defect is accurately given by the Kohn-Sham-energy of the defect level, in unprecedented agreement with experiment [1], [2], [3]. Based on these re-

sults, we have investigated the performance of the HSE06 functional for TiO₂. The electronic structure is in excellent agreement with the result obtained from ab initio many-body perturbation theory (GW method) and from photoelectron spectroscopy (PES). As a next step, we have demonstrated the equality between the Kohn-Sham energy level and the ionization energy of defects in both the anatase and rutile modifications of TiO₂. This is of special importance, because these two modifications show strong and different polaronic effects. In rutile, mobile electrons tend to be self-trapped by a local change in the chemical state of a Ti atom (from 4+ to 3+), while in anatase, a similar local change of an O atom (from 2- to 1-) traps mobile holes. Standard approximations of DFT fail to describe these effects. Our calculations with HSE06 have found, in agreement with experiment, that *n*-type doping in rutile and *p*-type doping in anatase are counteracted by these self-trapping effects. These results prove that the HSE06 functional can supply very accurate electronic structure results in TiO₂ based systems.

Therefore, we have used the method to calculate the generic band off-sets between bulk rutile and anatase, which have great significance for photochemical applications, where a mixed phase rutile-anatase system is used. We have found that the band alignment leads to bipolar carrier separation: electrons should be accumulated in anatase, and holes in rutile. We have also investigated the optical effective mass of electrons (average mass of the conducting electrons) in highly Nb-doped anatase, which can be used as a transparent conductive oxide. The HSE06 electronic structure gives an excellent description of the observations. Our preliminary investigations on Ta-doping indicates that it is more favorable than Nb-doping, as far as the anisotropy of the effective mass is concerned. We have also investigated the possibility of *p*-type doping in anatase. We have found that, due to hole localization, the acceptors are all rather deep and the calculated formation energies are much too high for practical purposes. It should be taken into account, though, that donors (like the oxygen vacancy or hydrogen interstitials), incorporated simultaneously with the acceptors, diminish the heat of solution considerably by charge compensation, and so, in fact, very high concentration of the acceptors can be achieved. (A non-equilibrium concentration of activated acceptors can then be obtained by annealing in dry air and quenching.) Another possibility is doping

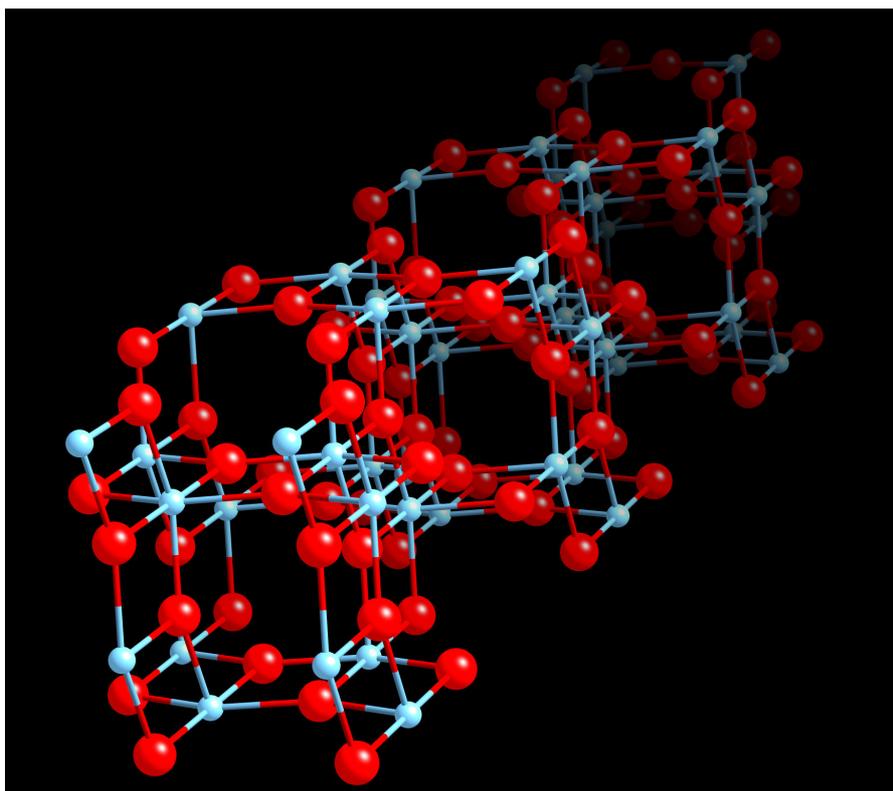


Figure 1: Model for a subnanometer-sized anatase wire.

by complexes which cause much smaller lattice strain than isolated acceptors. The investigation of such phenomena will be carried out in the present project year. We intend to conclude our studies on bulk defects by investigating the very controversial issue of the intrinsic defects (oxygen vacancy and titanium self-interstitial). These defects are of crucial importance in explaining the room temperature ferromagnetism observed in thin anatase films.

In the last phase of our investigations on TiO_2 , we will concentrate on low-dimensional systems, besides thin films mainly on nanowires. In structures with lower dimensionality, the large surface to volume ratio will change the energetic relations between dopants and intrinsic defects, and nanostructures can be expected to be more flexible in accommodating volume changes. Recent experimental work has shown the existence of extremely thin anatase nanowires, and their capability to incorporate an unusually high amount of nitrogen. Our simulation of the HRTEM (high resolution transmission electron microscopy) pictures show that the wire structure which was proposed by the experimentalists to explain their data, is not correct. Based on some preliminary calculations, we suggest another model, which is more in accordance with the observed HRTEM picture. Using

our new models, we will investigate the nitrogen uptake and the effect of surface functionalization on the electronic structure of anatase nanowires.

Finally, we intend to use our results to establish a research direction into phase changes induced by defect aggregation in TiO_2 . Such phenomena are at the heart of TiO_2 based memristors, to be used for high density storage with resistance switching (RRAM).

More Information

1. P. Deák, B. Aradi, T. Frauenheim, E. Janzén, and A. Gali, *Phys. Rev. B* **81**, 153203 (2010).
2. P. Deák, A. Gali, B. Aradi, and T. Frauenheim, in *Advanced calculations for defects in materials*, eds. A. Al-kauskas, P. Deák, J. Neugebauer, A. Pasquarello, and C. G. Van de Walle [Wiley-VCH, Berlin 2011] online at DOI: 10.1002/pssb.201046210
3. A. Gali, E. Janzén, P. Deák, G. Kresse, and E. Kaxiras, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 186404 (2009)

Funding

University Bremen

Wie Implantate länger leben

First Principles Molecular Dynamics Simulations of Di- and Tripeptides on Titanium Dioxide Surfaces

W. Friedrichs, W. Langel, L. Colombi Ciacchi, S. Köppen, Biophysikalische Chemie, Institut für Biochemie, Universität Greifswald und Grenzflächen in der Bio-Nano-Werkstofftechnik, Fachbereich Produktionstechnik, Universität Bremen

Kurzgefasst

- Oberflächeneigenschaften von Materialien mit technischer Anwendung können durch Biofunktionalisierung optimiert werden
- detailliertes Verständnis der Protein-Oberflächenkontakte und der Triebkräfte für die Proteinadsorption kann zur Verbesserung der Beschichtungen führen
- quantenchemische Simulationen veranschaulichen die Adsorption einer Auswahl an reaktiven Aminosäuren
- stabile Adsorptionskonfigurationen von im Peptid gebundenen Aminosäuren auf Oxidoberflächen beinhalten häufig Protonentransferprozesse
- kooperative Effekte benachbarter geladener Aminosäuren wirken auf deren Adsorption durch eine stärkere Polarisierung

Im Bereich der medizinischen Technik werden "gute Werkstoffe" nicht nur durch passende mechanische Eigenschaften gekennzeichnet, die durch ihre Legierungen noch verbessert werden können, sondern besonders auch durch ihre Oberflächeneigenschaften. Je nach Anwendung soll der Werkstoff z.B. biokompatibel sein (Implantate) oder aber auch absolut proteinresistent (Medikamentenfläschchen). Bei Zahnimplantaten werden aufgrund der hervorragenden mechanischen Eigenschaften häufig Titanlegierungen als Werkstoff genutzt. Um jedoch die Oberflächeneigenschaften zu optimieren, werden die Materialoberflächen immer häufiger durch die spezifische Anbindung von biologischen Komponenten funktionalisiert. Um die Integration des Implantates makroskopisch verstehen und die biofunktionalen Beschichtungen noch zu verbessern, ist es notwendig, die komplexen Prozesse an der Grenzfläche von Implantatoberflächen und physiologischer Lösung auch auf atomistischer Skala aufzuklären.

Experimentelle Untersuchungen können hier durch atomistische Simulationen sehr unterstützt und ergänzt werden. Mit klassischen Simulationsmethoden kann man so Informationen über die Vorzugsorientierung eines adsorbierten Prote-

ins oder Konformationsänderungen während des Adsorptionsprozesses ermitteln. Offen bleibt allerdings die Chemie bei dem Vorgang. Um zu verstehen, wie verschiedene funktionelle Gruppen von Aminosäuren an Materialoberflächen haften, muss man auf Simulationsmethoden zurückgreifen, die die elektronische Struktur von Atomen mit berücksichtigen. Solche Simulationsmethoden sind deutlich rechenaufwendiger, jedoch werden dabei chemische Prozesse, wie zum Beispiel Protonenübergänge, oder auch die Verschiebung von atomaren Ladungen, die zu einer Verstärkung der Polarisierung führen kann, mit aufgenommen.

In diesem Projekt wird die Adsorption einer Auswahl einzelner und auch unterschiedlich gepaarter reaktiver Aminosäuren mit first-principles-molecular-dynamics-Simulationen (CPMD) auf verschiedenen stabilen Titanoxidoberflächen untersucht. Hierbei werden alle reaktiven Aminosäuren in kleinen Peptiden gebunden auf die Oberfläche gesetzt, um die Proteinumgebung richtig wiederzugeben, und alle Zellen mit Wasser aufgefüllt. Die resultierenden Simulationszellen enthalten etwa 350 Atome. Jedes einzelne Aminosäure-Oberflächen-System muss für etwa 5 ps simuliert werden. Bei einer Nutzung von 64 Rechenkernen parallel dauert jede Simulationen, in Anhängigkeit vom System, 1 bis 2 Wochen. Der Einsatz von quantenchemischen Simulationsmethoden ist sehr kostspielig in der Rechenzeit und eine derart angelegte Untersuchung verschiedener Adsorptionskonfigurationen auf dem quantenchemischen Level ist erst durch die Nutzung von Hochleistungsrechenzentren, wie dem HLRN möglich geworden.

Bei der Adsorption von Aminosäuren in wässriger Lösung spielt immer auch Wasser eine wichtige Rolle. Auf allen Oberflächen des Oxidmaterials konnte jeweils eine in hohem Maße orientierte Wasserschicht beobachtet werden. Bei einer der simulierten Oberflächen kam es während der Simulationszeit zur Spaltung einiger Wassermoleküle und so zur Ausbildung geladener Gruppen auf der Materialoberfläche. Diese Gruppen waren im Folgenden als die bevorzugten Adsorptionsplätze für die Aminosäuren identifiziert worden, wobei die endgültige stabile Konfiguration erst durch eine Reihe von Protonenübergängen entstanden ist (nummerierte Pfeile in Abbildung 1A). Auf anderen Oberflächen konnte beobachtet werden, dass die Adsorption der kleinen Biomoleküle nicht nur direkt zu der Oberfläche stattfindet (1

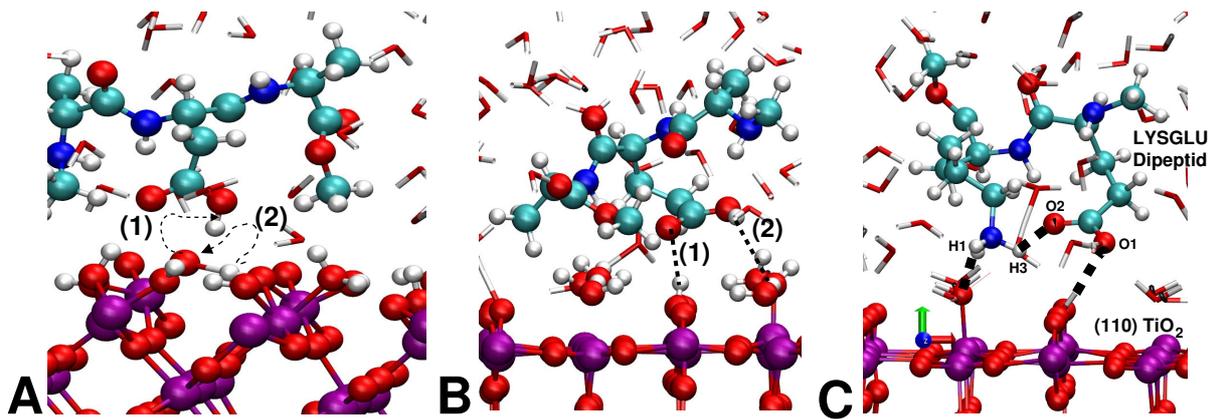


Abbildung 1: Momentaufnahmen von Tripeptiden mit einer zentralen reaktiven Aminosäure auf Titandioxid. Verschiedene Farben symbolisieren die chemischen Elemente (rot) Sauerstoff, (magenta) Titan, (cyan) Kohlenstoff, (blau) Stickstoff, (weiß) Wasserstoff. **(A)** Die Adsorption von Glutamat auf einer partiell hydroxylierten (100) Rutiloberfläche wird von einer Serie von Protonenübergängen begleitet. Die Neutralisation von Glutamat (1) induziert einen weiteren Protonenübergang (2) vom Brückensauerstoff der nächsten Reihe **(B)** Das Glutamat ist auf einer (110) Rutiloberfläche durch eine Wasserstoffbrückenbindung (1) gebunden und wird zusätzlich durch ein chemisorbiertes Wassermolekül neutralisiert (2), **(C)** Die gegensätzlich geladenen Aminosäuren Lysin und Glutamat bilden jeweils einen stabilen Kontakt zur (110) Rutiloberfläche aus. (weiß) Wasserstoff. **(A)** Die Adsorption von Glutamat auf einer partiell hydroxylierten (100)-Rutiloberfläche wird von einer Serie von Protonenübergängen begleitet, **(B)** Das Glutamat ist auf einer (110)-Rutiloberfläche durch eine Wasserstoffbrückenbindung (1) gebunden und wird zusätzlich durch ein chemisorbiertes Wassermolekül neutralisiert (2), **(C)** Die gegensätzlich geladenen Aminosäuren Lysin und Glutamat bilden jeweils einen stabilen Kontakt zur (110)-Rutiloberfläche aus. Außerdem kommt es durch die interne Wechselwirkung beider Seitenketten zu einer verstärkten Polarisierung der einzelnen funktionellen Gruppen.

in Abbildung 1B), sondern auch über diese erste orientierte Wasserschicht verstärkt wird (2 in Abbildung 1B). Hier wurde der Protonentransfer, der zur Ausbildung einer geladenen Oberflächengruppe und zur Neutralisierung der Aminosäure führt, erst durch die Aminosäure induziert und ist kein Effekt der Oberfläche, wie in Abbildung 1A. In Proteinen liegen geladene reaktive Aminosäuren häufig in der Sequenz nebeneinander. In diesem Projekt wurde untersucht, inwieweit diese Aminosäuren sich zum Einen gegenseitig zum Anderen die Adsorption beeinflussen. In den hier durchgeführten Simulationen kam es nur vereinzelt zu einer internen Wechselwirkung (Abbildung 1C zwischen den Atomen H3 und O2). Es konnte jedoch gezeigt werden, dass durch eine Interaktion der funktionellen Gruppen die einzelnen Aminosäuren stärker polarisiert werden. Dies verstärkt dann wieder den Oberflächenkontakt.

Dass die geladenen Aminosäuren bevorzugt an die geladenen Oberflächengruppen adsorbieren, wurde auch schon in klassischen Simulationen gefunden [1],[2], doch kann erst durch den Einsatz der quantenchemischen Simulationsmethoden der vollständige Prozess simuliert werden. Da die Simulation von Aminosäuremonomeren auf den Titandioxidoberflächen zur Ausbildung von Adsorp-

tionskonfigurationen führte, die nicht repräsentativ für die Proteinadsorption ist [3], wurden in diesem Projekt alle Aminosäuren in kleine Peptiden gebunden. Die nun erforderlichen zu simulierenden Zellgrößen beschreiben die obere Grenze der Möglichkeiten der Car-Parrinello-Moleküldynamik. Die Simulationen sind nur noch durch ein hohes Maß an Parallelisierung in annehmbaren Zeitintervallen zu realisieren.

Mehr zum Thema

1. S. Köppen, B. Ohler, W. Langel, Z. Phys. Chem. 221 (2007) 3
2. S. Köppen, W. Langel, Langmuir 26, (2010) 15248
3. S. Köppen, O. Bronkalla, W. Langel, J. Phys. Chem C 112 (2008) 13600

Förderung

DFG-Nachwuchsakademie "Computational Materials Science: Grenzflächen und grenzflächendominierte Prozesse"

Molecular simulation studies of the interaction of weakly coordinating ions with biological interfaces

D. Gabel, K. Karki, D. Roccatano, Department of Chemistry, University of Bremen, School of Engineering and Science, Jacobs University Bremen

Abstract

- Weakly coordinating ions show properties which cannot be explained on purely electrostatic grounds. Such ions are large, and prominent examples are ionic boron clusters (IBC).
- We want to study the interaction of IBC with membranes and with proteins using molecular dynamics simulations, in order to have a better molecular understanding of the experimental results.
- A force field for molecular dynamics simulation of IBC must be developed and optimized against experimental data.
- With this force field, the interaction of IBC with lipid bilayers and proteins (acetylcholine esterase and histones) will be simulated.

Weakly coordinating ions (WCI), both cations and anions, are a broad class of substances known for their peculiar properties in solution. Among them, icosahedral ionic boron cluster compounds (IBC) of the type $YB_{12}X_{12}(2-)$ ($X = H, I, CH_3$ and $Y = SH, OH$) and $XB_{12}H_{11}(-)$ ($X=H, NH_3, N(CH_3)_3$), see Figure 1, are particularly interesting. They influence the structure and tightness of lipid bilayers, and they inhibit enzyme functions. The structure, size, and charge, of anions are known to affect their coordinating properties, and this is especially true for the IBC. We do, however, not yet have an understanding of their structural, dynamics and thermodynamics properties in water and in other solvents. Furthermore, despite their long use in the design and synthesis of therapeutics for Boron Neutron Capture Therapy of cancer and, more recently, in other areas of drug design, the molecular mechanism of their interaction with the components of living cells (protein and biological membranes) is largely unknown both experimentally and theoretically. The aim of this project is to study molecular properties of these anions and the details of their interactions with biological systems, using molecular dynamics (MD) techniques. We will focus on the interaction of IBC with two different systems.

1. Ion-Membrane Interactions. It is known that WCI interact with membranes. We have shown that this is especially true for boron cluster an-

ions [1],[2]. Membrane integrity is influenced, and morphological changes (from minor to drastic) are found. Understanding the interaction mechanisms on a molecular level will greatly improve predictive models and the description of toxicologic and pharmacologic effects of the anions. The interaction of boron clusters with membranes will be analyzed using MD simulations. We first have to develop a force field model for the IBC, mandatory for the subsequent MD calculations. The parameters for the force field (equilibrium geometries, force constants, partial charges) are derived from quantum mechanics calculations, which provide a detailed description of the IBC and of the interaction with solvent molecules. The new force field will be checked against experimental data which we have gathered. In particular, thermodynamics properties, transport properties in water and in other solvents will be considered. Free energies will be estimated using thermodynamics integration methods. Diffusion coefficients will be estimated from experimental conductivity measurements using the Nernst-Einstein equation. The IBC model will be used to perform MD simulations in the presence of a phosphatidylcholine lipid bilayer sheet. The calculations will provide information on free energy barriers for percolation, changes of lipid surface area, orientation of asymmetric molecules, stoichiometric ratios of lipid to clusters, and induced pore formation. Different types of lipid membrane will be used for these purposes. The free energy barrier of diffusion of anions through membranes will then be calculated using equilibrium and non-equilibrium approaches such as umbrella sampling, thermodynamics integration and steered molecular dynamics (SMD). The potential of mean force necessary to penetrate the lipid bilayer will be calculated using SMD simulations. SMD applies an external force that lowers the energy barrier, and thus allows to study long time scale processes on the nanosecond timescale. The trajectories obtained from SMD will be used to obtain accurate free energy barriers of starting conformation from umbrella sampling or from constrained potential of mean force calculations.

2. Ion-Protein Interactions. The recent discovery of another ICB, metallacarborane, as effective inhibitor of HIV-1 protease has demonstrated that ICB can interact strongly with proteins. Few modeling studies have been performed, and none of them used MD simulations. In this project, two model proteins, acetylcholinesterase (AChE) and

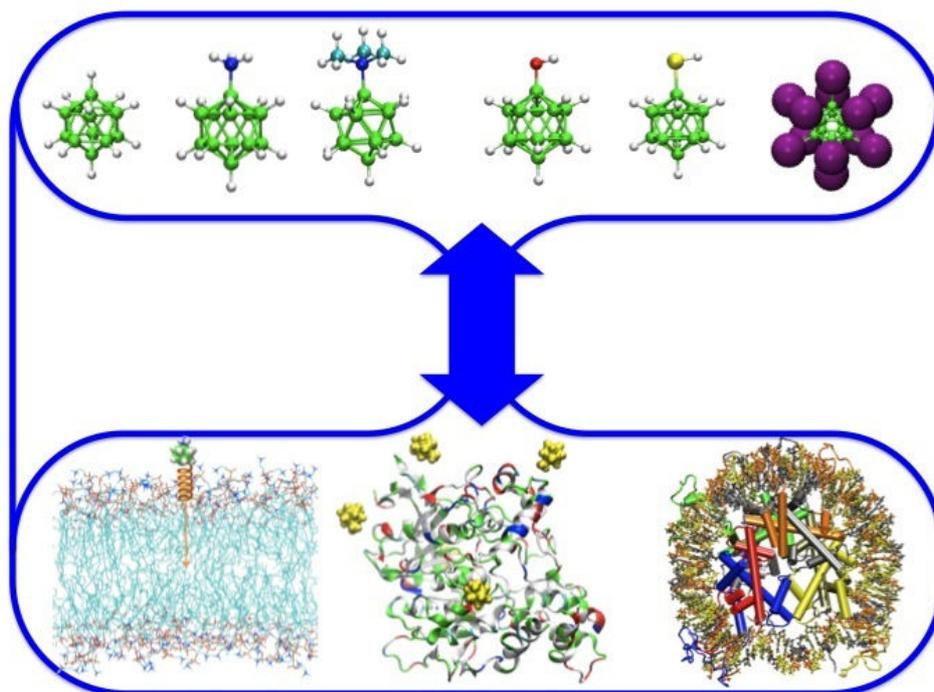


Figure 1: Structure of the icosahedral ionic boron clusters used (top) and their interactions with membranes (bottom left) and proteins (bottom center and right). The approach to SMD is shown in the bottom left: The ICP is pulled into the lipid bilayer by an externally applied field, represented by the spring. The center shows IBC ions interacting with AChE, and the right is an NCP ensemble.

the nucleosome core particle (NCP), will be used. AChE is important for the transmission of electric signals in the neuron cells and it is a target enzyme for the treatment of Alzheimer disease. We found that AChE is inhibited by ICB [1], which is surprising, as the ICB are negatively charged and the natural substrate is positively charged. NCP is the molecular building block of the chromatin present in the nuclei of eukaryotic cells. We have found that IBC accumulate in the nuclei of the cells, probably on NCP. It likely that the anions interact preferentially with the positively charged histones. We have performed MD simulations of NCP [3], but docking studies with IBC have not yet been conducted on this system. We plan to investigate the binding of IBC to AChE and with the histone proteins in NCP by using MD simulations. MD will be used to analyze preferential binding of the ICB to specific sites on the protein surface, in order to learn about the specific propensity of the ions to bind to specific amino acids. Subsequently, the diffusion of the boron cluster into the AChE active site will be analyzed by calculating the free energy barrier of diffusion and free energy of binding. We expect to obtain information on binding constants and conformational changes, which can be compared

with experimental data from enzyme inhibition and NMR spectroscopy.

More Information

1. Awad, D., L. Damian, M. Winterhalter, G. Gabel, D., D. Awad, T. Schaffran, D. Radovan, D. Daraban, L. Damian, M. Winterhalter, G. Karlsson, and K. Edwards. 2007. The Anionic Boron Cluster ($B_{12}H_{11}SH(2-)$) as a Means To Trigger Release of Liposome Contents. *ChemMed-Chem* 2:51-53.
2. Schaffran, T., E. Justus, M. Elfert, T. Chen, and D. Gabel. 2009. Toxicity of N,N,N- trialkylammoniododecaborates as new anions of ionic liquids in cellular, liposomal and enzymatic test systems. *Green Chem* 11:1458-1464.
3. Roccatano D., A. Barthel, M. Zacharias. 2007. Structural flexibility of the nucleosome core particle at atomic resolution studied by molecular dynamics simulations. *Biopolymers*, 85, 401-421.

Funding

University of Bremen

Grobe Modelle für weiche Membranen

Kollektive Phänomene in Lipidmembranen: Dynamik und die Rolle von Peptiden bei Porenbildung und Fusion

M. Müller, K.Ch. Daoulas, M. Fuhrmans, M. Hömberg, G. Marelli, Institut für theoretische Physik, Georg-August-Universität Göttingen

Kurzgefasst

- Porenbildung und Fusion von Membranen sind grundlegende biologische Prozesse, deren molekularer Ablauf weitgehend unbekannt ist.
- Computersimulationen liefern direkte Einblicke in Struktur und Übergangszustände und tragen somit zum Verständnis und der Kontrolle dieser Prozesse, z. B. durch Proteine, bei.
- Systematische Untersuchung der universellen Eigenschaften von Lipidmembranen und ihrer Umwandlungsprozesse mittels einfacher, physikalischer Modelle („coarse-grained modeling“).
- Weiche, vergrößerte Modelle ohne Lösungsmittel ermöglichen die Untersuchung von Kollektivphänomenen mit bis zu 100 000 Molekülen auf einer Zeitskala von 1 ns bis zu 100 μ s.
- Selbstentwickelter MDPD-Simulationscode mit „Force-Decomposition“-Parallelisierung.

Viele Phänomene in Lipidmembranen, wie z. B. Porenbildung, Fusion und die laterale Entmischung verschiedener Lipide, die Bildung von „Rafts“, sowie Übergänge zwischen verschiedenen gelförmigen und flüssigen Phasen, entstehen durch das kollektive Zusammenwirken hunderter Moleküle. Diese sind für viele biologische Prozesse, wie z. B. die Fusion und Teilung von Zellen und Zellorganellen, den Transport durch Membranen und die Aktivität mancher membrangebundener Proteine von grundlegender Bedeutung. Experimentelle Einsichten in die zugrundeliegenden molekularen Abläufe sind jedoch nur begrenzt verfügbar, da die Zeit- und Längenskalen – Mikrosekunden und Mikrometer – oft zu klein für eine direkte Beobachtung sind. Detaillierte atomistische oder quantenchemische Simulationen sind auf Grund der Milliarden beteiligter Atome gegenwärtig ebenfalls nicht in der Lage diese Skalen zu erreichen. Da viele mikroskopische Details für das qualitative Verhalten von Lipiddoppelschichten auf mesoskopischen Skalen nur eine untergeordnete Rolle spielen, sind einfache, vergrößerte Modelle in der Lage, die universellen Aspekte zu reproduzieren und systematisch zu untersuchen. Indem man eine Vielzahl an atomaren Freiheitsgraden in ein effektives Wechselwirkungszentrum

integriert („coarse-graining“), erhalten vergrößerte Modelle die Grundzüge der molekularen Gestalt, aber können gleichzeitig die erforderlichen Zeit- und Längenskalen erreichen. Sie bilden somit eine Brücke zwischen der molekularen Beschreibung und phänomenologischen Modellen, welche Membranen als dünne elastische Blätter beschreiben, und leisten somit einen wichtigen Beitrag zum Verständnis dieser kollektiven Phänomene.

In unserer Arbeitsgruppe wurde ein solches Modell entwickelt. Eine Besonderheit von diesem liegt darin, dass es kein explizites Lösungsmittel (Wasser) mehr enthält, sondern die Wechselwirkungen der Lipide durch Zustandsgleichungen bestimmt werden, die denen von experimentellen Systemen nachempfunden sind. Somit müssen nur die Wechselwirkungen innerhalb der Membran berechnet werden, was zu einer gewaltigen Ersparnis an Rechenzeit führt. Die Zustandsgleichungen beinhalten Mehrkörperwechselwirkungen, die wir mit „Multibody Dissipative Particle Dynamics“ (MDPD) behandeln. Ein wichtiger Unterschied zu bereits existierenden Modellen liegt im flexiblen Ansatz der ungebundenen Wechselwirkungen in Form eines klassischen „weighted-density“-Dichtefunktionals. Die hier auftretenden Parameter haben eine direkte physikalische Bedeutung [1].

Vom technischen Standpunkt aus betrachtet birgt das fehlende Lösungsmittel ebenfalls eine Herausforderung, da nun große Bereiche der Simulationsbox leer bleiben, wohingegen andere Bereiche sehr viele Moleküle enthalten. Diese starke räumliche Inhomogenität führt dazu, dass geometrische Parallelisierungsstrategien ineffizient sind. Wir haben uns daher für die „Force-Decomposition“-Parallelisierung entschieden, in der die Matrix aller paarweiser Wechselwirkungen auf eine Vielzahl von MPI-Prozessen aufgeteilt wird. Gegenwärtig erfolgt die Kommunikation ausschließlich über MPI und unser Simulationsprogramm skaliert linear auf bis zu 64 Prozessoren. Es ist jedoch geplant, die Kommunikation innerhalb eines Rechenknotens um eine zusätzliche OpenMP-Parallelisierung zu ergänzen.

In einem ersten Schritt wurden die grundlegenden mechanischen, thermodynamischen und strukturellen Eigenschaften unseres Modells analysiert. Unser Phasendiagramm enthält die biologisch relevante, flüssige L_α -Phase, sowie drei verschiedene Gelphasen (L_β , $L_{\beta'}$, L_I). Die Biegesteifigkeit der L_α -Phase, welche ein Maß für die Flexibilität einer Membran ist, liegt bei ca. $20 k_B T$.

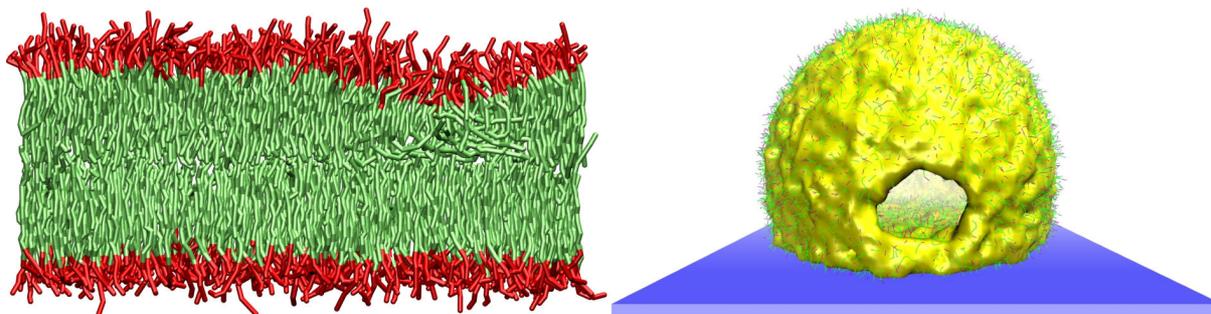


Abbildung 1: Links: Querschnitt durch eine Lipiddoppelschicht in der gelförmigen Phase mit einer flüssigen Domäne (oben rechts), welche eine andere Dicke und eine andere Biegesteifigkeit besitzt. Rechts: Snapshot einer durch ein Substrat induzierten Pore in der Simulation eines einzelnen adsorbierten Vesikels. Die hydrophoben Schwänze der Lipide sind in grün dargestellt, die hydrophilen Kopfgruppen in rot und das Substrat in blau. Zusätzlich ist das durch die Schwänze eingenommene Volumen in gelb gezeigt.

Der Hauptphasenübergang von der L_{α} - zur L_{β} -Phase ist besonders interessant, da er bei vielen biologischen Membranen im Bereich von 30–40 °C auftritt und davon ausgegangen wird, dass er in der Natur gezielt verwendet wird, um die mechanischen Eigenschaften von Doppelschichten zu steuern. Mittels besonderer Simulationstechniken haben wir den genauen Punkt dieses Phasenübergangs lokalisiert, die Differenz der freien Energie zwischen beiden Phasen bestimmt und die Linienspannung zwischen Domänen der L_{α} - und der L_{β} -Phase gemessen [2].

Mit diesem Modell untersuchen wir auch spezifische biologische Fragestellungen, wie die Membranfusion, hierbei auftretende Zwischenzustände und deren zeitliche Abfolge. Hierzu zählen „Stalks“ – sanduhrförmige Verbindungen von zwei parallelen Lipidmembranen – und Poren in diesen Membranen. Mit Hilfe eines stark vereinfachten Modells für Peptide wird untersucht, welche universellen Eigenschaften dieser Moleküle die Bildung solcher Zwischenzustände begünstigen oder erschweren. Eine zentrale Rolle spielt hierbei die Linienspannung von Fusionsporen, die in unserem Modell leicht variiert werden kann. Mit Hilfe hoch entwickelter Techniken, wie thermodynamischer Integration, Widom'scher Teilcheneinfügung oder Simulation in erweiterten Ensembles, kann für jeden Zwischenzustand die Freie Energie berechnet werden. Schließlich erhält man für eine bestimmte Abfolge von Zwischenzuständen ein Profil der Freien Energie, das es uns ermöglicht verschiedene Pfade bei der Membranfusion zu vergleichen und zu beurteilen, welche von diesen in der Natur realisierbar sind [3].

Ein weiteres Thema ist die Entstehung von substratgebundenen Membranen durch Adsorption und anschließendes Platzen und Ausbreiten von

Vesikeln auf festen Oberflächen. Dabei ist experimentell bislang nicht bekannt, an welcher Stelle die Vesikel reißen und ob die beiden Monolagen der gebundenen Doppelschicht streng der inneren und äußeren Schicht der Vesikel entsprechen. Außerdem ist das Zusammenspiel benachbarter adsorbierter Vesikel (Fusion oder Verstärkung der Deformation) sowie die Wirkung des Randes der sich ausbreitenden adsorbierten Membran auf noch inaktive Vesikel weitestgehend unbekannt.

Diese Beispiele illustrieren das Spektrum an möglichen Fragestellungen, welches mit diesen effizienten Modellen angegangen werden kann. Zudem lässt die Kombination von wachsender Rechenleistung, neuen Modellen und verbesserten Simulationstechniken einen weiteren, rasanten Fortschritt erwarten.

Mehr zum Thema

1. K. Ch. Daoulas, M. Müller, *Adv. Polym. Sci.* 224, 197–233 (2009)
2. M. Hömberg, M. Müller, *J. Chem. Phys.* 132, 155104 (2010)
3. Y. Norizoe, K. Ch. Daoulas, M. Müller, *Faraday Discuss.* 144, 369–391 (2010)

Förderung

DFG-Sonderforschungsbereich 803 Teilprojekt B3;
DFG-Sonderforschungsbereich 937 Teilprojekt A7;
Volkswagenstiftung

Wie fließen eigentlich Tröpfchen?

Simulation der Dynamik von Polymersystemen: Gleiten von Tröpfchen auf deformierbaren Oberflächen und Kinetik der Strukturbildung in mehrkomponentigen Systemen

M. Müller, A. Galuschko, F. Léonforte, M. Mülâyim, N. Tretyakov, Institut für theoretische Physik, Georg-August-Universität Göttingen

Kurzgefasst

- Das Haften und Gleiten von winzigen Tröpfchen auf strukturierten Unterlagen wirft auf der molekularen Skala viele Fragen auf
- Untersuchung der größenabhängigen Dissipationsmechanismen beim Fließen von Tröpfchen auf harten, weichen und gemusterten Unterlagen sowie des Einflusses eines Lösungsmittels oder chemischer Reaktionen hierauf
- Anschluss der molekularen Simulationen an eine hydrodynamische Kontinuumsbeschreibung
- Einfaches, vergrößertes Modell für Polymerflüssigkeiten („coarse-grained modeling“)
- geometrisch-parallelisierte Molekulardynamik „LAMMPS“ mit 20 000 – 1 000 000 wechselwirkenden Teilchen auf bis zu 256 CPUs

Bringt man geringe Mengen einer Flüssigkeit, z.B. Wasser, Öl oder Quecksilber, auf einer ebenen Fläche auf, so bilden sich zumeist Tropfen, die je nach Stärke der Kohäsions- und Adhäsionskräfte – Anziehung der Moleküle im Inneren der Flüssigkeit bzw. zwischen der Flüssigkeit und der Fläche – völlig verschiedene Eigenschaften besitzen können. In einigen Fällen, z.B. Wasser auf Glas, versucht die Flüssigkeit die Oberfläche vollständig zu benetzen, während sich in anderen Fällen, z.B. Wasser auf einem Lotusblatt, Tropfen formen, die nur eine minimale Kontaktfläche besitzen. Der Kontaktwinkel θ_Y , den die Tropfen mit der Fläche einschließen, wird an der Dreiphasen-Kontaktlinie gemessen. Im ersten Fall ist er sehr klein, d.h. $\theta_Y \approx 0^\circ$, und im zweiten Fall annähernd 180° . Er spiegelt die Balance zwischen Kohäsions- und Adhäsionskräften wider und hängt über die Young'sche Gleichung

$$\gamma_{GF} \cos \theta_Y = \gamma_{GU} - \gamma_{UF}$$

mit den drei Grenzflächenspannungen γ_{GF} , γ_{GU} und γ_{UF} zwischen der flüssigen Phase, der gasförmigen Phase und der Unterlage zusammen.

Im Gegensatz zu diesen seit langem bekannten makroskopischen Größen sind das Fließverhalten, die Reibung und das Haften winziger

Tröpfchen auf molekularer Ebene nur unvollständig verstanden. In typischen Experimenten besitzen diese Ausdehnungen von Mikro- bis Millimetern und bestehen aus Milliarden Molekülen, so dass die experimentelle Untersuchung einzelner Moleküle sehr schwierig ist. Ferner zeigen unterschiedliche Dissipationsmechanismen, z.B. Reibung durch das viskose Fließen im Inneren des Tröpfchens, an der Unterlage oder der Dreiphasen-Kontaktlinie, verschiedene Größenabhängigkeiten. „Finite-Size“-Effekte erschweren die Extrapolation von Tröpfchen zu makroskopischen Tropfen, welche durch Young'sche Gleichung und Hydrodynamik beschrieben werden. Computersimulationen können dazu beitragen, Antworten auf Fragen zu geben, wie sich Kontaktwinkel und Kontaktlinie verändern, wenn ein Tröpfchen verdampft, welche Rolle ein Lösungsmittel hierbei spielt, wie schwierig es ist, ein Tröpfchen auf verschiedenen Unterlagen zu bewegen und auch wieder zu entfernen, und vieles mehr. Diese Erkenntnisse können bei der Entwicklung und Verbesserung von Korrosionsschutz, Gleitmitteln und Techniken zum Säubern von Oberflächen angewendet werden.

Um diese Fragestellungen zu untersuchen, verwenden wir einfache Modelle von Polymerflüssigkeiten, da diese einen relativ geringen Dampfdruck besitzen und annähernd alle Moleküle während einer Simulation in der flüssigen Phase verbleiben. So können wir Verdampfungseffekte vernachlässigen, die eine Interpretation der Ergebnisse erschweren würden. Bei der Untersuchung von universellen Mechanismen kommt es weniger auf die mikroskopischen Details dieser Flüssigkeiten an, so dass es genügt, nur die relevanten Eigenschaften dieser Makromoleküle, wie die Flexibilität und die Konnektivität, zu berücksichtigen. Daher verwenden wir eine vergrößerte Beschreibung, in der mikroskopische Details in strukturlose Wechselwirkungszentren – im Folgenden als Teilchen bezeichnet – ausintegriert werden. Die Wechselwirkung zwischen den Teilchen erfolgt über phänomenologische Potentiale, die eine starke Abstoßung auf kurzen und eine schwache Anziehung bei größeren Abständen besitzen. Zusätzlich werden Teilchen eines Moleküls durch Federn mit ihren Nachbarn verbunden, so dass die Grundzüge der molekularen Gestalt erhalten bleiben (s. Abb.).

Die Simulation dieser vergrößerten Modelle erfolgt mit dem Molekulardynamikprogramm

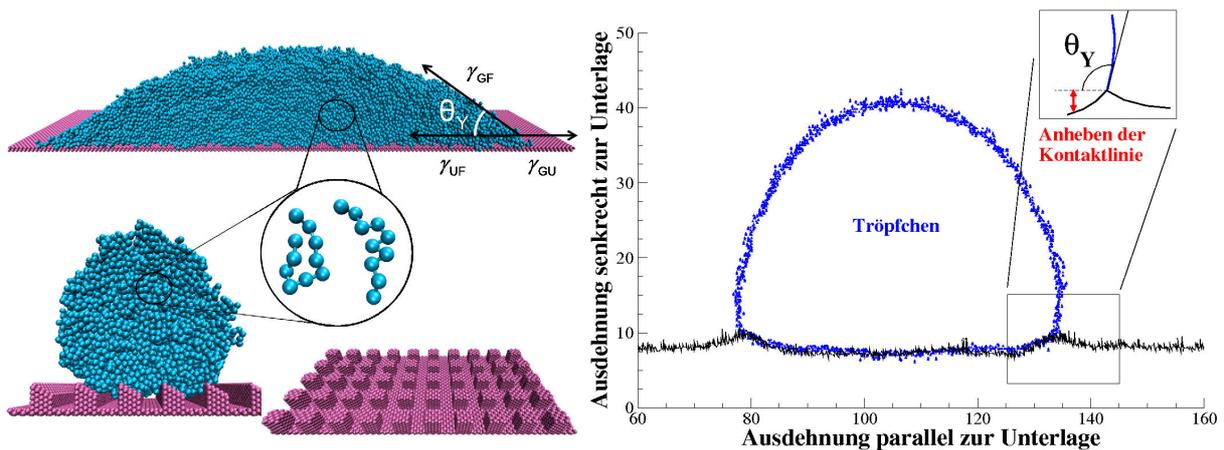


Abbildung 1: Links: Schematische Darstellung der Young'schen Gleichung anhand eines Polymertröpfchens (blau) auf einer glatten Unterlage (violett) nahe der vollständigen Benetzung. Darunter: Verschiedene, strukturierte Unterlagen mit einem Tröpfchen. Die Vergrößerung zeigt zwei typische Konformationen der Polymere. Rechts: Profil eines Tröpfchens (blau) auf einer weichen Unterlage (schwarz). Durch das Zusammenspiel der Weichheit und der Anziehung zwischen dem Tröpfchen und der Unterlage kommt es zu einer Anhebung der Dreiphasen-Kontaktlinie. Einschub: Definition des Kontaktwinkels.

LAMMPS [1], in dem die Newton'schen Bewegungsgleichungen für alle Teilchen numerisch aufintegriert werden. Der zentrale Schritt ist hierbei die ständige Neuberechnung der wirkenden Kräfte auf alle Teilchen. Solange diese Kräfte nur kurzreichweitig sind, kann jedem Prozessor ein kleines Teilvolumen der gesamten Simulationsbox zugewiesen werden, in dem dann die Kräfte der dort befindlichen Teilchen errechnet werden. Auf diese Weise lassen sich Tröpfchen mit 150 000 Teilchen (entspricht etwa $50 \mu\text{m}$) auf 64 Prozessoren effizient untersuchen. Um die Temperatur konstant zu halten, setzen wir einen DPD-Thermostaten ein, der für ein korrektes hydrodynamisches Fließen auf großen Zeit- und Längenskalen sorgt.

In diesem Projekt haben wir zunächst Polymertröpfchen auf weichen, deformierbaren Unterlagen untersucht (Abb. rechts) [2]. Die Stärke der Absorption des Tröpfchens hängt eng mit der Deformation der Unterlage zusammen und gemeinsam bestimmen sie die auftretende Reibung, die entsteht, wenn sich ein Tröpfchen bewegt. Weiterhin bestimmt die mikroskopische Dynamik an der Kontaktlinie die Dissipation und den Schlupf und ist somit entscheidend für das Verständnis des Auf- oder Abtragens von Polymerschichten auf solchen Oberflächen. Des Weiteren untersuchen wir den Einfluss verschiedener fester Unterlagen auf die Grenzflächenspannungen, auf den Kontaktwinkel und auf das effektive Potential zwischen den Grenzflächen der Flüssigkeit mit der Unterlage und der Flüssigkeit mit der Gasphase [3]. Diese Erkenntnisse werden verwendet, um hydrodynamische Modelle (z.B. Dünnschichtgleichungen) für

größere Längenskalen zu parametrisieren. Die Abbildung (links) zeigt zwei Beispiele für solch strukturierte Unterlagen. Im weiteren Verlauf des Projektes soll insbesondere das Fließverhalten in engen Kanälen zwischen derartigen Oberflächen studiert werden. Weitere interessante Fragen ergeben sich, wenn die Polymerflüssigkeit zusammen mit einem umgebenden Lösungsmittel betrachtet wird. Hier treten Verdampfungseffekte und zusätzliche Strömungen des Lösungsmittels auf.

Mehr zum Thema

1. <http://lammps.sandia.gov/>
2. F. Léonforte, J. Servantie, C. Pastorino, M. Müller, *J. Phys.: Condens. Matter* (2011), <http://arxiv.org/abs/1005.1011>
3. J. Servantie, M. Müller, *J. Chem. Phys.* 128, 0124709 (2008)

Förderung

Volkswagenstiftung; DFG-Schwerpunktprogramm 1164 Nano- und Mikrofluidik; DFG-Schwerpunktprogramm 1369 Polymer-Festkörper-Kontakte; EU-ITN MULTIFLOW

Geowissenschaften

Die Entwicklung der Atmosphäre der Erde vor 2.5 Gigajahren Planetenentwicklung und Leben

U. Langematz, M. Kunze, A. Hamann-Reinus,
Institut für Meteorologie, Freie Universität Berlin

Kurzgefasst

- Das Klima der frühen Erde während des Archaikums vor 2.5 Milliarden Jahren vor heute wird modelliert.
- Die Untersuchung des Paradoxons der schwachen jungen Sonne mit dem EMAC-FUB zeigt, dass flüssiges Wasser bei einer Erhöhung des CO₂-Gehalts um das 10-fache möglich ist..

Die Helmholtz Allianz 'Planetenentwicklung und Leben' beschäftigt sich mit Fragestellungen, die einen weiten Bogen spannen von der Entstehung eines Planetensystems, über die Voraussetzungen, die vorhanden sein müssen um die Entwicklung von Leben auf einem Planeten zu ermöglichen, bis zu den Möglichkeiten des Lebens zur dauerhaften Bewohnbarkeit des Planeten beizutragen. Die thematisch sehr weitgefächerten Fragen werden mit einem interdisziplinären Ansatz untersucht, bei dem Geologen, Biologen, Astronomen und Meteorologen zusammenarbeiten.

In diesem Teilprojekt der HGF-Allianz wird mit numerischen Simulationen die Entwicklung des Klimas der Erde während der Archaikums vor 3–2.5 Milliarden Jahren (Ga) vor Heute untersucht. Zum Einsatz kommt dabei das globale Klima-Chemie Modell EMAC-FUB (ECHAM MESy Atmospheric Chemistry) [1]. Das Klimamodell ECHAM bildet in dieser Modellkonfiguration das Basismodell. Es ist aus dem Wettervorhersagemodell des europäischen Zentrums für mittelfristige Wettervorhersage (ECMWF) hervorgegangen, und damit entsprechend komplex und rechenzeitintensiv. Die Modularität des Programms erlaubt es für die Untersuchungen relevante Module anzukoppeln, wie z.B. MECCA [4] das Modul zur Berechnung der atmosphärischen Chemie oder das Modul des Mischungsschichtozeans [3].

Die Zusammensetzung der Atmosphäre zur Zeit des Archaikums kann mit Hilfe der Analyse von Gesteinsfunden abgeschätzt werden. Trotz großer Unsicherheiten ergibt sich das Bild einer Atmosphäre mit hohen Konzentrationen von Kohlendioxid (CO₂) und einem sehr geringem Sauerstoffanteil.

Wie die Erde hat auch unser Zentralstern, die Sonne, eine Entwicklung durchlaufen, die mit ihrem Standardmodell beschrieben werden kann. Demnach betrug die Leuchtkraft der Sonne vor 2.5

Ga nur etwa 82 % des heutigen Wertes. Die Folgen dieser schwachen jungen Sonne für die klimatischen Bedingungen auf der Erde wurden bereits in den 1970er Jahren mit einfachen Modellen abgeschätzt: bei Annahme der heutigen atmosphärischen Zusammensetzung, global gemittelte Temperaturen simuliert, die weit unter dem Gefrierpunkt von Wasser liegen. Diese Ergebnisse sind aber im Widerspruch zu geologischen Untersuchungen archaischer Gesteinsfunde, die die Existenz flüssigen Wassers auf der frühen Erde belegen. Durch die Erhöhung der Konzentration des Treibhausgases CO₂ kann die Oberflächentemperatur erhöht werden. Die meisten Modelle erfordern aber CO₂-Konzentrationen, die außerhalb der aus Gesteinsfunden abgeschätzten Werte liegen.

Das auch als Paradoxon der schwachen jungen Sonne bekannte Phänomen wird in unserem Projekt mit dem EMAC-FUB untersucht. Als Proxystern für die junge Sonne wird der Zwergstern β -com gewählt, der mit einem Alter von 2.1 Ga mit der Sonne während des Archaikums vergleichbar ist. Das Auffällige am solaren Spektrum einer jungen Sonne ist der, verglichen mit der heutigen Sonne, höhere Anteil an UV-Strahlung. Im sichtbaren und nahen Infrarot dagegen ist die solare Einstrahlung gegenüber der heutigen Sonne deutlich reduziert, was insgesamt zu einer geringeren totalen solaren Einstrahlung führt. Die hochauflösende Strahlungsparametrisierung für die solare Strahlung FUBRad [2], die im EMAC-FUB zur Anwendung kommt, ist besonders geeignet die Effekte einer modifizierten spektralen Verteilung der Einstrahlung zu simulieren.

Abbildung 1 zeigt den Effekt der reduzierten Einstrahlung einer jungen Sonne auf die zonal gemittelte Temperatur bei heutiger atmosphärischer Zusammensetzung (R2.5) und erhöhter CO₂-Konzentration (R2.5C) im Vergleich zu einem Modelllauf mit heutiger solarer Einstrahlung (Ctrl). Die Simulationen sind mit einem Mischungsschichtozean durchgeführt, unter der Annahme eines globalen Ozeans. Da die totale solare Einstrahlung deutlich vermindert ist, kommt es erwartungsgemäß zu einer starken Abkühlung in der Troposphäre und der Ausbildung eines komplett zugefrorenen Ozeans. In der Stratosphäre, die durch die Absorption von kurzweiliger Strahlung durch Ozon und Sauerstoff erwärmt wird, kommt es dagegen zu einer Erwärmung, da die junge Sonne besonders im UV-Bereich des solaren Spektrums deutlich intensiver strahlt.

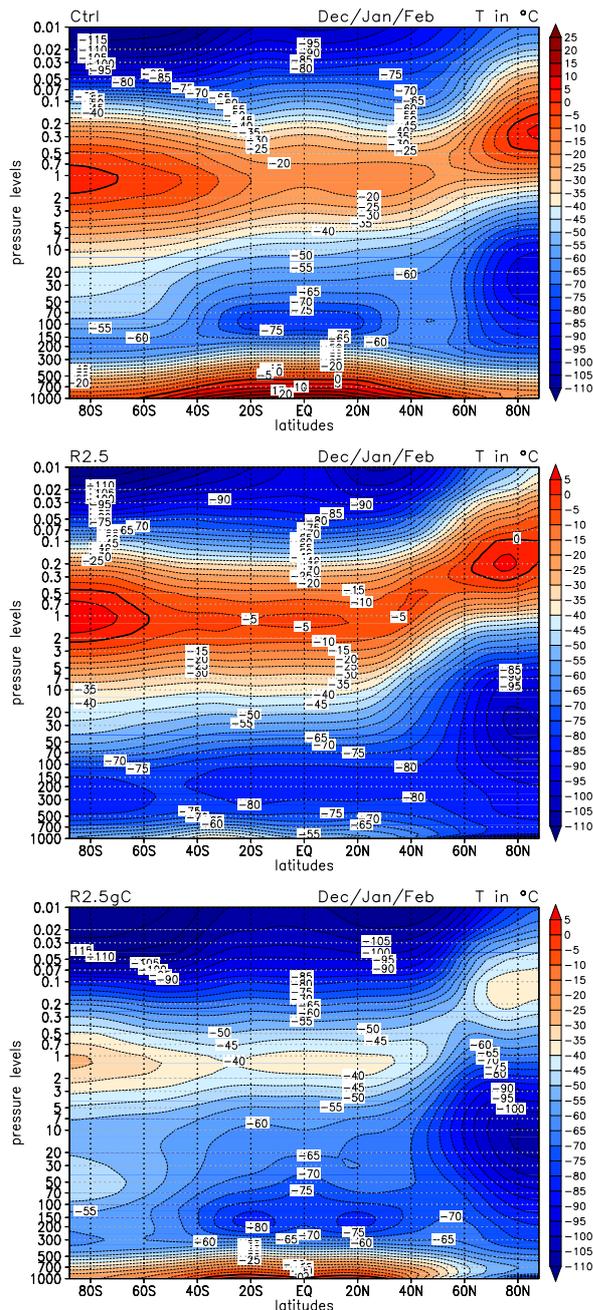


Abbildung 1: Dezember/Januar/Februar Langzeitmittel (20 Jahre) der zonal gemittelten Temperatur für ausgewählte Modellsimulationen mit einem die ganze Erde bedeckenden Mischungsschichtozean: (Ctrl) mit heutiger solarer Einstrahlung; (R2.5) mit angepasster, spektral aufgelöster solarer Einstrahlung für 2.5 Ga; (R2.5C) wie R2.5 mit $10\times\text{CO}_2$.

Bei einer Verzehnfachung des CO_2 -Gehalts sorgt der Treibhauseffekt für eine Erwärmung in der Troposphäre, so dass in den Tropen nun offenes Wasser zu finden ist. In der Stratosphäre dagegen sorgt das zusätzliche CO_2 durch verstärkte Abstrahlung im langwelligen Spektralbereich für eine Auskühlung. Insgesamt kühlt sich die Stratosphäre ab, denn die Erwärmung durch die erhöhte UV-Strahlung wird durch die CO_2 -Abkühlung mehr als kompensiert.

Neben diesen Experimenten zur solaren Einstrahlung und der atmosphärischen Zusammensetzung sind weitere Modellsimulationen in Vorbereitung, die andere Aspekte des Klimas der frühen Erde untersuchen.

Mehr zum Thema

1. Jöckel, P. et al., The atmospheric chemistry general circulation model ECHAM5/MESSy1: consistent simulation of ozone from the surface to the mesosphere, *Atmos. Chem. Phys.*, 6, 5067-5104, 2006.
2. Nissen, K., K. Matthes, U. Langematz und B. Mayer, Towards a better representation of the solar cycle in general circulation models, *Atmos. Chem. Phys.*, 7, 5391-5400, 2007.
3. Roeckner, E., T. Siebert und J. Feichter, Climate response to anthropogenic sulfate forcing simulated with a general circulation model, In: *Aerosol forcing of climate*, Verlag JohnWiley & Sons, Chichester, New England, USA, 349-362, 1995.
4. Sander, R., A. Kerkweg, P. Jöckel und J. Leilieveld, Technical Note: The new comprehensive atmospheric chemistry module MECCA., *Atmos. Chem. Phys.*, 5, 445-450, 2005.
5. <http://www.dlr.de/pf/desktopdefault.aspx/tabid-4843>

Förderung

HGF-Forschungsallianz 'Planetenentwicklung und Leben'

Habitabilitäts- und Klimastudien erdähnlicher Exoplaneten

Atmosphärische Dynamik und Chemie terrestrischer Exoplaneten

H.Rauer, M.Godolt, Zentrum für Astronomie und Astrophysik, TU Berlin

Kurzgefasst

- Ziel/Motivation: Untersuchung der Habitabilität und des Klimas erdähnlicher extrasolarer Planeten um verschiedene Zentralsterne
- Methoden: Verwendung eines Klima-Chemie-Modells für die Erde zur Erfassung komplexer Wechselwirkungen einer erdähnlichen Atmosphäre
- Studien zum Einfluss der Energieverteilung der stellaren Einstrahlung und der Umlaufzeit des Planeten um seinen Zentralstern

Das Projekt wird im Rahmen der Forschungsallianz *Planetenentwicklung und Leben* der Helmholtz-Gemeinschaft durchgeführt. In dieser Allianz soll die Wechselwirkung von Leben und planetarer Entwicklung näher beleuchtet werden. Es soll erschlossen werden, welche Faktoren das Potential eines planetaren Körpers für die Entstehung und Entwicklung von Leben bestimmen. Der dabei verfolgte Ansatz ist tief greifender und umfassender als bisherige, da der gesamte Planet von seiner äußeren Hülle (Atmosphäre und Magnetosphäre) bis zum Planeteninneren mit einbezogen wird. Hierbei sind terrestrische Planeten innerhalb des Sonnensystems, wie Mars und Venus, aber auch einige Monde, wie Titan und Europa, Gegenstand der Untersuchungen, bis hin zu Planeten außerhalb unseres Sonnensystems.

Für solche extrasolare terrestrische Planeten ist die Fragestellung nach der Habitabilität, d.h. der Bewohnbarkeit, meist verknüpft mit der Möglichkeit flüssiges Wasser auf der Oberfläche zu besitzen [1], da Leben, wie wir es kennen, flüssiges Wasser benötigt. Die Fragestellung nach dem Klima auf extrasolaren terrestrischen Planeten wird häufig anhand 1-dimensionaler (1D) Klimamodelle bearbeitet, da diese Modelle die Erschließung des großen Parameterbereichs der möglichen Szenarien aufgrund des geringeren Rechenaufwands erlauben, sowie weniger Annahmen über die Beschaffenheit eines solchen Planeten und seiner Atmosphäre benötigen als 3-dimensionale (3D) Modelle. Es konnte jedoch gezeigt werden, dass die atmosphärische Dynamik für einige Szenarien überaus wichtig werden kann. So zeigten Joshi et al. [2], dass für einen Planeten, der sich in einem synchronen Orbit um einen Stern befindet, d.h. er besitzt eine permanente Tag- und Nachtseite, der Trans-

port von Wärme und Impuls vor einem Ausfrieren der Atmosphäre bewahren kann. Des Weiteren können in einem 1D Modell Rückwirkungen der Planetenoberfläche, wie z.B. ein Albedofeedback durch die Bedeckung der Oberfläche mit Schnee oder Eis, oder auch die Verzögerung der Erwärmung einer Planetenoberfläche aufgrund des Vorhandenseins eines Ozeans schwer erfasst werden. Auch die Berücksichtigung von Wolken und ihrer Auswirkung auf das planetare Klima sind in einem 1D Modell schwerer zu realisieren.

Daher wird in diesem Projekt ein komplexes für die Erde entwickeltes Klima-Chemie Modell (EMAC, Jöckel et al. 2006[3]) in Zusammenarbeit mit dem Meteorologischen Institut der Freien Universität Berlin angewandt, um sich den komplexen Wechselwirkungen im Klimasystem eines erdähnlichen Exoplaneten zu nähern.

Hauptfaktoren, die die Habitabilität eines terrestrischen Exoplaneten beeinflussen, sind der Energieeintrag durch den Zentralstern sowie die Zusammensetzung und Masse der Atmosphäre. Wir untersuchen, welchen Einfluss der Typ des Zentralsterns auf das Klima und die atmosphärische Chemie hat, wobei wir den gleichen Gesamtenergieeintrag durch den Stern in die Atmosphäre, sowie die gleiche Beschaffenheit der Planetenoberfläche und Zusammensetzung der Atmosphäre annehmen wie für die Erde. Für einen anderen Zentralstern ergeben sich einerseits eine Änderung der spektralen Energieverteilung der Einstrahlung und andererseits eine veränderte Umlaufzeit des Planeten um seinen Stern.

Der Einfluss der Energieverteilung ist vielfältig. Zum einen ändert sich die Temperatur- und die Druckstruktur der Atmosphäre aufgrund der veränderten Absorption durch Moleküle in der Atmosphäre, welche stark wellenlängenabhängig ist. Hierzu wurde im Rahmen des Projekts z.B. bereits der Einfluss der veränderten Energieverteilung der Einstrahlung auf die Stratosphäre untersucht. Angenommen wurde die Energieverteilung eines K-Sterns, welcher aufgrund seiner niedrigeren Effektivtemperatur weniger Energie im visuellen Bereich und mehr im IR abstrahlt als die Sonne. Aufgrund der fehlenden Strahlung in dem Wellenlängenbereich in dem Ozon absorbiert, ist die Heizung der Stratosphäre schwächer, was zu niedrigeren stratosphärischen Temperaturen als für die Erde führt, wie in der Abbildung zu sehen ist. Dadurch verändert sich die atmosphärische Dynamik, welche unter anderem durch Temperaturgradienten angetrieben wird.

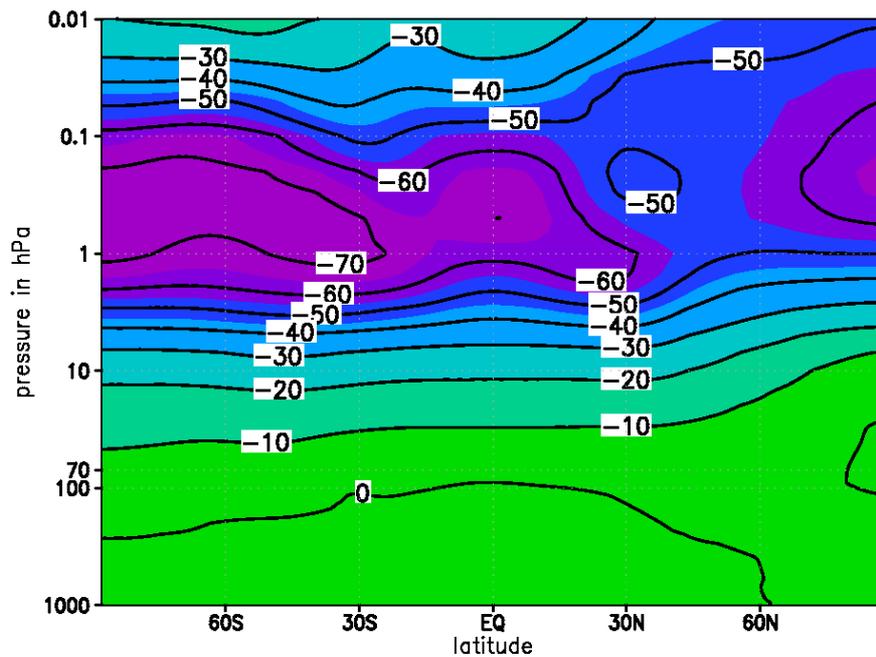


Abbildung 1: Zonalgemittelte Temperaturdifferenz (in Kelvin) im Januar in Abhängigkeit von geographischer Breite und Höhe (hier als Druck dargestellt) zwischen einer erdähnlichen Atmosphäre unter dem Einfluss solarer Einstrahlung und der entsprechenden Einstrahlung eines K-Sterns

Des Weiteren führt eine veränderte Energieverteilung zu einer Änderung der atmosphärischen Chemie, die stark durch die Wechselwirkung der einfallenden stellaren Strahlung mit atmosphärischen Molekülen beeinflusst wird. So ist zu erwarten, dass sich vor allem die Ozonverteilung stark verändert. Dies wurde bereits mit 1D-Modellen untersucht [4]. Die Ozonverteilung auf der Erde ist jedoch nicht nur photochemisch bestimmt, sondern auch der Transport von Ozon spielt hierfür eine entscheidende Rolle. Die Untersuchung des Zusammenspiels der veränderten Photochemie und atmosphärischen Dynamik ist nur in komplexen 3D-Klima-Chemie-Modellen möglich, welche die Benutzung von Hochleistungsrechnern erforderlich machen.

Um für einen anderen Sterntyp den gleichen Gesamtenergieeintrag in die Atmosphäre zu erhalten, muss der Abstand zwischen dem Planeten und seinem Stern ein anderer sein. So muss ein Planet z.B. weiter von einem Stern höherer Leuchtkraft entfernt sein. Dies führt zu veränderten Umlaufzeiten des Planeten um den Stern, und somit zu einer anderen Jahreszeitenlänge, welche sich auf die mittleren Temperaturen auswirken sollte. Die Einflüsse der veränderten Energieverteilung und der Umlaufzeit sollen einzeln untersucht werden, um die Auswirkungen und Wechselwirkungen in der Atmosphäre besser zu verstehen. Abschließend soll in einem vollständigen Szenario unter-

sucht werden, wie sich die verschiedenen Einflüsse im komplexen Zusammenspiel auswirken.

Mehr zum Thema

1. Kasting, J. F., Whitmire, D. P. and Reynolds, R.T. (1993): Habitable Zones around Main Sequence Stars, *Icarus*, 101, 108-128
2. Joshi, M. M. R. M. Haberle and R. T. Reynolds (1997): Simulations of the Atmospheres of Synchronously Rotating Terrestrial Planets Orbiting M Dwarfs: Conditions for Atmospheric Collapse and the Implications for Habitability. *Icarus*, 129, 450-465
3. Jöckel, P, Tost, H., Pozzer, A. et al. (2006): The atmospheric chemistry general circulation model ECHAM5/MESy1: consistent simulation of ozone from the surface to the mesosphere, *Atmospheric Chemistry and Physics*, 6, 5067-5104
4. Segura, A., Krelow, K., Kasting, J. F. et al. (2003): Ozone Concentrations and Ultraviolet Fluxes on Earth-like Planets Around Other Stars, *Astrobiology*, 3, 689-708

Förderung

HGF-Forschungsallianz 'Planetenenwicklung und Leben'

Wie beeinflusst der 11-jährige Sonnenfleckenzyklus das Klima? Project on Solar Effects on Chemistry and Climate including Ocean Interactions (ProSECCO)

U. Langematz, A. Kubin, Institut für Meteorologie, Freie Universität Berlin

Kurzgefasst

- Neben dem durch menschliche Aktivität verursachten Klimawandel beeinflussen auch natürliche Faktoren wie der 11-jährige Sonnenfleckenzyklus oder Vulkanausbrüche das Klima.
- Aus Messungen weiß man, dass sich zum Beispiel die Temperatur oder der Niederschlag in der unteren Atmosphäre mit dem 11-jährigen Sonnenfleckenzyklus ändern.
- Es ist noch ungeklärt, wie diese Änderungen genau zustande kommen. Es gibt Hinweise dafür, dass sowohl Sonneneinstrahlungs- als auch luftchemische Prozesse an der Entstehung der gemessenen Änderungen beteiligt sind.
- Simulationen mit einem Klima-Chemie-Modell sollen helfen, die Abläufe in der Atmosphäre während der Änderung der Sonnenaktivität zu verstehen.

Der 11-jährige Sonnenfleckenzyklus kann das Klima auf der Erde auf verschiedene Arten beeinflussen. Einerseits nimmt die gesamte Sonneneinstrahlung zu, wenn die Zahl der Sonnenflecken zunimmt. Dadurch kommt in den wolkenfreien Gebieten der Subtropen an der Erdoberfläche mehr Sonnenenergie an. Andererseits ändert sich die spektrale Zusammensetzung der Sonnenstrahlung, die die Erdatmosphäre erreicht. Am stärksten reagiert die UV-Strahlung mit sehr kurzen Wellenlängen, die mit steigender Sonnenaktivität zunimmt. Eine verstärkte kurzweilige Sonneneinstrahlung beeinflusst die Erwärmungsraten und die Temperatur in den oberen Schichten der Atmosphäre, insbesondere in der Stratosphäre (zwischen 18 und 50 km), wo sich in etwa 30 km Höhe die Ozonschicht befindet. Der Ozongehalt der Luft wird ebenfalls von der veränderten UV-Strahlung beeinflusst. Ozongehalt und Temperatur stehen in enger Wechselwirkung miteinander. Darüber hinaus können geladene Teilchen von der Sonne die Erdatmosphäre erreichen und die chemische Zusammensetzung der Luft verändern. Dies geschieht meist in den Phasen abnehmender Sonnenaktivität.

Im vorliegenden Projekt wird der Einfluss der wellenlängenabhängigen Änderung der Sonneneinstrahlung mit dem 11-jährigen Sonnenfleckenzyklus auf die Erdatmosphäre mit Hilfe von Mo-

dellsimulationen untersucht. Der enge Zusammenhang von Temperatur und chemischer Zusammensetzung der Luft erfordert den Einsatz eines sogenannten Klima-Chemie-Modells (Chemistry-Climate Model, CCM). Das Modell EMAC-FUB simuliert atmosphärenphysikalische Größen wie die Temperatur, die Windgeschwindigkeit und Windrichtung, die Luftfeuchte und chemische Größen wie die Konzentrationen von Spurenstoffen (Ozon, Methan, Lachgas, etc.) auf einem Gitter, das mit einer Maschenweite von $2.8 \times 2.8^\circ$ über die Erde gelegt wird und vom Boden bis in etwa 80 km Höhe reicht. Das Modell beinhaltet ein Strahlungsschema, das im Vergleich zu den üblicherweise in Klimamodellen verwendeten Codes spektral höher aufgelöst ist. Das heißt, im Bereich der UV-Strahlung werden 49 kleine Wellenlängenbereiche benutzt statt eines einzigen breiten Intervalls. Dies ist wichtig um die verhältnismäßig großen Änderungen der Sonneneinstrahlung bei kurzen Wellenlängen korrekt wiedergeben zu können. Eine Simulation mit dem Modell ist durch die Modellierung der chemischen Reaktionen an jedem Gitterpunkt sehr rechenzeitaufwändig, 128 CPUs benötigen etwa 24 Stunden um ein Jahr zu simulieren.

Es kann gezeigt werden, dass ein vergleichsweise schwacher äußerer Antrieb, wie die Variation der wellenlängenabhängigen Sonneneinstrahlung, zu messbaren Änderungen in der Stratosphäre führt. Beispielhaft soll dies an den Ergebnissen einer Simulation der Jahre 1960 bis 2005 erklärt werden. Für diese Simulation wurden beobachtete Meeresoberflächentemperaturen und Meereisbedeckungen vorgegeben. Außerdem ging der beobachtete Anstieg sowohl von Treibhausgasen als auch von Ozon zerstörenden Substanzen in die Simulation ein. Drei starke Vulkanausbrüche in den Jahren 1963, 1982 und 1991, die die Atmosphäre bis in große Höhen beeinflusst haben, wurden ebenfalls berücksichtigt. Da mehrere Einflüsse gleichzeitig auf die Atmosphäre einwirken, wird zur Auswertung eine so genannte multiple lineare Regressionsmethode benutzt. Damit ist es möglich, die Änderungen, die vom 11-jährigen Sonnenfleckenzyklus verursacht werden, von anderen Variationen (z.B. Schwankungen der Meeresoberflächentemperaturen im Zusammenhang mit dem El Niño-Phänomen) zu trennen.

Im Sonnenfleckenmaximum ist in etwa 45-50 km Höhe die Temperatur im Mittel über das ganze Jahr um 1 K erhöht. Gleichzeitig findet man in etwa

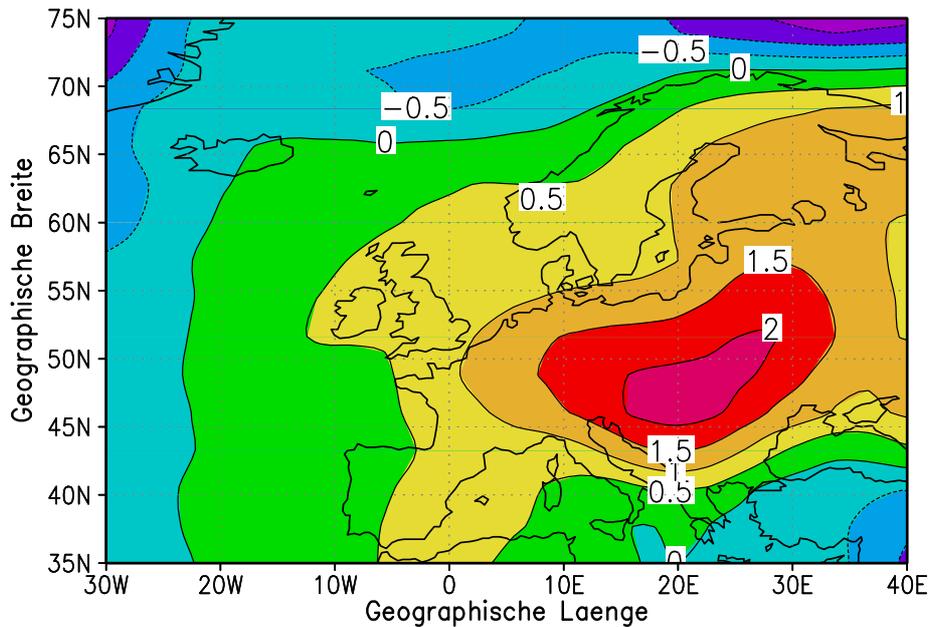


Abbildung 1: Temperaturdifferenz in Grad Kelvin in Bodennähe im Februar zwischen einer Periode großer Sonnenaktivität und einer Periode geringer Sonnenaktivität über Europa und dem Nordatlantik, simuliert mit dem Klima-Chemie-Modell EMAC-FUB.

30 km Höhe in den mittleren Breiten im Jahresmittel bis zu 3% mehr Ozon. In den Wintermonaten auf der Nordhalbkugel ist der Westwindstrahlstrom in der Stratosphäre im Sonnenfleckenmaximum stärker als im Minimum. Die Änderungen in der Stratosphäre beeinflussen ihrerseits die untere Atmosphäre und sind im Winter und Sommer besonders stark. Der Strahlstrom in der mittleren Troposphäre (8-10 km) ist in Phasen hoher Sonnenaktivität geschwächt und zu höheren Breiten hin verschoben. Gleichzeitig ist die Lufttemperatur in Bodennähe in Europa höher als in Perioden geringer Sonnenaktivität (siehe Abbildung). Dies hängt mit der Verstärkung von charakteristischen Luftdrucksystemen über dem Nordatlantik zusammen, in deren Folge verstärkt milde Luft nach Europa transportiert wird. Auch in anderen Regionen der Erde können beobachtete Änderungen mit dem 11-jährigen Sonnenfleckenzyklus im Modell nachvollzogen werden. Der Niederschlag über der Arabischen Halbinsel während des Indischen Sommermonsuns im August ist im Sonnenfleckenmaximum höher als in Phasen geringer Sonnenaktivität.

Die Simulationen mit den Klima-Chemie-Modell erlauben auch gezielte Studien zur Wichtigkeit einzelner Randbedingungen für die Entstehung des 11-jährigen Sonnensignals in der Atmosphäre. Zum Beispiel können die Meeresoberflächentemperaturen kontrolliert variiert werden, um die Wechselwirkung zwischen Ozean und At-

mosphäre in Bezug auf den Sonneneinfluss zu erforschen.

Im Rahmen dieses Projektes wurde auch eine lange Simulation von 1960 bis 2100 durchgeführt. Damit sollte untersucht werden wie sich das Klima unter hauptsächlich natürlichen Einflüssen, ohne Anstieg der Treibhausgaskonzentrationen entwickelt. Es wurde aber mit realistischen Konzentrationen Ozon zerstörender Substanzen gerechnet. Ergebnisse dieser Simulation haben Eingang in den WMO-Bericht 2011 [2] gefunden.

Mehr zum Thema

1. Gray, L.J. et al., 2010: Solar Influences on Climate, *Reviews in Geophysics*, 48, RG4001, doi:10.1029/2009RG000282.
2. WMO 2011: Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2010 (in press).
3. Eyring, V. et al., 2010: Multi-model assessment of stratospheric ozone return dates and ozone recovery in CCMVal-2 models, *ACP*, 10, 9451-9472.
4. www.iap-kborn.de/CAWSES.29.0.html

Förderung

DFG-Schwerpunktprogramm 1176 "Klima und Wetter des Systems Sonne/Erde (CAWSES)"

Klimawandel in der Stratosphäre - wie bestimmt die Stratosphäre unser Klima?

Stratospheric Change and its Role for Climate Prediction (SHARP)

U. Langematz, S. Meul, S. Oberländer, Institut für Meteorologie, Freie Universität Berlin

Kurzgefasst

- Der Klimawandel hat nicht nur Auswirkungen auf die Troposphäre sondern auch auf höhere Schichten unserer Erdatmosphäre.
- Die DFG-Forschergruppe SHARP untersucht anhand von Modellsimulationen am HLRN die Folgen des Klimawandels in der Stratosphäre und die daraus resultierenden Rückwirkungen auf troposphärisches Wetter und Klima.
- Ansteigende Treibhausgaskonzentrationen bedingen eine stratosphärische Abkühlung, die Änderungen in der Chemie und Dynamik der Stratosphäre nach sich ziehen.
- Anthropogene Emissionen halogener Quellgase (FCKWs) bewirken einen verstärkten Ozonabbau, der in der Südpolarregion zur Ausbildung des Ozonlochs führte.

Die DFG-Forschergruppe **Stratospheric Change and its Role for Climate Prediction** (SHARP) hat zum Ziel, das Verständnis des globalen Klimawandels und somit die Genauigkeit von Prognosen zukünftiger Klimaänderungen zu verbessern. Der Schwerpunkt von SHARP liegt auf der Identifizierung, Erklärung und Vorhersage von Änderungen in der Stratosphäre, die sich infolge des Klimawandels einstellen. Zudem wird deren Rückkoppelung auf die Troposphäre und damit auf Wetter und Klima untersucht. SHARP orientiert sich dabei inhaltlich an den Empfehlungen des Schwerpunktprogramms *Stratospheric Processes and their Role in Climate* (SPARC) des Weltklimaforschungsprogramms (WCRP) der WMO. In vier wissenschaftlichen Teilprojekten untersucht SHARP mit dem Klimawandel verbundene Änderungen

- der stratosphärischen Meridionalzirkulation (Projekt SHARP-BDC)
- der Entwicklung des stratosphärischen Ozons (Projekt SHARP-OCF)
- des stratosphärischen Wasserdampfgehalts (Projekt SHARP-WV) und
- der Kopplung zwischen Stratosphäre und Troposphäre (Projekt SHARP-STC).

SHARP ist ein Gemeinschaftsprojekt von acht deutschen Forschungseinrichtungen sowie internationalen Partnern und wird an der Freien Univer-

sität Berlin (FUB) koordiniert. Neben der FUB sind die Universitäten Bremen, Karlsruhe, Frankfurt und Heidelberg sowie die Max-Planck-Institute für Meteorologie in Hamburg und für Chemie in Mainz und das Deutsche Zentrum für Luft- und Raumfahrt in Oberpfaffenhofen beteiligt.

Am Institut für Meteorologie der FU Berlin werden in Zusammenarbeit mit dem HLRN numerische Modellsimulationen mit dem gekoppelten Klima-Chemie-Modell EMAC-FUB durchgeführt. Dabei handelt es sich um ein globales Atmosphärenmodell, welches sich vom Erdboden bis in eine Höhe von rund 80 km erstreckt. Im Rahmen von SHARP werden zur gezielten Untersuchung einzelner Klimaantriebe Sensitivitätsstudien in Form von Modellsimulationen über mehrere Jahre unter gleichbleibenden Randbedingungen realisiert. So werden z.B. die Einflüsse von Änderungen in den Meeresoberflächentemperaturen, der Treibhausgaskonzentrationen und des stratosphärischen Wasserdampfgehalts, sowie der arktischen Meereisbedeckung auf die Stratosphäre und auf das zukünftige Klima untersucht. Darüber hinaus soll analysiert werden, wie sich das Klima ohne FCKW-bedingte Ozonabnahme entwickelt hätte. Erste Ergebnisse werden im Folgenden kurz vorgestellt.

Um Aussagen zu den zeitlichen Änderungen der atmosphärischen Dynamik und Chemie im Zuge des Klimawandels treffen zu können, werden Simulationen unter vorindustriellen Bedingungen (d.h. Mitte des 19. Jahrhunderts) und zukünftigen Bedingungen (d.h. Mitte des 21. Jahrhunderts) mit einer Referenz-Simulation für gegenwärtige Bedingungen verglichen. Als Beispiele werden hier die entsprechenden Änderungen der zonal gemittelten Temperatur und des räumlichen Gesamtzonenfeldes erläutert. Im klimatologischen Mittel nimmt die Temperatur vom Erdboden bis zur Tropopause (in ca. 10 bis 15 km Höhe) ab und erreicht im Bereich der tropischen Tropopause mit -80°C die niedrigsten Werte. In der Stratosphäre steigt die Temperatur bis auf rund -20°C in 50 km Höhe an; in der darüberliegenden Mesosphäre wird es wieder kälter. Die klimatologische Verteilung des Totalozons weist geringe Werte über den Tropen und in der Südpolarregion (Antarktisches Ozonloch) auf. Hohe Werte im Gesamtzonenfeld befinden sich in hohen Breiten beider Hemisphären, das Maximum im Jahresmittel wird in der Nordpolarregion erreicht. Abbildung 1 (links oben) zeigt, dass die Troposphäre in der Mitte des 19. Jahr-

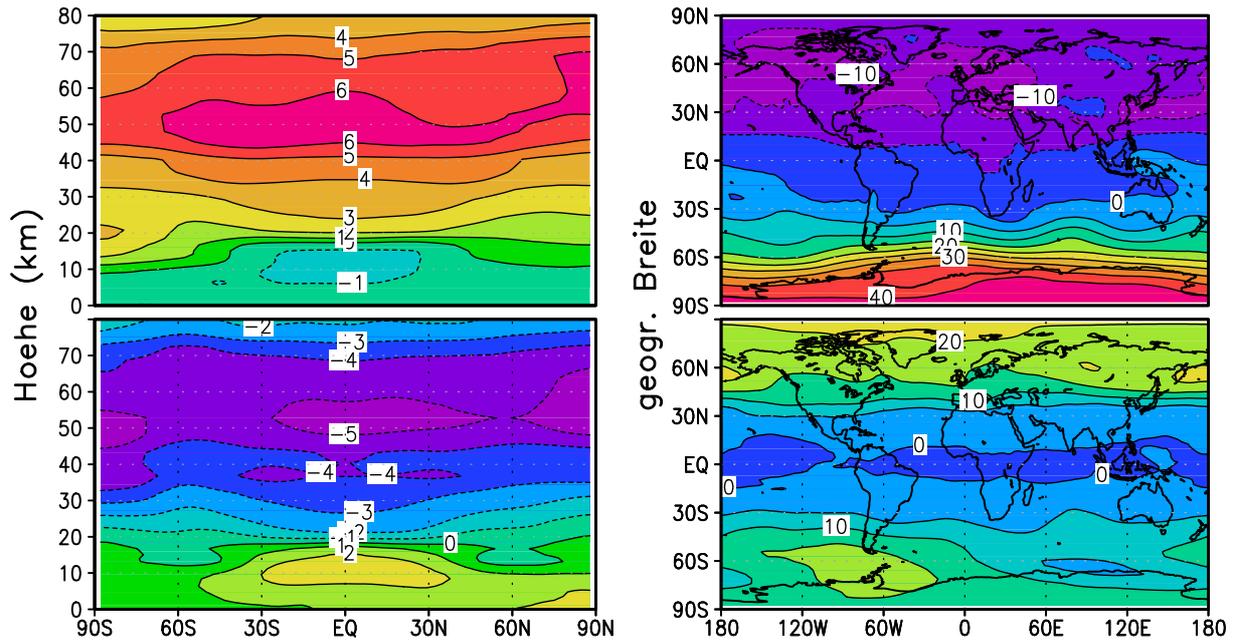


Abbildung 1: Änderungen von Temperatur in K (Breiten-Höhenschnitt, links) und Gesamtozonsäule in DU (Längen-Breitenschnitt, rechts) im Jahresmittel. Oben: Differenz zwischen vorindustrieller und heutiger Zeit; unten: Differenz zwischen Zukunft und heutiger Zeit.

hundreds bis zu 1 Kelvin (K) kälter war als heute, während die Stratosphäre mit bis zu 6 K deutlich wärmer war. Diese Tendenz setzt sich in der Zukunft fort (Abb. 1, links unten); für die Mitte des 21. Jahrhunderts ergibt sich eine Erwärmung von rund 2 K gegenüber der heutigen Zeit mit maximalen Änderungen in den Tropen und eine weitere Abkühlung mit Maximalwerten von 5 K im Bereich der tropischen Stratosphäre in ca. 50 km Höhe. Die Erklärung für diese Ergebnisse liegt in der Zunahme der anthropogenen Treibhausgaskonzentrationen seit Beginn der Industrialisierung. Diese bewirkt in der Troposphäre einen Temperaturanstieg und in der Stratosphäre eine Abkühlung.

Die stärksten Änderungen in der Gesamtozonverteilung seit der vorindustriellen Zeit ergeben sich in hohen Breiten (Abb. 1, oben rechts). In der Nordhemisphäre findet man niedrigere Ozonwerte für die Vergangenheit, während in den südlichen polaren Breiten positive Abweichungen von bis zu 40 Dobson Units (DU) auftreten. Die drastische Abnahme des antarktischen Ozons seit der vorindustriellen Zeit ist ein Ergebnis der chemischen Ozonzerstörung infolge der anthropogenen Emission von Fluor-Chlor-Kohlenwasserstoffen (FCKWs) vor allem in der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts. Für die Zukunft (Abb. 1, rechts unten) wird eine Erholung des Gesamtozons in hohen Breiten beider Hemisphären simuliert. Da in dieser Si-

mulation die Regulierung der FCKWs durch das Montreal Protokoll nicht berücksichtigt wird, ist der Erholungseffekt auf die erhöhten Treibhausgase zurückzuführen.

Mehr zum Thema

1. **Offizielle SHARP-Webseite:**
<http://www.fu-berlin.de/sharp/>

Förderung

DFG-Forschergruppe FOR 1095 "Stratospheric Change and its Role for Climate Prediction" (SHARP)

Wasser über den Wolken

Berechnung der Wasserdampfkonzentrationen aus Limb-Messungen des Satelliteninstrumentes SCIAMACHY

K. Weigel, W. Lotz, M. Vountas, Institut für Umweltphysik (IUP), Universität Bremen

Kurzgefasst

- Wasserdampf ist das wichtigste natürliche Treibhausgas in der Atmosphäre.
- Auch der Wasserdampf oberhalb der Wolken, in der oberen Troposphäre und unteren Stratosphäre beeinflusst unser Klima.
- SCIAMACHY (engl.: Scanning Imaging Absorption spectrometer for Atmospheric CHartography) Satellitenmessungen bieten uns die Möglichkeit, eine lange und dichte Zeitserie des Wasserdampfs zu berechnen; es gibt bis heute fast 3 Millionen solcher Messungen und täglich kommen über 1000 dazu.
- Wegen der Menge der Profile und weil zur Berechnung des Wasserdampfs aufwendige Strahlungstransportrechnungen nötig sind, ist der Rechenzeitbedarf groß.

Wasser gibt es in der Atmosphäre nicht nur als Regen, Schnee und in Form von Wolkentröpfchen und Eiskristallen, sondern auch als Wasserdampf. Der ist durchsichtig, das heißt wir können ihn mit unseren Augen nicht sehen. Trotzdem spielt er für die Strahlung in unserer Atmosphäre eine wichtige Rolle: Er lässt das sichtbare Licht, das von der Sonne kommt, ungehindert zum Boden durch, absorbiert aber viel Strahlung im infraroten Bereich und damit die von der Erde emittierte Wärmestrahlung. Das macht den Wasserdampf zum wichtigsten natürlichen Treibhausgas in unserer Atmosphäre. Den meisten Wasserdampf findet man nahe des Erdbodens, aber selbst oberhalb der Wolken gibt es noch Wasserdampf. Modellstudien haben gezeigt, dass er auch in diesem Höhenbereich, der oberen Troposphäre und der unteren Stratosphäre, einen deutlichen Einfluss auf unser Klima am Boden hat. Wie groß dieser Einfluss genau ist, hängt dabei von der Konzentration des Wasserdampfes ab.

Aber wie viel Wasserdampf ist dort genau?

Das variiert je nach Ort und Zeit stark. Deshalb ist es ein Ziel des DFG Projektes SHARP (engl.: Stratospheric Change and its Role for Climate Prediction) [1] zu einem besseren Verständnis der Verteilung und der zeitlichen Änderung des Wasserdampfgehaltes in der Atmosphäre und dessen Wirkung auf das Klima beizutragen. Dazu braucht man

möglichst globale, regelmäßige und dichte Messungen des Wasserdampfs. Solche Messungen oberhalb der Wolken gibt es vor allem von Satelliten. Wir arbeiten daran, im Rahmen von SHARP eine Zeitserie der zonal gemittelten Wasserdampfkonzentration aus Messungen von SCIAMACHY (engl.: Scanning Imaging Absorption spectrometer for Atmospheric CHartography) seit August 2002 bereitzustellen.

Was ist SCIAMACHY? SCIAMACHY ist ein Spektrometer auf dem europäischen Satelliten ENVISAT, der die Erde seit 2002 14.4 Mal jeden Tag umrundet [2]. Um Informationen aus verschiedenen Höhen in der Atmosphäre zu bekommen, sind Limb-Messungen von SCIAMACHY besonders gut geeignet. Bei diesem Messmodus schaut das Instrument durch die Atmosphäre über den Erdboden hinweg in Richtung des Weltraumes. Dabei wird für Höhenstufen von jeweils 3.3 km ein Spektrum des gestreuten Sonnenlichts gemessen. Aus diesen Spektren berechnen wir Wasserdampfprofile im Höhenbereich zwischen 11 km und 23 km.

Wie kommt man von der gemessenen Strahlung zu Wasserdampfprofilen? Dazu werden die charakteristischen Absorptionen der Wassermoleküle im infraroten Bereich des Spektrums genutzt. SCIAMACHY misst das gestreute Sonnenlicht in der Atmosphäre. Auf dem Weg zum Instrument absorbiert der Wasserdampf einen Teil der Strahlung, so dass man Absorptionslinien im gemessenen Spektrum sieht. Vereinfacht gesagt, verrät die Position der Linien, welche Gase sich in der Atmosphäre befinden. Die Linienstärke spiegelt die Konzentration der jeweiligen Gase wieder. Allerdings spielen auch noch andere atmosphärische Größen, zum Beispiel Druck und Temperatur, eine Rolle. Deshalb kann man nicht direkt aus den Spektren auf die Wasserdampfkonzentration schließen. Um alle Einflüsse richtig berücksichtigen zu können, berechnen wir mit dem Strahlungstransportmodell SCIATRAN aus einer gegebenen Atmosphärenzusammensetzung die Strahlung, die SCIAMACHY messen würde. Mit Hilfe inverser mathematischer Methoden wird dann in einem iterativen Verfahren das am besten zur Messung passende Wasserdampfprofil ermittelt [3].

Was ist das Besondere an den Wasserdampfprofilen aus SCIAMACHY Messungen? Diese Messungen sind mit wenigen Unterbrechungen seit August 2002 verfügbar. Das ist im Vergleich zu vielen anderen Satellitenmissionen bereits ei-

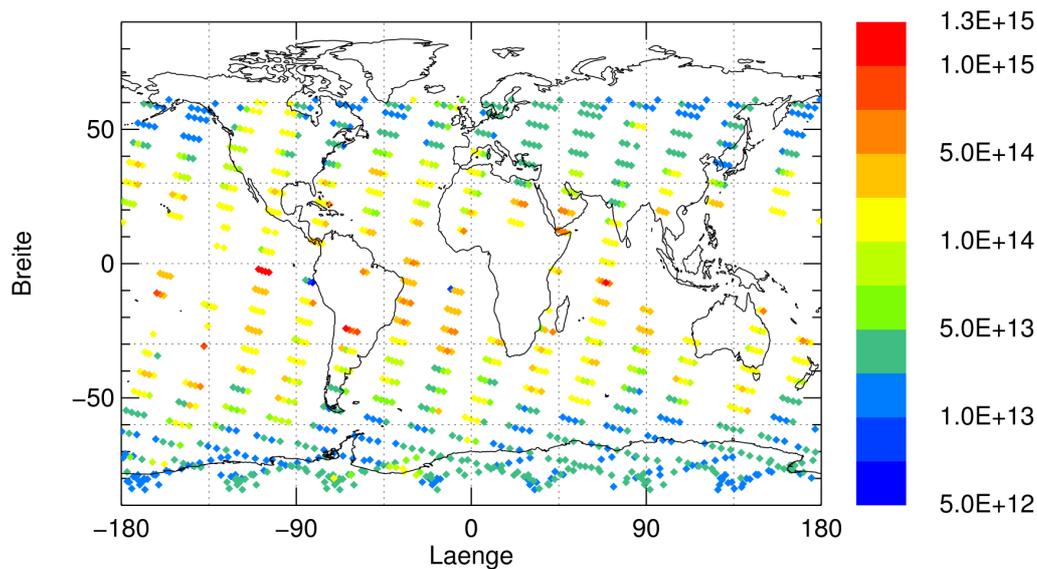


Abbildung 1: Wasserdampf [$\text{molec}/\text{cm}^{-3}$] in 12 km Höhe am 02. Januar 2008 aus SCIAMACHY Messungen

ne sehr lange, konsistente Zeitreihe, die auch in den nächsten Jahren weiter fortgesetzt werden soll. Der gesamte SCIAMACHY Datensatz umfasst bereits ca. 3 Millionen Profile, die für die Berechnung des Wasserdampfes geeignet sind, und jeden Tag kommen meist über 1000 neue dazu. Abbildung 1 zeigt alle berechneten Wasserdampfkonzentrationen aus den SCIAMACHY Messungen am 2. Januar 2008 auf einer Höhe von 12 km. Man erkennt die höheren Wasserdampfkonzentrationen in den Tropen und Subtropen im Vergleich zu höheren Breiten, aber auch Variationen auf einzelnen Breitenkreisen. Lücken gibt es, wenn hohe Wolken eine Auswertung der Daten verhindern, und durch die Lage der Messpositionen von SCIAMACHY: Sie sind so gewählt, dass jeweils innerhalb von 6 Tagen die gesamte Erde betrachtet wird.

Warum ist die Berechnung dieser Wasserdampfprofile besonders aufwendig? Um die Wasserdampfkonzentrationen bestimmen zu können, muss Mehrfachstreuung in der Atmosphäre berücksichtigt werden. Dazu sind Rechnungen auf einem dichten Gitter nötig. Gleichzeitig muss ein relativ breiter Spektralbereich abgedeckt werden, um genügend Informationen über die Wasserdampfabsorptionen zu erhalten. Dazu kommt die ungeheure Datenmenge.

Zur Zeit können wir nur etwa jeden siebten Tag der Messungen auswerten. Ziel ist aber, möglichst

bald die Wasserdampfkonzentrationen für den gesamten Messzeitraum zu bestimmen, um mehr über den Wasserdampf in der Atmosphäre und seine Auswirkung auf das Klima lernen zu können.

Mehr zum Thema

1. www.fu-berlin.de/sharp/
2. Bovensmann, H., Burrows, J. P., Buchwitz, M., Frerick, J., Noël, S., Rozanov, V. V., Chance, K. V., and Goede, A. P. H.: SCIAMACHY: Mission objectives and measurement modes, *J. Atmos. Sci.*, 56, 127–149, 1999
3. Rozanov, A. and Weigel, K. and Bovensmann H. and Dhomse, S. and Eichmann, K.-U. and Kivi, R. and Rozanov, V. and Vömel, H. and Weber, M. and Burrows, J. P.: Retrieval of water vapor vertical distributions in the upper troposphere and the lower stratosphere from SCIAMACHY limb measurements: www.atmos-meas-tech-discuss.net/3/4009/2010/amtd-3-4009-2010.html, *Atmos. Meas. Tech. Discuss.*, 3, 4009-4057, 2010

Förderung

DFG-Forschergruppe FOR 1095 "SHARP"

Unstructured Mesh Ocean Modelling

Global and regional ocean-ice simulations using FESOM: Toward applications with variable resolution and regional focus

P. Lemke, Q. Wang, D. Sidorenko, S. Danilov, J. Schröter, L. Nerger, Alfred Wegener Institute for Polar and Marine Research

Abstract

- The Finite Element Sea ice-Ocean Model (FESOM) developed at AWI provides the possibility to simulate ocean and sea-ice on global unstructured meshes with a regional focus. Fine-scale processes can be studied with less computational resources than in traditional models using fine resolution everywhere.
- A global FESOM setup is validated using climatology forcing. The model results compare well with those from other models driven by the same forcing.
- The formation process of Antarctic Bottom Water in the western Ross Sea is studied using FESOM with variable resolution. Tides can increase the bottom water outflow rate by 70% in our model simulations.

Simulations with global sea ice-ocean models are widely used to assist in understanding climate dynamics. The Finite Element Sea ice-Ocean Model (FESOM) developed at AWI is a novel ocean general circulation model allowing one to simulate ocean and sea-ice on unstructured meshes with variable resolution. Local mesh refinement without nesting and a realistic representation of coastlines and bottom topography is possible with FESOM. It consists of the Finite Element Ocean Model (FEOM) coupled with a finite element sea ice model [1] [2].

Since FESOM numerics are essentially different from those of regular grid models, model intercomparison studies are essential to assess the long-term performance of FESOM against other models well approved by the oceanographic community. The feedbacks from such studies can help to further improve the model with respect to both numerics and parameterizations. In this project we validated the model in a global setup under the CORE (Coordinated Ocean-ice Reference Experiments) framework, as it provides a common reference point for research groups developing and analyzing global ocean-ice models. The model was run for 500 years under repeating normal year climatology forcing. The model results agree well with previous studies in terms of hydrography, sea ice, heat and volume transport, and their long term

trend as well [3]. It is demonstrated that FESOM has become a reliable tool for studying the ocean general circulation.

In the ocean it frequently happens that localized, small-scale dynamics have impact on the large or even global scale. A very fine resolution is usually required to properly resolve them in numerical simulations. To include their effects on the large or even global scale it is computationally beneficial to use unstructured mesh models, which allow for variable resolution with focus on these particular regions. Many regional studies performed thus far have been using regional configurations with prescribed open boundaries. Models formulated on unstructured meshes overcome this difficulty by seamlessly embedding the refined regions in a larger domain or even in the global ocean. Besides, many important geometric and bathymetric features in the ocean can only be resolved if a regional focus is allowed.

The Antarctic Bottom Water (AABW) is an important ingredient of the global meridional overturning circulation. It feeds the coldest part of the global bottom water and spreads at the sea floor over roughly twice the area covered by the North Atlantic Deep Water (NADW). AABW forms mainly in a few regions in the Southern Ocean. Here we exploit FESOM to study the bottom water formation process in the western Ross Sea. Simulating overflows in the western Ross Sea requires a very high mesh resolution. This is not only due to the smallness of the baroclinic Rossby radius in this region (~ 6 km), but also because of the need to resolve small topographic features which can be important for both steering and mixing effects. High mesh resolution is also required to adequately simulate the plume water over steep continental slopes (with slopes larger than 0.1 in many regions). A mesh with 0.5 km horizontal resolution in a coarse resolution (30 km) setup is used in this work. The research focuses on the tidal impact on overflow dynamics and bottom water production rate [4].

The overflow from the western Ross Sea exhibits pronounced variability at both daily and spring-neap tidal time scales. Tides increase mixing over both the outer shelf and upper slope there. Plume jets are shaped by tidal currents at a bathymetric bend west of the mouth of the Drygalski Trough, descending rapidly and supplying the bottom water (see Figure 1). A fraction of shelf water remains over the shelf and propagates westward from the Ross Sea, but it does not contribute significantly to

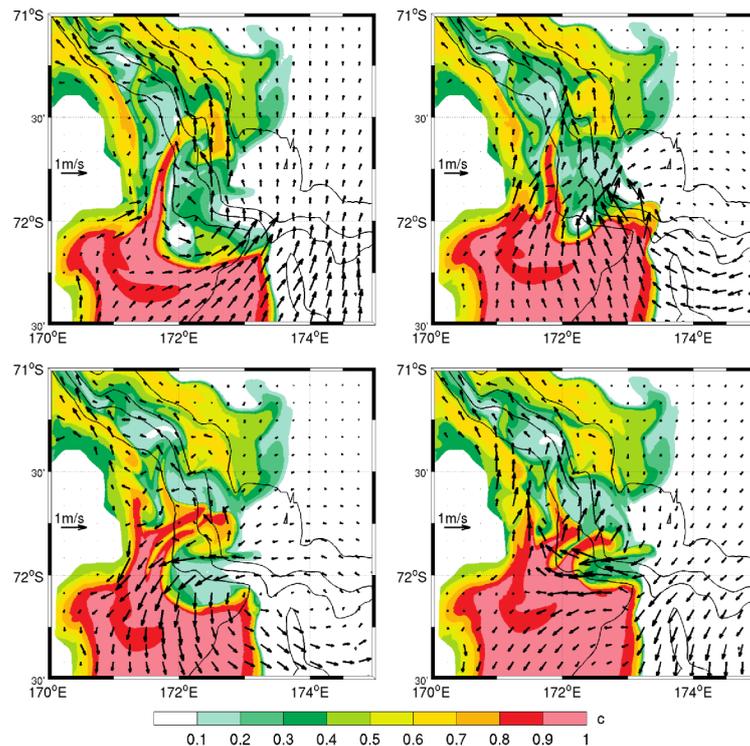


Figure 1: Four snapshots of bottom passive tracer concentration at spring tides with 6h intervals (clockwise). The passive tracer was injected into the high salinity shelf water (HSSW), the source of the overflow water. It is restored to one inside HSSW over the inner shelf and is set to zero anywhere else at the beginning of the simulation. Reduction of concentration along the plume path is due to mixing of HSSW with ambient warm water. The black arrows indicate the near bottom velocity. These snapshots show the tidal advection effect on the overflows.

bottom water formation because of energetic mixing over the upper slope. Compared to a simulation without tidal forcing, tides (with the major K1 and O1 constituents) increase the outflow rate over the continental slope off Cape Adare by about 70%. A set of sensitivity experiments show that the rate of bottom water production is not a monotonic function of the tidal currents amplitude. Tidal forcing with intermediate strength leads to the most efficient bottom water formation.

FESOM simulations require a massively parallel environment and would hardly be possible without the support from HLRN. Our future work will need larger meshes and more computational resources. We hope that it will also benefit from the HLRN assistance.

More Information

1. Wang, Q., S. Danilov, and J. Schröter (2008), Finite element ocean circulation model based on triangular prismatic elements, with application in studying the effect of vertical discretization, *J. Geophys. Res.*, 113, C05015, doi:10.1029/2007JC004482.

2. Timmermann, R., S. Danilov, J. Schröter, C. Böning, D. Sidorenko, and K. Rollenhagen (2009), Ocean circulation and sea ice distribution in a finite element global sea ice-ocean model, *Ocean Modell.* 27, 114-129.
3. Sidorenko, D., Q. Wang, S. Danilov, and J. Schröter (2010), FESOM under Coordinated Ocean-ice Reference Experiment forcing, *Ocean Dynamics*, submitted.
4. Wang, Q., S. Danilov, H. H. Hellmer, and J. Schröter (2010), Overflow dynamics and bottom water formation in the western Ross Sea: Influence of tides, *J. Geophys. Res.*, 115, C10054, doi:10.1029/2010JC006189.

Funding

Helmholtz Association

Steuert die Hebung von Gebirgen den Rückzug des tropischen Regenwaldes in Afrika?

Die Entwicklung der tropischen Regenzone im späten Neogen

G. Jung, M. Prange, M. Schulz, DFG-Forschungszentrum / Exzellenzcluster "Der Ozean im System Erde" (MARUM), Universität Bremen

Kurzgefasst

- In diesem Projekt [1] werden Modellexperimente zur Abschätzung der Niederschlags- und Vegetationsentwicklung in Afrika vor 2-10 Millionen Jahren durchgeführt.
- Der Schwerpunkt liegt dabei auf dem Einfluss tektonischer Faktoren wie veränderter Ozeanpassagen und der Auswirkung von Gebirgshebungen.
- Das zur Modellierung verwendete Modell ist das gekoppelte parallele *Community Climate System Model* (Version 3), welches Atmosphäre, Ozean, Meereis, Landoberfläche und Vegetationsbedeckung simuliert.
- Erste Ergebnisse zeigen einen starken Einfluss der Hebung Ost- und Südafrikas, sowie einen schwächeren, gegensätzlichen Einfluss der Hebung von Himalaya und Tibetischem Plateau auf Niederschlag und Vegetationsverteilung in Afrika.

Die Entwicklung aufrecht gehender Hominiden wird in Zusammenhang gebracht mit dem Rückgang des afrikanischen tropischen Regenwaldes vor 8 bis 2 Millionen Jahren [2].

Neben Gebirgshebungsprozessen gelten Öffnungen und Schließungen von Ozeanpassagen als wichtige tektonische Prozesse, die einen nachhaltigen Einfluss auf das Klimasystem und in Folge auch auf die Vegetationsbedeckung haben [3]. Gebirgshebungen verändern zum Beispiel die regionale Niederschlagsverteilung durch Stau- und Abschattungseffekte, haben aber auch weitreichendere Folgen für den Wärme- und Feuchtetransport in der Atmosphäre. Zudem können hohe Gebirgszüge die atmosphärische Zirkulation weltweit bis in große Höhen beeinflussen.

Die topographische Hebung Ostafrikas wird als wichtiger Antriebsmechanismus für die ostafrikanische Klima- und Vegetationsentwicklung angesehen. Zudem hat diese Hebung möglicherweise einen maßgeblichen Einfluss auf den asiatische Monsun.

Die Hebung des Himalayas und des Tibetischen Plateaus und der damit verbundene Klimawandel

wird häufig als klassisches Beispiel für die Verbindung von Tektonik und Klima genannt. So haben frühere Modellstudien gezeigt, dass die Hebung des Tibetischen Plateaus einen erheblichen Einfluss auf das asiatische Monsun-System hatte.

Auch eine verstärkte Hebung der Anden wirkt sich nicht nur auf das Klima Südamerikas aus. Nachdem die Anden das einzige Hindernis der Strömung auf der Südhalbkugel und zweithöchstes Plateau der Erde darstellen beeinflussen sie sehr stark den globalen Wärme- und Feuchtetransport. Ähnlich globale Auswirkungen werden für die Hebung der Rocky Mountains und des Colorado Plateaus vermutet.

Öffnungen und Schließungen von Ozeanpassagen wiederum beeinflussen zunächst die Ozeanzirkulation und damit den Wärmetransport des Ozeans von den Tropen zu den Polen. Über den Wärmeaustausch zwischen Ozean und Atmosphäre hat dies dann auch einen starken Einfluss auf globale und regionale atmosphärische Zirkulation und Niederschlagsverteilung.

Beispielsweise wirkte sich die Entwicklung der Landbrücke zwischen Nord- und Südamerika (zwischen 13 und 2,6 Millionen Jahren) stark auf die globale Klimadynamik aus [4]. Durch die Schließung des Seewegs kam es zu einer verringerten Durchmischung atlantischer und pazifischer Wassermassen und einer Verstärkung der großskaligen Umwälzzirkulation des Atlantiks. Die Stärke dieser Zirkulation bestimmt unter anderem das Ausmaß der sommerlichen Nordwärtsverlagerung des tropischen Regengürtels und somit auch die Niederschlagsverteilung von Zentralafrika bis in den Sahel.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die vorangehend genannten Prozesse alle nicht nur einen Einfluss auf das regionale Klimageschehen haben, sondern sich mit großer Wahrscheinlichkeit auch auf die globale Klimadynamik auswirken.

Um verschiedene Einflussfaktoren sowie mögliche Rückkopplungsmechanismen im Klimasystem und vor allem die Auswirkungen auf die Vegetationsbedeckung in Afrika im Zeitraum des späten Miozäns und frühen Pliozäns (vor ca. 2-10 Millionen Jahren) abzuschätzen wurden verschiedene Sensitivitätsläufe mit Hilfe eines globalen, gekoppelten Klimamodells durchgeführt. Es wird das parallele *Community Climate System Model* (Version 3) verwendet. Dieses Modell simuliert in gekoppelten Teilmodellen Atmosphäre, Ozean, Meereis

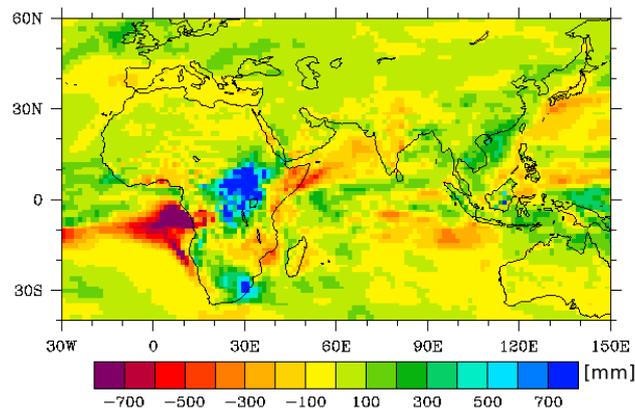


Abbildung 1: Effekt der Hebung von Ost- und Südafrika auf die jährliche Niederschlagsmenge [mm]. Positive Werte zeigen eine Niederschlagszunahme mit der Gebirgshebung an, negative Werte eine Niederschlagsabnahme.

und Landoberflächenprozesse inklusive der Vegetationsbedeckung. Dabei werden unter anderem der Einfluss von Gebirgshebungsprozessen (Tibet/Himalaya, Rocky Mountains/Colorado Plateau, Anden, Ostafrika,), der Einfluss geänderter Ozeanpassagen und der Einfluss einer erhöhten atmosphärischen Kohlendioxidkonzentration modelliert.

Erste Simulationsergebnisse zweier Modellexperimente, welche zum einen die Auswirkungen der Hebung des Himalayas sowie des Tibetischen Plateaus und zum anderen die Folgen der Hebung Ost- und Südafrikas beschreiben, zeigen entgegengesetzte Auswirkungen auf das Niederschlagsverhalten sowie die Vegetationsbedeckung Afrikas.

Die Hebung des Tibetischen Plateaus sowie des Himalayas bewirkt erwartungsgemäß eine Verstärkung des asiatischen Monsuns. Daneben zeigt sich dabei auch eine deutliche Abnahme der Niederschlagsmengen über Zentralafrika sowie eine Zunahme über Ostafrika. Für die Vegetationsbedeckung bedeutet dies eine leichte Abnahme des Waldanteils in Zentralafrika bei gleichzeitiger Zunahme der Bedeckung mit Gräsern und Buschland. Die Hebung Ost- und Südafrikas hat einen stärkeren Einfluss auf das Niederschlagsgeschehen sowie die Vegetationsbedeckung Afrikas. Die Anwesenheit der Berge führt zu einer Verstärkung der äquatorialen Passatwinde über dem tropischen Atlantik, was dort zu einer höheren Verdunstung und einer Erhöhung des Feuchtetransportes mit dem Sommermonsun nach Zentralafrika führt. Dieser Effekt wiederum bewirkt dort eine Erhöhung der Niederschlagsmenge (vergleiche Abbildung 1). Über Ostafrika kann hingegen eine Abnahme der Niederschläge beobachtet werden, die mit einer Abnahme des Feuchtetransports vom Indischen Ozean nach Ostafrika in Zusammenhang gebracht

werden kann. Die genannten Niederschlagsunterschiede bedeuten für Zentralafrika eine Zunahme des Waldanteils bei gleichzeitiger starke Abnahme von Gräsern und Buschwerk. Im relativ trockenen Teil Ostafrikas zeigt sich durch die Abnahme der Niederschläge vor allem eine Abnahme der Bedeckung mit Gräsern und Buschwerk.

Die bisherigen Experimente zeigen gegensätzliche Änderungen in Vegetationsbedeckung und Niederschlag. Weitere Modellexperimente und die gleichzeitige Berücksichtigung der einzelnen tektonischen Änderungen in einer einzelnen Modellsimulation werden es ermöglichen, die Wichtigkeit der unterschiedlichen Einflussfaktoren für die Vegetationsentwicklung zur Zeit der Entwicklung der aufrecht gehenden Hominiden abzuschätzen.

Mehr zum Thema

1. www.marum.de/en/Page8307.html
2. Die Frühzeit des Menschen. Der Weg zum Homo sapiens. C. H. Beck, 5., vollständig neubearbeitete und ergänzte Auflage, München 2008 (C.H.Beck Wissen)
3. Hay, W.W. (1996), Tectonics and Climate. Geol. Rundsch., V.85, S. 409-437
4. Steph, S., R. Tiedemann, M. Prange, J. Groeneveld, D. Nürnberg, L. Reuning, M. Schulz, and G. Haug (2006), Changes in Caribbean surface hydrography during the Pliocene shoaling of the Central American Seaway. Paleoceanography, 21, PA4221, doi:10.1029/2004PA001092

Förderung

DFG-Forschungszentrum 15 und DFG-Exzellenzcluster 309

Tsunami-Simulation

Modellierung und Simulation von Tsunami-Ausbreitung und -Überflutung

W. Hiller, N. Rakowsky, S. Harig, A. Fuchs, Zentrum für Technomathematik, Universität Bremen und Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung, Bremerhaven

Kurzgefasst

- Simulation der Tsunamiausbreitung und -Überflutung u.a. für das indonesische Tsunami-Frühwarnsystem
- Innovatives Finite-Elemente-Modell mit einem Rechengitter, das die Geografie besonders gut auflöst.
- MPI-paralleler Ansatz zur Steuerung OpenMP-paralleler Modellläufe zu Parameterstudien und somit optimale Nutzung der Rechnerarchitektur des HLRN.

Die Tsunami-Arbeitsgruppe am Alfred-Wegener-Institut ist Teil des BMBF-Projekts „German-Indonesian Tsunami Early Warning System GITEWS“, das nach dem verheerenden Tsunami am 26.12.2004 im Indischen Ozean ins Leben gerufen wurde. Gemeinsam mit deutschen und indonesischen Projektpartnern (u.a. GFZ, DLR) wird in Jakarta ein Tsunami-Warnzentrum installiert. Über Lehrveranstaltungen, Praktikums- sowie Abschlussarbeiten und Dissertationen ist die Tsunami-Modellierung und -Simulation mit dem Zentrum für Technomathematik der Universität Bremen verbunden.

Im Entwicklungsprojekt am HLRN wird das im Rahmen von GITEWS entstandene Modell zur Tsunami-Ausbreitung, TsunAWI (Referenzen siehe 1,2), weiter entwickelt. Damit können für das Warnzentrum in Jakarta als auch für andere Gebiete Tsunami-Szenarien mit verbesserter Modellphysik erstellt werden.

Im indonesischen Warnzentrum dient eine Datenbank mit prototypischen Szenarien sowohl der Risikoanalyse zur Überflutungsgefährdung indonesischer Küstenabschnitte als auch der schnellen Vorhersage im Warnfall. Erfasst das Sensor-System ein Seebeben, werden anhand der Messdaten Tsunami-Szenarien aus der Datenbank gewählt und ein wahrscheinlicher Verlauf des Tsunamis bestimmt. So kann rechtzeitig mit der Evakuierung der Bevölkerung in den betroffenen Küstenregionen begonnen werden. Wie wichtig GITEWS ist, hat zuletzt am 25.10.2010 das untermeerische Beben der Stärke 7,8 vor der Küste von Sumatra gezeigt.

TsunAWI zeichnet sich u.a. durch den Finite-Elemente-Ansatz aus, der es erlaubt, mit unstrukturierten Rechengittern zu arbeiten, die auch komplexe Bathymetrie und Topographie gut darstellen können. So kann im tiefen Ozean rechenzeitsparend mit einer groben Auflösung gerechnet werden, und zugleich in Gebieten von besonderem Interesse und im sensiblen Flachwasser- und Küstenbereich mit sehr feiner Auflösung.

Das Programmpaket TsunAWI wird ständig weiterentwickelt. Aktuell wird unter anderem das zugrundeliegende, auf den Flachwassergleichungen basierende mathematisch-physikalische Modell durch Berücksichtigung nichtlinearer Advektion, nicht-hydrostatischer Korrekturterme und Interaktion mit Tiden verfeinert und verbessert. Eine weitere Aufgabe ist die Durchführung von Vergleichsstudien auf Grundlage immer umfangreicherer realer Datensätze zur Anpassung von Parametern wie Reibungskoeffizienten. Die Simulationsrechnungen für ein derart komplexes Modell können im notwendigen Umfang nur auf Höchstleistungsrechnern wie dem HLRN-II durchgeführt werden.

Bisher ist TsunAWI OpenMP-parallel, d.h. pro Modelllauf kann nur ein Rechenknoten genutzt werden, dessen Processorcores gemeinsam arbeiten. Da umfangreiche Parameterstudien gerechnet werden müssen, verteilt und koordiniert ein MPI-Skript mehrere Läufe gleichzeitig auf verschiedene Rechenknoten, so dass die Rechner-Ressourcen optimal genutzt werden. Um künftig noch komplexere Modellphysik auf noch feineren Rechengittern simulieren zu können, ist die Erweiterung von TsunAWI auf hybride Parallelisierung (eine Kombination aus OpenMP und MPI) oder ein vollständiger Umstieg auf MPI geplant.

Umgekehrt werden zudem Sensitivitätsstudien durchgeführt, die zeigen sollen, wie weit Modell und Rechengitter vereinfacht werden können, um mit schnellen und dennoch realistischen Rechnungen im Warnfall die Vorhersage präzisieren zu können.

Mit TsunAWI werden auch Simulationen zu anderen Seegebieten, etwa dem Mittelmeer und dem Pazifischen Ozean, und zu untermeerischen Landrutschen als Tsunami-Auslöser gerechnet. Im Rahmen von GITEWS ist die Ausweitung der Szenarien-Datenbank auf den gesamten Indischen Ozean und die nordöstlichen Seegebiete Indonesiens geplant.

Im Berichtszeitraum wurde zunächst der OpenMP-parallele Programmcode TsunAWI optimiert,

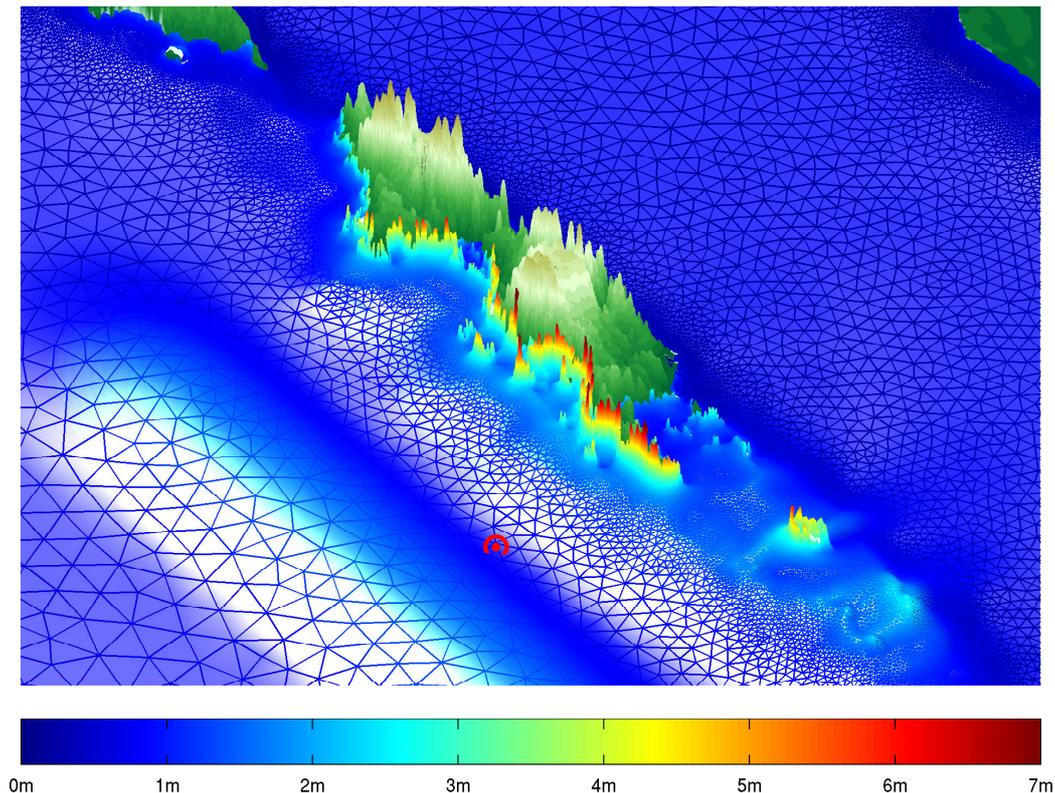


Abbildung 1: Rechengitter und Maximale Wellenhöhe (im Vergleich zur Topographie 25-fach überhöht) des a priori erstellten Szenarios aus der Tsunami-Datenbank, das dem Tsunami am 25.10.2010 vor den indonesischen Pagai-Inseln am nächsten kommt. Rot markiert ist das gemessene Epizentrum, die Bebenstärke betrug 7,8. Das Rechengitter weist im tiefen Ozean Kantenlängen bis 15km auf, an den Küsten beträgt die Auflösung ca. 100m.

indem die Variablen im unstrukturierten Gitter entlang einer Space-Filling Curve sortiert wurden. Damit liegen im Gitter benachbarte Werte auch im Hauptspeicher des Rechners möglichst nah zusammen, so dass die Datenlokalität auf allen Ebenen der Speicherhierarchie garantiert wird; sowohl in OpenMP-parallelen Schleifen als auch auf Einzprozessorebene im Cache. Die Rechenzeit pro Szenario konnte so mehr als halbiert werden.

In der Anwendung lag ein Fokus auf verbesserten Gittern, die die Küstengebiete und insbesondere die Umgebung von Gezeitenpegeln und Bojen noch genauer auflösen. In Zusammenarbeit mit der GFZ wurde der Einfluss verschiedener Ansätze zur Geometrie der Bruchzone prototypischer Erdbeben untersucht. Hintergrund waren hier vor allem die Erkenntnisse aus der Analyse des Mentawai-Bebens vom 25.10.2010. Zudem bieten die Messwerte realer Tsunamis die Möglichkeit, Parameter wie Reibungs- und Viskositätskoeffizienten zu kalibrieren. Mit all diesen Verfeinerungen wird die Vorhersagekraft weiter verbessert.

Mehr zum Thema

1. S. Harig, C. Chaeroni, W.S. Pranowo, J. Behrens (2008). Tsunami Simulations on several scales: Comparison of approaches with unstructured meshes and nested grids, *Ocean Dynamics*, 58(5-6), 429-440., doi:10.1007/s10236-008-0162-5 .
2. A. Androsov, S. Harig, J. Behrens, J. Schröter, S. Danilov (2008). Tsunami Modelling on Unstructured Grids: Verification and Validation, *Proceedings of the International Conference on Tsunami Warning (ICTW)*, Bali, Indonesia.

Förderung

Bundesministerium für Bildung und Forschung

Wie stabil ist das ozeanische Förderband?

Atmosphärische Feuchtetransporte und thermohaline Zirkulation: Untersuchung möglicher Rückkopplungsmechanismen für abrupte Klimaschwankungen

M. Prange, H. Liu, M. Schulz, Fachbereich Geowissenschaften und Zentrum für Marine Umweltwissenschaften (MARUM), Universität Bremen

Kurzgefasst

- Der Export von Wasserdampf aus dem tropischen Atlantik in den Pazifik über Nordostpassate spielt eine maßgebliche Rolle für die Aufrechterhaltung der nordatlantischen Tiefenwasserbildung und somit der globalen Ozeanzirkulation. Änderungen in diesem Feuchtetransport können daher einen wichtigen Rückkopplungsmechanismus für abrupte Klimaschwankungen darstellen.
- Die Variabilität tropischer Wasserdampftransporte während der letzten 20 000 Jahre wird mit der räumlich hochaufgelösten Version eines komplexen Klimamodells untersucht.
- Die Modellsimulationen sollen Aufschluss darüber geben, wie sich Änderungen der Ozeanzirkulation auf den tropischen Wasserkreislauf auswirken und ob Feuchtetransportänderungen einen positiven oder negativen Rückkopplungsmechanismus für Klimaschwankungen darstellen.

Die immensen Regenmengen über dem tropischen Ostpazifik können dem atmosphärischen Wasserdampftransport durch Nordostpassate über die zentralamerikanische Landbrücke zugeschrieben werden. Für das heutige Klima wird dieser Wasserdampfexport vom Atlantik in den Pazifik auf $0,1\text{--}0,3$ Millionen $\text{m}^3 \text{s}^{-1}$ geschätzt. Dieser Feuchtfluss ist mitverantwortlich für die gegenüber dem Pazifik relativ hohen Salzgehalte des Atlantiks. Er ist somit ein wichtiger Antrieb für die globale Ozeanzirkulation, die ein wesentliches Element im Klimasystem der Erde darstellt.

Die globale Ozeanzirkulation kann man sich als ein weltumspannendes Förderband vorstellen, das große Mengen Wärme und Salz transportiert. Im nördlichsten Nordatlantik sinkt Wasser, das aufgrund seiner niedrigen Temperatur und seines relativ hohen Salzgehalts eine große Dichte besitzt, in die Tiefe ab. Dieses nordatlantische Tiefenwasser strömt 2000 bis 4000 m unterhalb der Oberfläche in den Südatlantik und von dort ins Südpolarmeer, den Indischen Ozean und den Pazifik. Infolge von Vermischungsprozessen und Windeinwirkung quillt das Tiefenwasser allmählich wieder auf und strömt an der Oberfläche zurück in Richtung Nordatlantik. Aufgewärmt von

der subtropischen und tropischen Sonneneinstrahlung transportiert die Ozeanzirkulation rund 1 Petawatt Wärme in den Nordatlantik, was der 2700-fachen Leistung aller weltweit existierenden Kernreaktorblöcke entspricht. Wenn dieses ozeanische Förderband ins Stocken gerät, sind weitreichende Konsequenzen für das Klima zu erwarten. Die Achillesferse des ozeanischen Förderbandes befindet sich im nördlichen Nordatlantik, dort wo Tiefenwasser gebildet und die Zirkulation in Gang gesetzt wird. Gelangen große Mengen Süßwasser in diese Region, verringert sich die Dichte des Meerwassers, was das Absinken in die Tiefe schwächt – das Förderband wird gebremst. In der erdgeschichtlichen Vergangenheit ist dies häufiger geschehen, insbesondere während Eiszeiten als schmelzende Eisberge die Tiefenwasserbildung zum Erliegen brachten. Für die Zukunft sind ähnliche Prozesse zu befürchten, wenn sich der hydrologische Kreislauf beschleunigt oder die grönländischen Eismassen schmelzen.

Obwohl die Bedeutung tropischer Wasserdampftransporte für die Aufrechterhaltung des ozeanischen Förderbandes in der Klimaforschung akzeptiert ist, ist wenig über zeitliche Variationen der Feuchtflüsse bekannt. Eine der entscheidenden Fragen hierbei ist: Wirkt der Wasserdampfexport vom tropischen Atlantik in den Pazifik als positiver oder negativer Rückkopplungsmechanismus auf Änderungen der Ozeanzirkulation? Positiver Rückkopplungsmechanismus bedeutet hierbei: Schwächt sich die Zirkulation ab, verringert sich der atlantische Wasserdampfexport in den Pazifik, was den Salzgehalt im Atlantik weiter absenkt und die ursprüngliche Störung der Zirkulation verstärkt. Ein negativer Rückkopplungsmechanismus wäre hingegen mit einer Verstärkung des Wasserdampfexports verbunden.

Bislang existieren lediglich drei paläozeanografische Studien, die der Abschätzung vergangener Änderungen im Feuchtetransport gewidmet sind (siehe Referenzen in [1]). In diesen Studien wurden Meeresoberflächensalzgehalte im tropischen Ostpazifik anhand mariner Sedimentkerndaten rekonstruiert. Dabei wurden Salzgehaltszunahmen (relativ zum tropischen Atlantik) einer Abnahme des Wasserdampftransportes über Zentralamerika zugeschrieben, während Salzgehaltsabnahmen als Feuchtetransportzunahmen interpretiert wurden. Hinsichtlich dieser Interpretation zeigen die drei Studien allerdings kein einheitliches Ergebnis. Für Heinrich-Stadial 1 (vor ca. 15 000–17 000

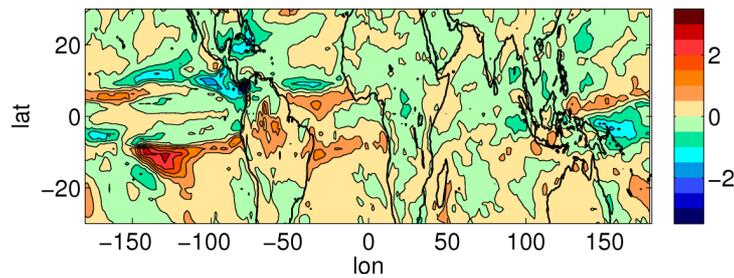


Abbildung 1: Tropische Niederschlagsanomalien im Jahresmittel (in mm/d) infolge einer ungefähren Halbierung der Tiefenwasserbildungsrate im Nordatlantik.

Jahren) – einem Intervall mit nachweislich stark abgeschwächter Ozeanzirkulation – deuten zwei der drei Rekonstruktionen auf Salzgehaltzunahmen im tropischen Ostpazifik hin, was als Reduzierung des atlantischen Feuchteexports infolge einer abgeschwächten Ozeanzirkulation gedeutet wurde. Im Gegensatz dazu wurde aus einer dritten Rekonstruktion eine Zunahme der Niederschläge während des Heinrich-Stadials abgeleitet.

Bisherige Modellstudien mit heutigen Randbedingungen, in denen die Ozeanzirkulation durch Süßwassereinträge in den Nordatlantik geschwächt wurde, ergaben eine Zunahme des Wasserdampftransports vom Atlantik in den Pazifik (hauptsächlich durch verstärkte Nordostpassate). Mit eiszeitlichen Randbedingungen können sich die Feuchtetransporte jedoch ganz anders verhalten, wie die Untersuchung von Niederschlagsvariationen in vorhergegangenen Modellstudien unserer Arbeitsgruppe vermuten lässt (vgl. [2]). Welchen Einfluss Eisschilde, verringerte Treibhausgaskonzentrationen und veränderte Erdbahnparameter auf die Variabilität tropischer Feuchtetransporte ausüben, ist nicht bekannt und soll in diesem Projekt systematisch untersucht werden.

Hierzu verwenden wir das komplexe Klimamodell CCSM3 (*Community Climate System Model*, Version 3). Das Klimamodell wurde in den USA am *National Center for Atmospheric Research* in Zusammenarbeit mit dem *Los Alamos National Laboratory* entwickelt. Das Modell wird mit einer horizontalen Auflösung von ca. $1,4^\circ$ für das Atmosphärengitter betrieben, während das Ozeanmodellgitter eine räumlich variable Gitterweite von ca. 1° in zonaler und bis zu $0,3^\circ$ in meridionaler Richtung besitzt. Die vertikale Darstellung des Atmosphärenmodells umfasst 26 Schichten, der Ozean wird mit 40 Niveaus in der Vertikalen diskretisiert. Die relativ hohe räumliche Auflösung ist notwendig, um das komplexe Windsystem in der tropischen Ostpazifikregion adäquat darstellen zu können.

Um zu untersuchen, wie sich Änderungen der Ozeanzirkulation auf den tropischen Wasserkreis-

lauf auswirken und ob tropische Wasserdampftransporte einen positiven oder negativen Rückkopplungsmechanismus darstellen, ist eine Serie von Experimenten geplant. Hierbei wird unter entsprechenden Randbedingungen für verschiedene Klimaereignisse während der letzten 20 000 Jahre jeweils eine Süßwasserstörung in den Nordatlantik eingebracht, um die Tiefenwasserbildung zu reduzieren. Das Referenzexperiment mit vorindustriellen Randbedingungen hinsichtlich Eisschildvolumen, Erdbahnparameter und Treibhausgaskonzentrationen wurde bereits durchgeführt und ist derzeit Gegenstand detaillierter Analysen (Abb. 1).

Inwieweit sich die Ergebnisse dieses Experiments auf eiszeitliche Verhältnisse, wie sie z.B. während Heinrich-Stadial 1 herrschten, übertragen lassen, wird eine der zentralen Fragen sein, die dieses Projekt zu beantworten versucht. Hierdurch wird ein tieferes Verständnis hinsichtlich der Stabilität der globalen Ozeanzirkulation gewonnen. Dieses Verständnis ist nicht nur ausschlaggebend für die Interpretation vergangener Klimaschwankungen, sondern ist auch von wesentlicher Bedeutung im Hinblick auf die Vorhersage zukünftiger Klimaänderungen.

Mehr zum Thema

1. Prange, M., S. Steph, M. Schulz, L. D. Keigwin (2010), Inferring moisture transport across Central America: Can modern analogs of climate variability help reconcile paleosalinity records? *Quaternary Science Reviews*, 29, 1317–1321.
2. Merkel, U., M. Prange, M. Schulz (2010), ENSO variability and teleconnections during glacial climates, *Quaternary Science Reviews*, 29, 86–100.

Förderung

DFG-Schwerpunktprogramm 1266 (Interdynamik)

Der Effekt submesoskaliger Turbulenz auf den Gasaustausch zwischen Ozean und Atmosphäre

C. Eden, KlimaCampus, Universität Hamburg

Kurzgefasst

- Der Ozean ist auf Raumskalen von 50 - 100 km und Zeitskalen von Tagen bis Wochen charakterisiert durch energetische Fluktuationen in Temperatur, Salzgehalt und Geschwindigkeit, den "meso-skaligen Wirbeln".
- Schaut man auf kleinere Skalen von 1 bis 100 km – also auf Skalen kleiner als dem sogenannten Rossbyradius der die meso-skaligen Bewegungsvorgänge charakterisiert – begegnet man ähnlich energetischen turbulenten Vorgängen, der "sub-meso-skaligen" Turbulenz.
- Die sub-meso-skaligen Fluktuationen unterliegen anderer und zum großen Teil noch schlecht untersuchter und verstandener Dynamik
- Es wird allerdings immer klarer, daß die sub-meso-skalige Turbulenz relevant in der oberflächennahen durchmischten Schicht des Ozeans, und daher für den Stoff- und Wärmeaustausch zwischen Ozean und Atmosphäre, ist.
- Es wird in diesem Projekt eine Parameterisierung für diesen Effekt entwickelt und in einem realistischen, hochaufgelösten Modell des Nordatlantiks eingebaut.

Der Ozean ist auf lateralen Skalen von 50 - 100 km und Zeitskalen von Tagen bis Wochen charakterisiert durch starke Fluktuationen in Temperatur, Salzgehalt und Geschwindigkeit. Diese seit einigen Jahrzehnten aus Beobachtungsdaten wohlbekannten turbulenten Bewegungsvorgänge nennt man "meso-skalige Wirbel" und können mit sogenannten "wirbelzulassenden Ozeanmodellen" auch bereits gut simuliert werden (z.B. [1]). Allerdings sind die meso-skaligen Fluktuationen nicht das Ende des turbulenten Spektrums im Ozean: schaut man auf kleinere Skalen von 1 bis 100 km – also auf Skalen kleiner als dem sogenannten Rossbyradius der die meso-skaligen Bewegungsvorgänge charakterisiert – begegnet man ähnlich energetischen turbulenten Vorgängen. Während die meso-skaligen Fluktuationen aber sehr gut durch die quasi-geostrophische Approximation beschrieben werden können, welche seit Jahrzehnten sehr gut untersucht und verstanden ist, unterliegen die sub-meso-skaligen Fluktuationen auf den Skalen kleiner als dem Rossbyradius einer an-

deren Dynamik und sind daher auch wesentlich schlechter untersucht und verstanden.

Erst in letzter Zeit wurde klar, dass sub-meso-skalige turbulente Prozesse in der durchmischten, oberflächennahen Schicht des Ozeans wichtig werden, da sie dort die vertikalen Flüsse von Dichte und gelösten Spurengasen in signifikanter Weise beeinflussen können. Diese Prozesse sind damit von großer Bedeutung für z.B. den Wärmehaushalt und die zukünftige Kohlenstoffaufnahme des Ozeans. Sie werden durch geostrophische und ageostrophische Instabilitätsprozesse erzeugt und beeinflusst, in beckenweiten Ozeanzirkulationsmodellen allerdings gewöhnlich vernachlässigt.

Die sub-meso-skaligen Instabilitätsprozesse führen u.a. zu einer Restratifizierung der durchmischten oberen Deckschicht des Ozeans. Solch ein Prozess ist in Fig. 1 anhand einer idealisierten Modellsimulation dargestellt. Ein periodischer Kanal mit lateraler Ausdehnung von 2×10 km und 300 m Tiefe wurde mit einer Ozeanfront in einer Deckschicht über einer stark stratifizierten Schicht initialisiert. Ein paar Tage nach der geostrophischen Adjustierung bilden sich in der Front wellenartige barokline Instabilitäten, die mit der Zeit anwachsen, zu einer Abflachung der Front führen und dadurch schliesslich zur Restratifizierung der Deckschicht beitragen. Diese Restratifizierung beeinflusst wiederum stark den Gasaustausch des inneren, stratifizierten Teils des Ozeans mit der Atmosphäre.

Um solche sub-meso-skaligen Prozesse und deren Konsequenz auf den Gasaustausch in realistischen Ozeanmodellen aufzulösen, sind allerdings Gitterweiten von $o(100\text{m})$ nötig, welche für eine beckenweite Simulation im Moment und in der nahen Zukunft immer noch unerreichbar scheinen. Andererseits erscheinen sub-meso-skalige Prozesse aber relevant für eine realistische Simulation des Stoff- und Wärmeaustauschs zwischen Ozean und Atmosphäre, i.e. für eine modellbasierte Quantifizierung der gegenwärtigen und zukünftigen Aufnahme wichtiger atmosphärischer Spurengase wie z. B. Kohlenstoff durch den Ozean. Es ist daher ein besseres Verständnis und Repräsentation der sub-meso-skaligen Prozesse in der Deckschicht durch eine geeignete Parameterisierung in den heutigen Ozeanzirkulationsmodellen nötig.

In diesem Projekt soll daher eine solche Parameterisierung entwickelt und in einem existierenden, realistischen Modell des Nordatlantiks, wel-

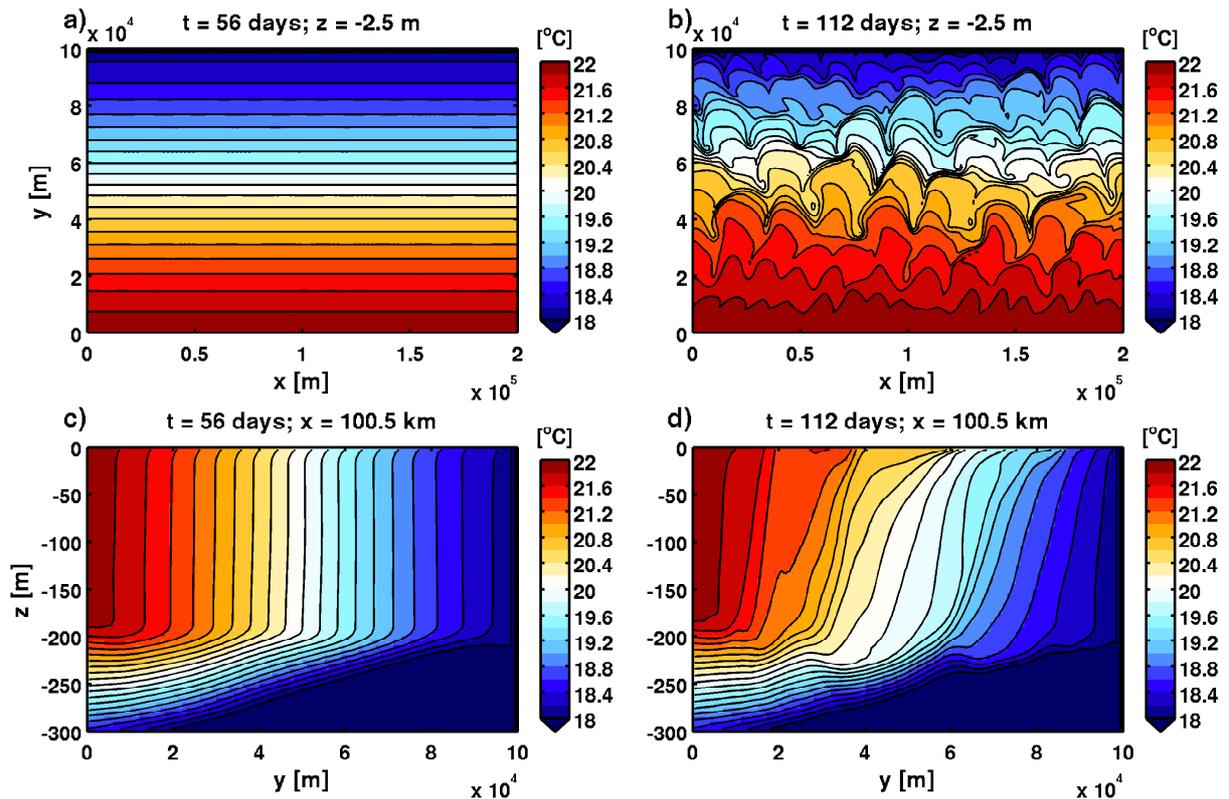


Abbildung 1: Idealierte Modellsimulation einer Frontalzone in der Deckschicht des Ozeans. Ein paar Tage nach der geostrophischen Adjustierung bilden sich in der Front wellenartige barokline Instabilitäten, die mit der Zeit anwachsen, zu einer Abflachung der Front führen und dadurch schliesslich zur Restratifizierung der Deckschicht beitragen. a) und b) zeigt die Temperatur in $^{\circ}\text{C}$ an der Oberfläche zu zwei verschiedenen Zeitpunkten, während c) und d) jeweils einen Schnitt entlang $x = 100\text{ km}$ zeigt. Die horizontale Modellauflösung ist 1 km , die vertikale 5 m .

ches die meso-skalige (aber nicht, da zu teuer, die sub-meso-skalige) Dynamik auflöst, implementiert werden und die Konsequenzen hinsichtlich der Wärmeflüsse und des Gasaustauschs zwischen Ozean und Atmosphäre untersucht werden. Es wird ein Modell des Nordatlantik verwendet ([1]), das mit einer relativ hohen horizontalen Auflösung von ca. 10 km eine realistische Darstellung der großskaligen aber auch der mesoskaligen Zirkulation erlaubt. Ein einfaches, auf Stickstoff basierendes Ökosystemmodell ist an das physikalische Modell gekoppelt, welches auch die realistische Simulation von gelöstem Sauerstoff und anorganischem Kohlenstoff erlaubt und damit die Simulation des Austauschs wichtiger Spurengase zwischen Ozean und Atmosphäre. Aufgrund der lateralen Auflösung sind sub-meso-skalige Prozesse auf Skalen kleiner als 10 km und deren Effekt auf z. B. Gasaustausch und Deckschichttiefe im Modell weder explizit simuliert noch adäquat parametrisiert, und es soll daher eine Parameterisierung dieser Prozesse bereitgestellt werden.

Mehr zum Thema

1. Eden, C. and H. Dietze, 2009: Effects of meso-scale eddy/wind interaction on biological new production and eddy kinetic energy. *J. Geophys. Res.*, **114**(C05023).

Förderung

BMBF-Verbundvorhaben SOPRAN ("Surface Ocean Processes in the Anthropocene"), Teilprojekt "The response of upper-ocean small and meso-scale processes to atmospheric forcing"

Das Klima der Ostsee zum Ende des Jahrhunderts Simulation von Zukunftsszenarien für das Ökosystem der Ostsee

T. Neumann, I. Kuznetsov, R. Friedland, Institut für Ostseeforschung an der Universität Rostock

Kurzgefasst

- Der erwartete Klimawandel wird das Ökosystem der Ostsee nachhaltig beeinflussen.
- Wesentliche Faktoren sind der direkte Einfluss durch die Atmosphäre und Veränderungen im Einzugsgebiet.
- Projizierte Veränderungen weisen große Unsicherheiten auf, insbesondere durch die Unsicherheit der Entwicklung der menschlichen Gesellschaft.
- Um den Bereich der Unsicherheiten abschätzen zu können, werden Simulationen mit einer Vielzahl von Variationen der klimatischen Entwicklung durchgeführt.
- Die Simulationen sind aufgrund der langen Zeiträume (150 Jahre) sowie der Komplexität der Ökosystemmodelle sehr aufwendig und erfordern den Einsatz massiv-paralleler Rechnerarchitekturen.

Für den Verlauf dieses Jahrhunderts ist eine drastische Änderung der klimatischen Bedingungen auf der Erde prognostiziert. Globale Modelle projizieren zum Beispiel einen durchschnittlichen Temperaturanstieg von 2-4 K, abhängig von den Szenarien für die Entwicklung der Treibhausgasemissionen. Für die Abschätzung konkreter, regionaler Auswirkungen prognostizierter Klimaänderungen sind Ergebnisse der Globalmodelle aufgrund ihrer groben Auflösung jedoch nur bedingt geeignet. Klimawandel macht sich auf regionaler Skala bemerkbar und dort müssen die spezifischen Maßnahmen für eine Vorsorge getroffen werden.

Um den regionalen Aspekt des Klimawandels erfassen zu können, werden Ergebnisse von globalen Modellen durch ein sogenanntes dynamisches Skalieren auf eine regionale Skala transformiert. Die dafür verwendeten regionalen Klimamodelle erfassen nur einen Teil der Erde, zum Beispiel Europa, und werden an den Rändern mit Daten aus dem Globalmodell angetrieben. In den Regionalmodellen kann sich dann eine interne Dynamik entwickeln, die regionale Aspekte wie Gewässer, Wälder oder Siedlungsgebiete berücksichtigt. Typische horizontale Auflösungen heutiger Modelle sind ca. 250 km in den Globalmodellen und entsprechend 25 km in den Regionalmodellen.

Ein Klimawandel wird auch die marine Umwelt nicht unbeeinflusst lassen. Die Ostsee als ein durch Eutrophierung belastetes europäisches Binnenmeer steht im besonderen Interesse der regionalen Klimaforschung. Um den Effekt des Klimawandels auf das Ökosystem der Ostsee abschätzen zu können, werden Ökosystemmodelle der Ostsee (z. B. [1]) mit Daten aus regionalen Klimamodellen angetrieben. Die Ökosystemmodelle bestehen aus dreidimensionalen Zirkulationsmodellen, in die biogeochemische Modelle integriert sind. Damit lassen sich sowohl die physikalischen Bedingungen als auch die wichtigsten Stoffflüsse wie zum Beispiel Primärproduktion simulieren.

Diese Simulationen benötigen eine Rechenleistung, die nur von Höchstleistungsrechnern bereitgestellt werden kann. So braucht ein Klimaszenario vom 150 Jahren auf dem HLRN etwa 3 Wochen Rechenzeit auf 256 Prozessorkernen.

Klimaprojektionen weisen einen hohen Grad an Unsicherheiten auf. Das liegt insbesondere an der Unsicherheit zur Prognose der Entwicklung der menschlichen Gesellschaft. Ausdruck dafür ist die große Anzahl verschiedener Treibhausgasszenarien, die in den IPCC-Berichten Berücksichtigung finden. Für das Ökosystem der Ostsee haben neben den atmosphärischen Bedingungen auch Veränderungen der Bedingungen im Einzugsgebiet einen großen Einfluss. Diese ändern sich sowohl als Reaktion auf das Klima aber auch als Folge ökonomischer Entwicklungen und staatlicher Regulierungen.

Im Rahmen des BONUS ([2]) Projektes Ecosupport werden mithilfe von drei Ökosystemmodellen der Ostsee verschiedene Klimaszenarien simuliert. Damit soll eine ausreichende Anzahl an Realisierungen produziert werden, die es erlaubt die Unsicherheiten der erwarteten Änderungen abschätzen zu können. Die Szenarien setzen sich aus Kombinationen unterschiedlicher Treibhausgasszenarien, Nährstoffeintragszenarien und verschiedenen Modellvarianten zusammen. Verwendet werden Daten verschiedener globaler Klimamodelle die mithilfe einer Reihe regionaler Klimamodelle skaliert werden. Diese Daten treiben schließlich ein Ökosystemmodell der Ostsee an.

In der Abbildung 1 ist die Änderung der Oberflächentemperatur der Ostsee zum Ende des Jahrhunderts in verschiedenen Jahreszeiten dargestellt. Die Daten sind das Ergebnis eines Ensembles aus 3 einzelnen Realisierungen. Die Realisierungen berücksichtigen unterschiedliche Global-

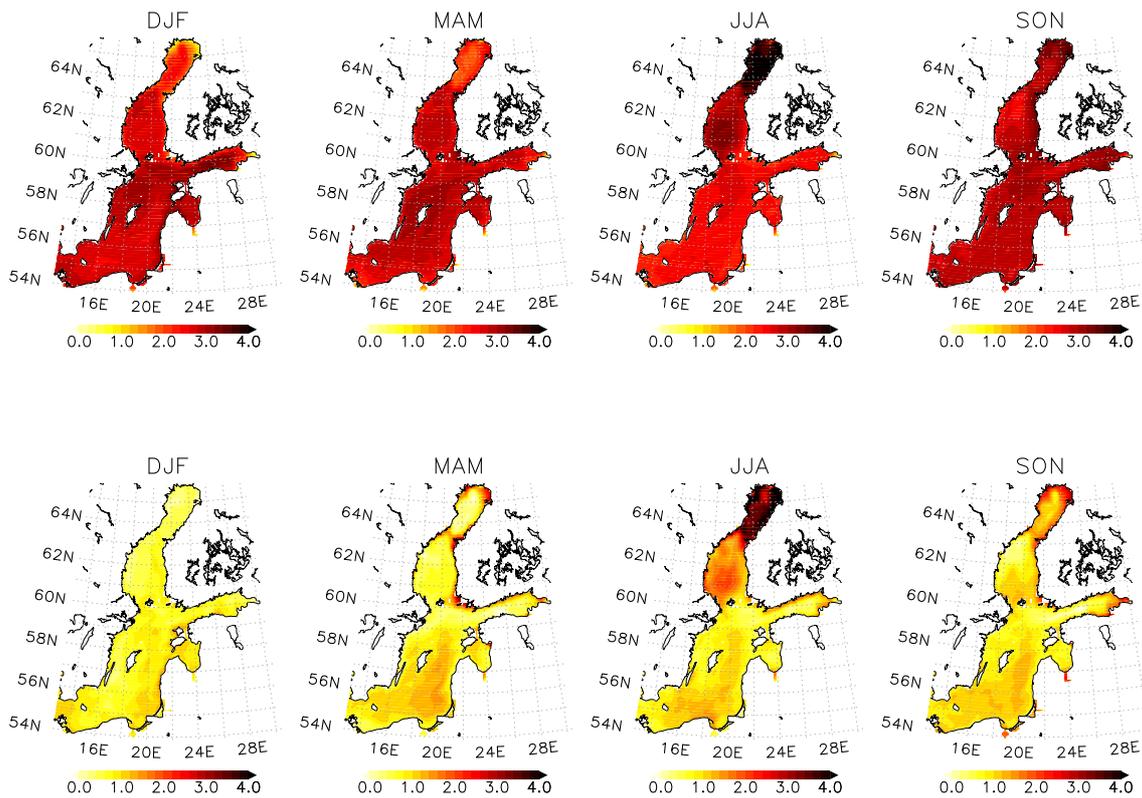


Abbildung 1: Mittlere Änderung der Oberflächentemperatur einer Ensemble-Simulation für das IPCC Szenario A1B (obere Reihe), sowie die maximalen Differenzen zwischen den Ensemble-Mitgliedern (untere Reihe). Das Ensemble besteht aus 3 Mitgliedern und umfasst verschiedene globale Klimamodelle und regionale Klimamodelle. Dargestellt sind die Ergebnisse für Winter (DJF), Frühjahr (MAM), Sommer (JJA) und Herbst (SON).

modelle und unterschiedliche Regionalmodelle basieren jedoch auf einem Ostseemodell. Die Temperaturänderung liegt in der Größenordnung von 4 K. Das stärkste Änderungssignal zeigt sich im Sommer in der nördlichen Ostsee. Die Unterschiede zwischen den Modellen sind in der Regel kleiner als die projizierten Änderungen selbst. Eine relativ große Spannbreite zeigen die Modelle im Sommer im nördlichen Bereich der Ostsee. Erste Ergebnisse dieser Arbeiten sind in [3] veröffentlicht.

Ensemblesimulationen ermöglichen neben der Abschätzung von Änderungssignalen auch Informationen über die Unsicherheiten dieser Änderungen zu gewinnen. In den kommenden Jahren wird es möglich sein, mithilfe des HLRN die Anzahl der Ensemblemitglieder zu vergrößern und damit die Unsicherheiten besser quantifizieren zu können. So können robuste Trends identifiziert werden und die Spannbreiten erwarteter Veränderungen angegeben werden. Die Einbettung dieser Forschung in große internationale Projekte eröffnet die Möglichkeit, die Ensembles zu erweitern.

Mehr zum Thema

1. T. Neumann und G. Schernewski, 2008: Eutrophication in the Baltic Sea and shifts in nitrogen fixation analyzed with a 3D ecosystem model. *Journal of Marine Systems*, 74, 592-602, DOI: 10.1016/j.jmarsys.2008.05.003
2. <http://www.bonusportal.org/>
3. T. Neumann, 2010: Climate-change effects on the Baltic Sea ecosystem: A model study. *Journal of Marine Systems*, 81, 213-224, doi:10.1016/j.jmarsys.2009.12.001

Förderung

Bundesministerium für Bildung und Forschung, Europäische Union

Das Schicksal von Stickstoff und Phosphor in der Ostsee ergründen Ausbreitungswege von Nährstoffen und Zeitskalen von Nährstofftransporten in der Ostsee

H. Radtke, Th. Neumann, Leibniz-Institut für Ostseeforschung an der Universität Rostock

Kurzgefasst

- Die Verfügbarkeit von Nährstoffen in der lichtdurchfluteten Oberflächenschicht bestimmt das Algenwachstum im Meer und beeinflusst damit die gesamte Nahrungskette bis zum Fisch.
- Die Ostsee als Binnenmeer wird stark durch Nitrat- und Phosphateinträge aus Flüssen belastet. Starkes Algenwachstum führt in den Tiefenbecken zu Fäulnisprozessen und der Entstehung giftigen Schwefelwasserstoffs.
- Nährstoffe aus verschiedenen Quellen (Flüssen oder atmosphärischen Einträgen) sind z.B. in Sedimentproben nur teilweise unterscheidbar.
- Ein „Einfärben“ von Stickstoff oder Phosphor, der aus einer bestimmten Quelle (z.B. der Oder) stammt, in einem numerischen Ökosystem-Modell gestattet, sein Schicksal von der Quelle bis zur Senke zu verfolgen.
- Die Ergebnisse der Simulationsrechnungen helfen, unser Verständnis der räumlichen und zeitlichen Aspekte des Stickstoff- und Phosphorkreislaufs in der Ostsee zu verbessern.

Die Ostsee ist ein Binnenmeer, das nur über schmale und flache Belte mit der Nordsee verbunden ist. Da Niederschlag und Flusseinträge die Verdunstung übersteigen, ist sie mit Brackwasser gefüllt. Salzwasser aus der Nordsee strömt nur ab und zu über die flachen Schwellen der westlichen Ostsee ein und wandert, da es schwerer ist, nach und nach in die verschiedenen Tiefenbecken.

Die Eutrophierung (Düngung) der Ostsee durch Nährsalzeinträge aus Landwirtschaft und Siedlungsräumen bewirkt ein starkes Planktonwachstum. Abgestorbene Lebewesen sinken zu Boden, um dort zersetzt zu werden. Allerdings wird durch diese Mineralisierungsprozesse Sauerstoff verbraucht. Im salzigen Tiefenwasser, das sich nicht mit dem darüberliegenden Wasserkörper mischt, wird so nach und nach aller Sauerstoff aufgezehrt. Es entstehen anoxische Bereiche (sauerstofffreie Zonen).

Die Reduzierung der Flusseinträge von Nitrat und Phosphat ist daher ein international verfolgtes Ziel. Allerdings gibt es noch weitere Quellen: Direkte atmosphärische Deposition und den Prozess

der Stickstofffixierung. Bei diesem wird von teilweise giftigen Cyanobakterien („Blualgen“) Luftstickstoff (N_2) biologisch verwertbar gemacht. Daher ist ein genaues Verständnis des Stickstoff- und Phosphorkreislaufs wichtig.

Aus welcher Quelle Stickstoff und Phosphor stammen, die von Meereslebewesen aufgenommen und eingelagert werden, lässt sich experimentell nur teilweise bestimmen. Durch die Untersuchung von Verhältnissen stabiler Isotope (Atome mit verschiedener Neutronenzahl) kann man Aussagen über die Herkunft des Stickstoffs gewinnen. Unterschieden werden kann damit zwischen Stickstoff aus belasteten Flüssen und Stickstoff, der durch Cyanobakterien fixiert wird. [2] Aber eine Unterscheidung zwischen einzelnen Flüssen ist experimentell nicht möglich und für Phosphor gibt es keine vergleichbare Methode. Daher wird diese Fragestellung mit einem numerischen Modell untersucht. Das Modell besteht aus einem physikalischen und einem biogeochemischen Teil.

Als physikalisches Modell (Strömungsmodell) wird das Modular Ocean Model (MOM3) verwendet. Mit einer Auflösung von 3 Seemeilen in der Horizontalen und ein bis drei Metern vertikal wird die Ostsee hierbei in Gitterzellen eingeteilt. Unter Verwendung atmosphärischer Antriebsdaten (Wind, Sonneneinstrahlung etc.) können so die Verteilung von Temperatur und Salzgehalt und die Strömung simuliert werden.

In das Strömungsmodell eingekoppelt wird ein biogeochemisches Modell (ERGOM). Das Ergebnis ist ein Modellsystem, das räumlich aufgelöst wesentliche biologische Prozesse wie z.B. Algenblüten beschreibt. [1] Dieses IOW-Ökosystemmodell wird für verschiedene Fragestellungen genutzt, so z.B. um mögliche Auswirkungen von Klimaveränderungen auf die Ostsee zu untersuchen.

In diesem Projekt wurde das Modell erweitert, so dass Stickstoff und Phosphor je nach ihrer Quelle verschieden „eingefärbt“ werden können. Als Quellen werden dabei die fünf Flüsse mit den größten Einträgen sowie die Stickstofffixierung betrachtet. Das Modell gestattet dann, die Ausbreitung der eingefärbten Elemente räumlich und im Nahrungsnetz zu verfolgen.

Die Ergebnisse zeigen die räumlichen Ausbreitungsmuster der Nährsalze. Ein zusätzlicher „Alterstracer“, der die Zeit zählt, die vergangen ist, seit das Element in das Ökosystem Ostsee eintrat, gestattet auch, die Verweildauer des jeweiligen Elements abzuschätzen.

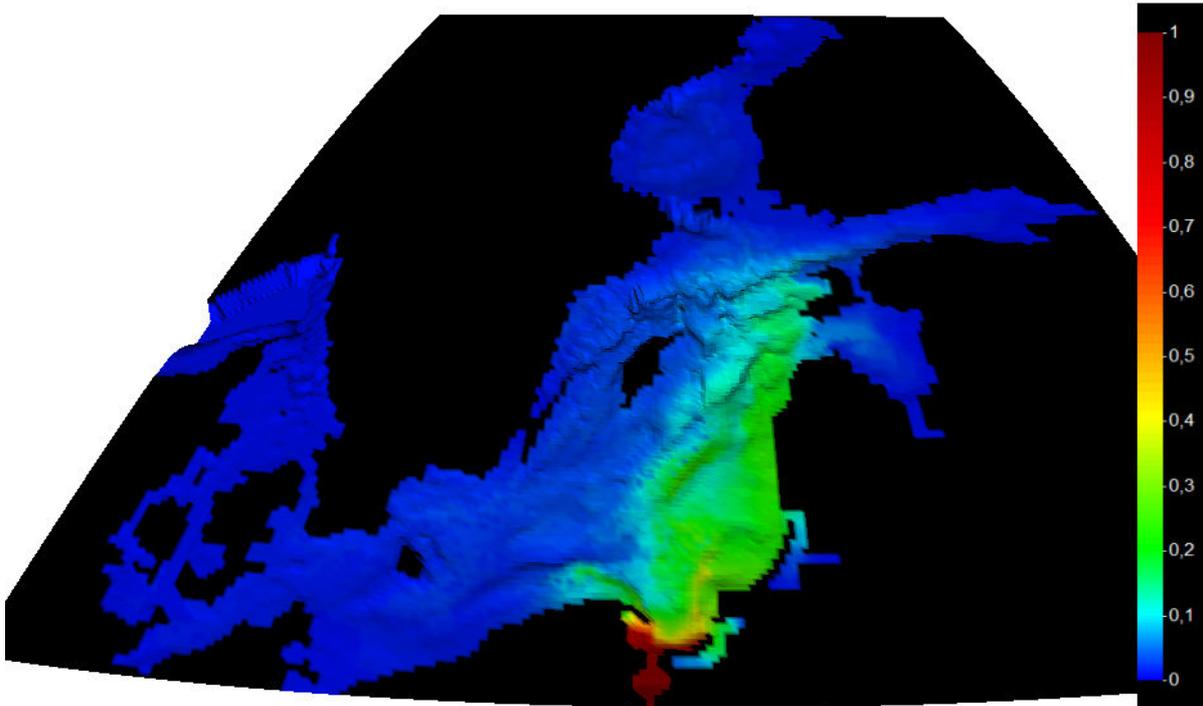


Abbildung 1: Dargestellt ist der Anteil des Stickstoffs im Oberflächensediment, der aus der Weichsel eingetragen wurde. Man erkennt, dass der Weichselstickstoff nur das Gebiet nahe der Mündung dominiert. Ein weiterer Teil wurde offenbar mit der Strömung längs der Küste ostwärts transportiert und sedimentierte dort. Der Stickstoff in den Tiefen des östlichen Gotlandbeckens stammt zu etwa 10% aus der Weichsel. Dieses Bild ergibt sich nach 34 Simulationsjahren im Januar 1996.

Stickstoff verlässt das Ökosystem meist durch Denitrifizierung, einen Prozess, bei dem Nitrat zu molekularem Stickstoff reduziert und somit für Lebewesen nicht nutzbar wird. Phosphor hingegen bleibt im System, bis er im Sediment vergraben wird. Auch die räumliche Verteilung dieser Senken lässt sich mit unserem Modell für die einzeln markierten Elemente bestimmen.

Die Resultate sollen helfen, das Verständnis für die Kreisläufe von Stickstoff und Phosphor in der Ostsee zu verbessern und um räumliche Aspekte zu ergänzen.

Im weiteren Verlauf des Projekts ist geplant, das Modell, das bisher nur bis auf die Ebene des Zooplanktons beschränkt ist, um Fisch zu ergänzen, und die Sauerstoffzehrung in den Tiefenbecken direkt den markierten Elementen zuzuordnen. Ebenfalls sollen weitere Quellen (Einstrom aus der Nordsee, atmosphärische Deposition) markiert werden.

Mehr zum Thema

1. Neumann, T., 2007. The fate of river-borne nitrogen in the Baltic Sea - An example for the River Oder. *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, 73, 1-7.
2. Voss, M., Emeis, K., Hille, S., Neumann, T., Dippner, J., 2005. Nitrogen cycle of the Baltic Sea from an isotopic perspective. *Global Biogeochemical Cycles* 19. doi:10.1029/2004GB002338.

Förderung

Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

Warum Wasser über die Kontinentalkante fließt Dichteströmungen in Hervey Bay (Australien)

U. Gräwe, Leibniz Institut für Ostseeforschung, Warnemünde

Kurzgefasst

- Untersuchung von ozeanischen Dichteströmungen mithilfe eines 3D Modellsystems
- Modellierung von kleinskaligen Prozessen (100-500m) sowie grossskaligen Prozessen (600km)
- Kopplung des Modellsystems in operationelle globale Modelle
- Modellergebnisse sollen die Planung von Messfahrten unterstützen

Hervey Bay (Fig. 1), eine ca. 4000 km² grosse Bucht (durchschnittliche Tiefe = 15 m), befindet sich in unmittelbarer Nähe der kontinentalen Schelfkante der zentralen Ostküste von Australien, ca 250 südlich des Great Barrier Riff. Durch die hohe Verdunstungsrate (ca. 2 m/Jahr), geringe Niederschläge (weniger als 1 m/Jahr) und nahezu verschwindenden Süswassereintrag durch Flüsse, kann eine inverse Struktur/Schichtungen erwartet werden.

Mit den am HLRN durchgeführten Rechnungen sollen vorangegangenen Untersuchungen validiert werden [3] sowie die Möglichkeiten des Massiv-Parallelrechnens ausgenutzt werden um Multiskalen-Simulationen durchzuführen. Die numerischen Experimente wurden mit dem Modell GETM (General Estuarine Transport Model,[1]) durchgeführt.

Da Hervey Bay ein starkes Gezeitensignal aufweist (Tidenhub > 3,5 m), kann die Bucht als vertikal gut durchmischt klassifiziert werden. Die Ergebnisse der Messfahrten, als auch die numerischen Experimente, bestätigen, dass Hervey Bay die charakteristischen Merkmale einer inversen/hypersalinen Struktur aufweist. In der Bucht existiert ein nahezu konstanter Salzgradient von 0.5 psu (practical salinity unit), mit einem Salzgehalt von 35.5 psu im offenen Ozean und Spitzenwerten von über 39.0 psu im küstennahen Bereich. Die Untersuchung zeigten, dass Lufttemperatur, Wind und Gezeiten die wichtigsten Einflussgrößen für die Stabilität der inversen Schichtung und der Salzgradienten sind, während die östlichen Passatwinde den Wasseraustausch in der Bucht dominieren.

Aufgrund von lang anhaltenden Dürren weisen die subtropischen Gebiete an der Ostküste Australiens eine Veränderungen in der Balance von Nie-

derschlag und Verdunstung auf. Langzeitdatenreihen zeigen während der letzten fünfzig Jahre eine Verringerung der Niederschlagsmenge von ca. 50 mm pro Jahrzehnt an, verbunden mit einem Temperaturanstieg um etwa 0.1 Grad C pro Jahrzehnt. Mit Hilfe der numerischen Experimente konnten die Auswirkungen auf die Hydro- und Thermodynamik von Hervey Bay untersucht werden. Durch die Verschiebung des Gleichgewichtes zwischen Verdunstung und Niederschlag treten hypersaline und inverse Bedingungen in Hervey Bay häufiger auf. In den letzten zwei Jahrzehnten weist der mittlere Niederschlag in Hervey Bay eine Abweichung von 13 % von der Klimatologie (1941-2000) auf. Die Verringerung im Flusseintrag, im selben Zeitraum, kann mit 23 % abgeschätzt werden. Eine direkte Folge ist, dass sich der Salzgehaltsfluss erhöht hat, sowie die verdunstungsgesteuerte Residuenströmungen beschleunigt haben.

Im Gegensatz zu der langfristigen Reduzierung der Niederschläge führt das Auftreten von schweren Regenfällen und damit verbundenen Überschwemmungen zu kurzfristigen Schwankungen im Salzgehalt von Hervey Bay. Die Untersuchungen dieser extremen Frischwassereinträge ergaben, dass die Frischwasseraustauschzeiten eng an die windgetriebenen Residuenströmungen gekoppelt sind. Die inversen Eigenschaften von Hervey Bay und die damit verbundene Dichtegradienten (mit einer höheren Dichte in Küstennähe als im offenen Ozean) können instabile Schichtungen erzeugen. Diese äussern sich in Dichteströmungen und damit einem Ausfluss von dichtem Wasser entlang des Grundes von Hervey Bay. Die Ausflussergebnisse haben eine mittlere Dauer von 30 Tagen und sind meistens auf den Spätherbst beschränkt. Der dabei auftretende integrierte Volumentransport ist vergleichbar mit dem Volumen von Hervey Bay.

Die Randbedingungen für die Simulationen werden vom dem operationellen Global-Modell HYCOM mit 1/12 Grad Auflösung und dem operationellen australischen Modell BLUELink mit 1/10 Grad Auflösung bereitgestellt. Um eine finale Auflösung von 600 m zu erhalten ist ein Nesting erforderlich (Fig. 1). Das äussere Modell hat eine Auflösung von 3 km (200×200 Gitterpunkte). Das innere Modell hat eine Auflösung von 600 m (300×300 Gitterpunkte). In der Vertikalen werden in beiden Modelstufen 50 Schichten benutzt. Die wissenschaftliche Motivation dieser Arbeit ist, die Existenz dieser Dichteströme nachzuweisen. Erste Abschätzung aufgrund von Model-

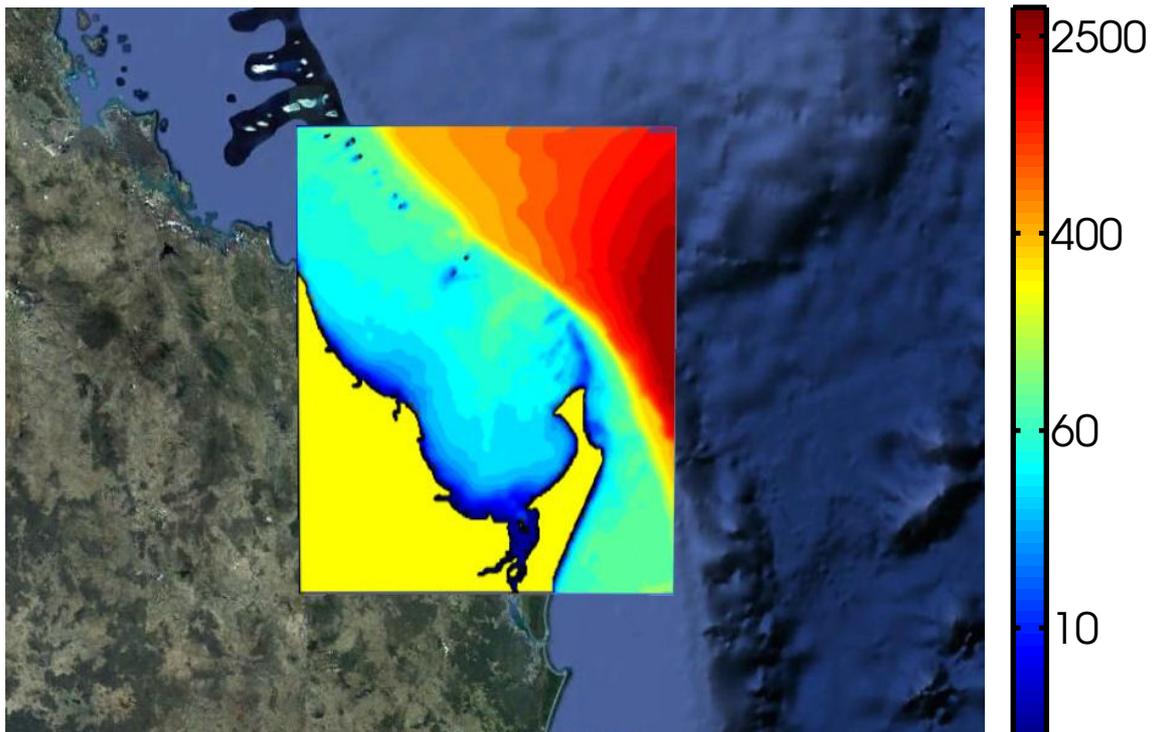


Abbildung 1: Modellgebiet (ca. 150 Grad – 155 Grad E und 23 Grad – 26 Grad S) von Hervey Bay entlang der australischen Ostküste sowie Kontinentalshelf und Schelfkante mit der Wassertiefe in m

lierung [3] geben als möglichen Volumentransport während eines Ausstromereignisses das Volumen von Hervey Bay an. Die Modellierung kann helfen, mögliche Folgen für die lokale Biologie zu quantifizieren. Eine weitere Fragestellung ist, wie diese Dichteströmungen entstehen, sowie deren Einschichtung an der Schelfkante. Die numerischen Experimente sollen des Weiteren dazu beitragen, Messkampagnen zu motivieren sowie planend zu unterstützen. Die atmosphärischen Antriebe werden für das äussere Modell aus dem ERA/Interim Datensatz genommen (räumliche Auflösung ca. 30 km), für das innere Modell eine Kombination aus Messungen, bereitgestellt durch den Wetterdienst von Australien und QuickScat- und CCMP-Satelliten-basierenden Winddaten mit einer räumlichen Auflösung von 25 km. Der Simulationszeitraum soll 20 Jahre abdecken, 1990-2010, wobei der Zeitraum 1990-1992 als Spinup anzusehen ist. Zur Validierung stehen von Satelliten gemessene Oberflächentemperaturen zur Verfügung, sowie Messdaten verschiedener Ausfahrten in Hervey Bay [2].

Geplant sind Experimente mit festen Vertikal-Koordinaten sowie adaptiven Vertikal-Koordinaten um mögliche Unterschiede aufzudecken. Des

Weiteren sind Parameterstudien geplant mit Veränderung der Bodenrauigkeit, der Turbulenzschemata sowie der antreibenden Modelle (HYCOM (2002-2010), BLUELink(1992-2008)). Ausserdem soll der Einfluss des Ost-Australischen Stromes [4] auf die Dichteströme an der Schelfkante untersucht werden.

Mehr zum Thema

1. www.getm.eu
2. Ribbe, J.: A study into the export of saline water from Hervey Bay, Australia, *Estuarine, Coastal and Shelf Science* 66(3-4), 550-558, 2006
3. Gräwe, U., Wolff, J.-O., and Ribbe, J.: Mixing, hypersalinity and gradients in Hervey Bay, Australia, *Ocean Dynamics* 59(5), 643-658, 2009
4. Ridgway, K. R., and Dunn, J. R.: Mesoscale structure of the mean East Australian Current System and its relationship with topography, *Progress In Oceanography* 56(2), 189-222, 2003

Förderung

Universität Rostock

Klimawandel in Regionen zukunftsfähig gestalten Regionale Anpassungsstrategien für die deutsche Ostseeküste (RADOST)

U. Gräwe, H. Burchard, Leibniz Institut für Ostseeforschung, Warnemünde

Kurzgefasst

- Einsatz von dynamischen Downscaling um globale Klimasimulationen (Auflösung 250km) in hoher regionaler Auflösung (1km) für die deutschen Küsten in der Ostsee zu simulieren
- Simulation von zwei IPCC Szenarien A1B und B1 mit je zwei Realisierungen. Hierbei ist das A1B Szenario eher pessimistisch, das B1 Szenario eher optimistisch.
- Die hochaufgelösten Klimasimulationen sollen Entscheidungsträgern in Politik, Tourismus, Wirtschaft, Ämter zur Verfügung gestellt werden, um zukünftige Planungen zu unterstützen

Die RADOST-Projektregion umfasst die gesamte deutsche Ostseeküste (Bundesländer Schleswig-Holstein und Mecklenburg-Vorpommern). Diese Region ist ein sensibler, multifunktionaler Raum, zum einen geprägt von besonderer Erholungsqualität, zum anderen von internationaler Bedeutung für den Natur- und Artenschutz. Der Küstenschutz ist eine wichtige öffentliche Aufgabe - die Stabilisierung der Uferlinie entlang der deutschen Ostseeküste erfordert bereits heute erhebliche Investitionsmittel, und die regionalen Küstenschutzbehörden sind wichtige Auftraggeber für regionale Unternehmen. Insgesamt handelt es sich um wirtschaftlich vergleichsweise schwache und somit verwundbare Gebiete.

Der Klimawandel stellt die deutsche Ostseeküstenregion vor massive Anpassungserfordernisse. Folgen des Klimawandels sind hier auf unterschiedlichen Ebenen zu erwarten: 1) Anstieg des Meeresspiegels, 2) Veränderung der Stärke und Häufigkeit von Stürmen sowie see- und landseitigen Hochwasserereignissen, 3) Änderungen der Strömungsdynamik und folglich von Sedimenttransporten, dadurch Veränderung von Küstenlinie und Bedingungen für die Schifffahrt und 4) Veränderungen der Wasserqualität der Küstengewässer durch erhöhte Durchschnittstemperatur und periodisch veränderte Nährstoffeinträge aus den Zuflüssen, beispielsweise nach zunehmenden Starkregenereignissen. Veränderungen an diesen natürlichen Parametern wirken sich in vielfältiger Weise auf die regionale Wirtschaft aus. Ziel des RADOST-Vorhabens ist es Anpassungsstrategien für die deutsche Ostseeregion zu erarbeiten auf der

Grundlage verschiedener IPCC (Intergovernmental Panel of Climate Change, [1]) Szenarien für die nächsten 100 Jahre.

Die numerischen Simulationen werden mit dem 3D-Zirkulationsmodell GETM (General Estuarine Transport Modell, [2]) durchgeführt, welches die physikalischen Zustandsvariablen Temperatur, Salzgehalt, Dichte, Strömung sowie die Oberflächenauslenkung berechnet. Die Simulationen am HLRN werden auf einem $426 \times 433 \times 35$ Gitterpunkte umfassenden Gitter mit einer horizontalen Auflösung von ca. 1 km durchgeführt. Die Simulationen werden mit den Atmosphären-Daten des Globalmodells ECHAM5/MPI-OM von 1960-2100 angetrieben, wurden aber am Deutschen Klimarechenzentrum mit Hilfe des CLM-Modells für Europa mit einer Auflösung von 18 km verfeinert. Dabei sind zwei CO₂ Szenarien ausgewählt, A1B und B1. Hierbei ist das B1 Szenario das optimistischere. Für beide Szenarien existieren jeweils zwei Realisierungen (Klimaläufe). Ozeanische Randbedingungen werden aus Klimaläufen der gesamten Ostsee (räumliche Auflösung 3 Seemeilen) zu Verfügung gestellt [3].

Aufgrund dieser hohen räumlichen Auflösung lassen sich die küstennahen Gewässer, insbesondere die an die Ostsee direkt angrenzenden Haffe und Bodden, erstmalig realistisch in Langzeitsimulationen abbilden. Somit ist es auch möglich Änderungen in dem Auftreten von Sturmfluten zu untersuchen. Dies ist ein wichtiger Aspekt, da die Bemessung von Deichen oder dem Küstenschutz entsprechend der zu erwartenden Sturmfluthöhen ausgelegt werden muss. Des Weiteren wird es möglich sein Veränderungen im Sedimenttransport abzuschätzen, um so Aussagen zum Küstenschutz zu liefern. Durch die erhöhte räumliche Auflösung können Wasseraustauschprozesse wesentlich besser simuliert werden als in grob-aufgelösten Modellen [3]. Somit ist es mit Hilfe von Partikelmodellen möglich, Änderungen in den Austauschzeiten oder Austauschpfaden von Wassermassen zu erkennen.

Als Beispiel für die Veränderungen, die erwartet werden können, sind in der Abbildung 1 die Unterschiede der Oberflächentemperaturen, bezogen auf den Referenzezeitraum 1971-2000, dargestellt. Beide Szenarien zeigen einen Anstieg der Oberflächentemperaturen an, wobei der Anstieg für das A1B Szenario mit 2.5-3 °C deutlich stärker ist als für das B1 Szenario. Die Simulationen zeigen des Weiteren, dass Temperaturextrema, die heute an etwa 5 Tagen im Jahr auftreten, zum En-

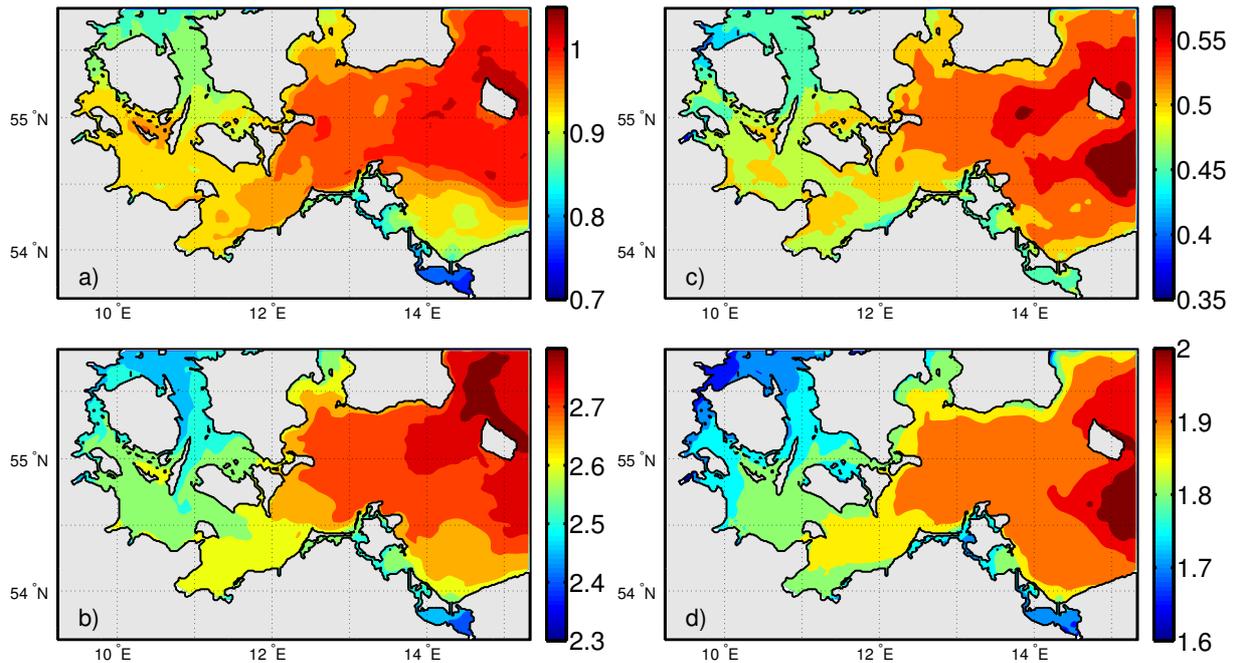


Abbildung 1: Veränderungen in der Oberflächentemperatur der westlichen Ostsee in °Celsius für das Szenario a) A1B 2021-2050, b) B1 2021-2050, c) A1B 2071-2100 und d) B1 2071-2100,

de des Jahrhunderts während 3-6 Wochen anzutreffen sein werden.

Die Untersuchungen sollen ausserdem dazu dienen, Veränderungen im Wasseraustausch mit der Nordsee abzuschätzen. Der Wasseraustausch mit der Nordsee bestimmt, wie viel Sauerstoff in die tiefen Becken der Ostsee transportiert wird. Sollte dieser Austausch sich abschwächen, können die sogenannten "Todeszonen" (Gebiete in denen Sauerstoffarmut herrscht) sich vergrössern und somit die Biologie empfindlich stören.

Mehr zum Thema

1. www.ipcc.ch
2. www.getm.eu
3. Neumann, T.: Climate-change effects on the Baltic Sea ecosystem: A model study, *Journal of Marine Systems* 81(3), 213-224, 2010
4. Gräwe, U., and Burchard, H.: *Global Change and Baltic Coastal Zones - Regionalisation of Climate Scenarios for the Western Baltic Sea*, Springer, Dordrecht, The Netherlands, Eds: Schernewski, G., Hofstede, 2010

Förderung

Bundesministerium für Bildung und Forschung

Turbulente Zeiten für Stadtbewohner

Simulation von Luftströmungen in Städten mit innovativen Turbulenzmodellen

S. Raasch, M. Letzel, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover

Kurzgefasst

- Die Lebensbedingungen in Städten werden nachhaltig durch die Bebauungsdichte beeinflusst.
- Enge und tiefe Straßenschluchten (Beispiel Hong Kong) reduzieren insbesondere in den Sommermonaten den Luftaustausch erheblich.
- Dies führt zu fast unerträglichen Klimabedingungen auf Fußgängerniveau und schafft unter anderem günstige Bedingungen für die Vermehrung von Krankheitserregern.
- Meteorologen versuchen daher mit Simulationen die klimatischen Auswirkungen baulicher Maßnahmen zu prognostizieren.
- Diese Simulationen sind aufgrund der vielen beteiligten kleinskaligen Einflussgrößen sehr rechenaufwändig und verlangen den gleichzeitigen Einsatz von mehreren tausend CPU-Kernen.

Die Dichte Bebauung in großen Städten hat einen spürbaren Einfluss auf das körperliche Wohlbefinden der dort lebenden Menschen. So verhindern z.B. enge Straßenschluchten zwischen Hochhäusern den Luftaustausch, wodurch sich in Sommermonaten die Lufttemperatur zusätzlich erhöht und die Luftqualität erheblich verschlechtern kann. In großen Metropolen wie z.B. Hong Kong herrschen dann auf Fußgängerniveau fast unerträgliche Bedingungen. Meteorologen versuchen deshalb seit vielen Jahren, mit Simulationsmodellen die Strömungsbedingungen in Städten vorherzusagen, um beispielsweise abschätzen zu können, welchen Einfluss neu geplante Gebäude auf die Luftqualität haben werden.

Die Simulation von Strömungen für bebauten Gebiet ist schwierig, weil die Luft durch die Gebäude stark verwirbelt wird. Die dadurch entstehende turbulente Strömung muss von den Modellen richtig wiedergegeben werden, denn es sind gerade die turbulenten Wirbel, die den Luftaustausch zwischen den bodennahen und den darüber befindlichen Luftschichten bewirken. Ihre Größe reicht von Millimetern bis zu einigen hundert Metern und die einzelnen Wirbel ändern ihre Form und Größe ständig. Strömungsmodelle arbeiten nun nach dem Prinzip, dass sie Vorhersagen nur für einzelne Punkte im Raum mit diskretem Abstand machen. Der Abstand dieser so genann-

ten Gitterpunkte muss dabei kleiner als die Abmessungen der kleinsten Strömungsstrukturen sein, damit diese überhaupt vom Modell "gesehen" und berechnet werden können. Wollte man Strömungen in einem Stadtgebiet mit einem Volumen von 1 km^3 vorhersagen, wären bei Wirbelgrößen bis hinunter zu einem Millimeter bereits 10^{18} Gitterpunkte erforderlich. Man spricht hier von einer direkten numerischen Simulation (DNS), weil vom Modell wirklich alle Strömungsstrukturen erfasst werden. Solche Simulationen sind auf absehbare Zeit auch auf den weltweit schnellsten Rechnern nicht durchführbar. In der Vergangenheit und auch noch gegenwärtig wird deshalb der Turbulenzeffekt mit wesentlich weniger aufwändigen Modellen beschrieben, deren Qualität allerdings oft nicht hinreichend ist. Glücklicherweise hat sich herausgestellt, dass die direkte Simulation von Turbulenz auch bei größeren Gitterweiten funktioniert, weil die kleinsten Wirbel, die dann vom Modell nicht mehr aufgelöst werden können, im Vergleich zu den größeren Wirbeln kaum einen Einfluss auf die Strömung haben. Modelle mit entsprechend großer Gitterweite nennt man Grobstruktursimulationsmodelle (englisch: large-eddy simulation, LES). In städtischen Gebieten sind so Gitterweiten im Meterbereich erlaubt, was aber immer noch einen extremen Rechenbedarf bedeutet und den Einsatz von Massivparallelrechnern erfordert.

In unserem Projekt haben wir ein bereits existierendes LES-Modell (**PALM**) für die Simulation von Strömungen in ganzen Stadtvierteln weiter entwickelt [2] und dieses unter anderem für die Simulation von Strömungsverhältnissen in Stadtteilen von Hong Kong eingesetzt. **PALM (PARallelisiertes LES Modell)** wurde innerhalb des letzten Jahrzehnts am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Uni Hannover entwickelt [1] und ist mittlerweile für den parallelen Betrieb auf mehreren tausend Prozessoren optimiert. Im Vergleich zu anderen Städten sind die Straßen in Hong Kong sehr eng, bei gleichzeitig sehr großer Gebäudehöhe, und es kommt zu den eingangs erwähnten Temperatur- und Luftqualitätsproblemen, weil die Luft in den engen Straßenschluchten quasi zum Stehen kommt. Dies schafft unter anderem auch günstige Bedingungen für die Vermehrung von Krankheitserregern. Die Ausbreitung der SAR-Krankheit in Hong Kong vor einigen Jahren zeigt, welche Bedeutung Luftaustauschbedingungen für das öffentliche Leben haben können. In einem Kooperationsprojekt mit der Chinese University of Hong Kong wurde daher versucht, die gegenwärtigen Strömungsbe-

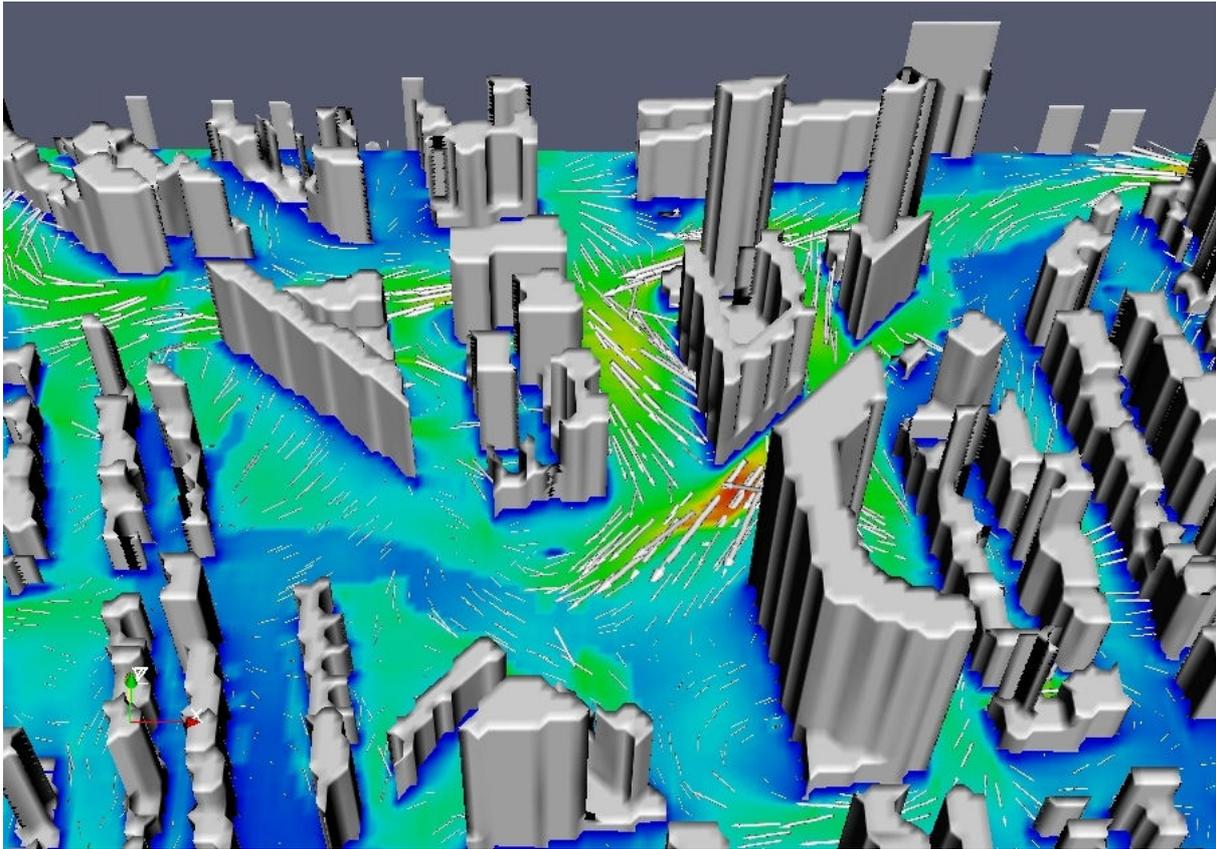


Abbildung 1: Mittlere Strömungsbedingungen im Fußgängerniveau von Mong Kok (Stadtteil von Hong Kong), simuliert mittels LES. Das Bild zeigt nur einen kleinen Ausschnitt des wesentlich größeren Modellgebietes. Gebiete mit hohen Windgeschwindigkeiten und entsprechend guten Austauschbedingungen erscheinen in roter Farbe, "stehende" Luftmassen dagegen in blauer Farbe. Die jeweiligen Windgeschwindigkeiten und Windrichtungen sind zusätzlich durch Pfeile gekennzeichnet. Lange Pfeile stehen dabei für hohe Geschwindigkeiten.

dingungen in Stadtteilen möglichst großflächig zu erfassen. Die Abbildung zeigt beispielhaft die simulierten Strömungsverhältnisse im hongkonger Stadtteil Mong Kok. Die Simulation benötigte ca. zwei Wochen CPU-Zeit auf 2048 Rechenkernen. Deutlich erkennbar ist, dass sich die Luft gerade in den schmalen Straßenschluchten fast nicht bewegt (blaue Farbe in der linken unteren Bildhälfte), dass aber einzelne sehr hohe Gebäude durchaus kräftigere bodennahe Strömungen und damit einen besseren Luftaustausch bewirken können (rote Farbe in der Bildmitte).

Solche Simulationen sind zwar derzeit für stadtplanerische Zwecke noch viel zu aufwändig und teuer, die rasante Entwicklung der Prozessortechnologie wird die praktische Anwendung von LES wohl aber noch innerhalb der nächsten zehn Jahre Realität werden lassen.

Mehr zum Thema

1. Raasch, S. and M. Schröter, 2001: A large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. *Meteorol. Z.*, 10, 363-372. doi: 10.1127/0941-2948/2001/0010-0363.
2. Letzel, M.O., M. Krane and S. Raasch, 2008: High resolution urban large-eddy simulation studies from street canyon to neighbourhood scale, *Atmos. Env.*, 42, 8770-8784. doi: 10.1016/j.atmosenv.2008.08.001.

Förderung

DFG-Schwerpunktprogramm 1276 MetStröm; Das Projekt wird am HLRN mit bis zu 4096 parallel genutzten CPU-Kernen gefördert.

Wird es die ostfriesischen Inseln im Jahr 2100 noch geben? Auswirkungen des prognostizierten Klimawandels auf die Sediment- und Hydrodynamik im Ostfriesischen Wattenmeer

J.-O. Wolff, K.A. Lettmann, S. Grashorn, Institut für Chemie und Biologie des Meeres, Universität Oldenburg

Kurzgefasst

- Der klimabedingte Anstieg des Meeresspiegels und veränderte Wind- und Seegangsbedingungen in der Nordsee werden im 21. Jahrhundert zur Zeit unbekannte Auswirkungen auf den Transport und die Verteilung von Sedimenten im Wattenmeer haben.
- Die kleinskaligen Seegatten und Priele im ostfriesischen Wattenmeer bedingen sehr hoch aufgelöste Simulationen der Hydrodynamik
- Diese hydrodynamischen Rechnungen auf unstrukturierten Dreiecksgittern mit variabler Dreiecksform und -größe können nur auf einem hochskalierten Multiprozessorsystem in der erforderlichen Zeit gerechnet werden

Der zu erwartende Klimawandel wird sich in den vielfältigen Natur- und Wirtschaftsräumen Niedersachsens in sehr unterschiedlicher Weise bemerkbar machen. Entsprechend werden dessen Folgen in den Watten und Marschen andere sein als in den Sandgebieten der Geest, den grundwasserbeeinflussten Tälern, den Lössfluren sowie im Berg- und Hügelland und im Harz. Das Verbundprojekt KLIFF ist ein vom Niedersächsischen Ministerium für Wissenschaft und Kultur aus Mitteln der Stiftung Volkswagenwerk finanzierter Forschungsverbund, der für eine Dauer von 5 Jahren konzipiert ist. In ihm arbeiten Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler aus 21 Universitäten und Forschungseinrichtungen.

Die Entwicklung von Anpassungsstrategien an den Klimawandel erfordert eine räumlich und zeitlich differenzierte Analyse des Klimawandels und der Klimafolgen sowie die Berücksichtigung ökologischer und gesellschaftlicher Bezüge. Im Forschungsthema 7, Küste, sollen die zu erwartenden Veränderungen durch den Klimawandel auf die Niedersächsische Küstenregion untersucht werden. Insbesondere sollen hier untersucht werden wie sehr sich ein potentieller Meeresspiegelanstieg und veränderte meteorologische Bedingungen auf die Hydrodynamik und Sedimentdynamik im Ostfriesischen Wattenmeer bis zum Jahre 2100 auswirken würden.

Der Sedimentimport in das Ostfriesische Wat-

tenmeer aus externen Quellen reicht nicht aus, um das durch den Meeresspiegelanstieg von bis zu 1.8 m gegen Ende des 21. Jahrhunderts erzeugte Defizit zu kompensieren. Als Konsequenz ergibt sich eine Erodierung auf der seewärtigen Seite der Barriereinseln und einer Ablagerung dieser Sedimente im Wattenmeer. Insgesamt verlagert sich das Barriereinselsystem somit landwärts mit einer Rate von ca. 100 m pro 10 cm Meeresspiegelanstieg. Diese natürliche Verlagerung wurde aber durch menschliche Aktivitäten wie Landgewinnung und Deichbau in den letzten mehreren hundert Jahren gestört mit der Folge, dass die natürliche Fläche des Wattenmeeres an einigen Stellen um bis zu 50 % reduziert wurde. Die Folgen der Eindeichungen sind in einer Reduktion des Gezeitenprismas und einer Erhöhung der Energieniveaus senkrecht zur Küste zu finden. Da der natürliche Ablagerungsraum fehlt und die Sedimente durch die erhöhte turbulente kinetische Energie länger in der Wassersäule suspendiert bleiben, werden zunehmend größere Sedimentpartikel entlang der Küste aus dem Wattenmeer entfernt.

In den letzten 20 Jahren hat die Popularität unstrukturierter Gittermethoden für die Modellierung hydrodynamischer Bedingungen in Küstenzonen und Ästuaren stetig zugenommen. Einen aktuellen Überblick zum den Stand der Forschung geben Deleersnijder et al. (2010). Einer der Hauptgründe für diesen Trend ist die besondere Fähigkeit realistische Küstenlinien gut abzubilden und Raumskalen aufzulösen, die von kleinen Flüssen bis zu gesamten Ozeanbecken reichen. Die am weitest verbreiteten Methoden zur Lösung der hydrodynamischen Gleichungen auf unstrukturierten Gittern sind die Finite-Elemente- und die Finite-Volumen-Methode. Die hier verwendete Finite-Volumen-Methode gehört zu der Klasse der gewichteten Residuenmethoden, die konzeptionell dahingehend von Finiten-Differenzen-Methoden verschieden sind durch die Annahme, dass die Lösung analytisch repräsentiert werden kann. Ein gegebener Raum wird dabei unterteilt in finite Volumina (oder Zellen), die jeweils ein kleines Volumen um einen Knoten auf einem Netz repräsentieren. Es werden dann Volumenintegrale der grundlegenden Gleichungen gebildet und Terme, die eine Divergenz beinhalten, werden mithilfe des Divergenztheorems (oder des Gauss-Ostrogradsky Theorems) in Oberflächenintegrale umgeformt. Diese Terme werden dann berechnet als Flüsse über die Oberflächen jedes der finiten Volumina. Da

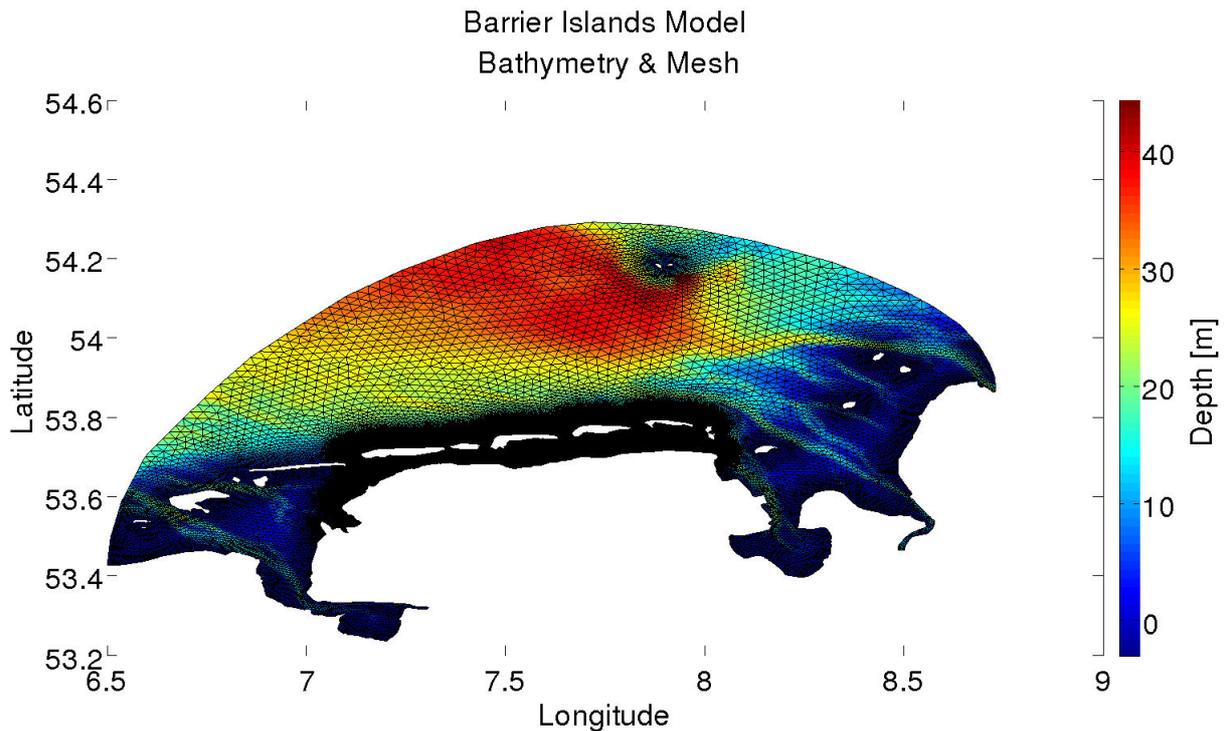


Abbildung 1: Das Modellgitter der Ostfriesischen Inselkette im Bereich der Deutschen Bucht. Die Farben geben die Tiefenwerte der Bathymetrie an.

der Fluss, der in ein finites Volumen hereinströmt, gleich dem Fluss, der herausströmt, ist diese Methode konservativ.

Das hier verwendete Finite-Volumen-Model FV-COM (Finite volume coastal ocean model) ist ein prognostisches dreidimensionales Ozeanmodell basierend auf den Navier-Stokes Gleichungen und wurde ursprünglich von Chen et al. (2003) vorgestellt. Es hat eine freie Oberfläche und läuft auf einem unstrukturierten Gitter (siehe Abb. 1). FV-COM beinhaltet Erhaltungsgleichungen für Impuls, Masse, Salzgehalt und Dichte und zusätzlich verschiedene Parameterisierungen für die turbulente Vermischung. Zusätzlich zu dem hydrodynamischen Kern gibt es ein Wellenmodul und ein Sedimentmodul.

Die Antriebsdaten (Wind + Gezeiten) für diese Simulationen werden hier für die zukünftigen Situationen bis zum Jahr 2100 von einem globalen Ozean/Atmosphäre-Modell geliefert. Für diese zukünftigen möglichen Klimaszenarien werden dann mit FVCOM die Auswirkungen auf die Hydrodynamik und den Sedimenttransport untersucht. Insbesondere von Interesse ist hier ein durch Meeresspiegelanstieg und veränderte Sturmparameter verändertes Antwortverhalten des Wellenfeldes vor und hinter den Barriereinseln.

Mehr zum Thema

1. Deleersnijder E, Legat V, Lermusiaux PFJ (Eds) (2010) Multi-scale modelling of coastal, shelf and global ocean dynamics. Ocean Dyn 60(6) 285 pp
2. Chen C, Liu H, Beardsley RC (2003) An unstructured, finite-volume, three-dimensional, primitive equation ocean model: application to coastal ocean and estuaries. J Atmos Ocean Tech 20 159-186
3. Lettmann K, Wolff J-O, Badewien TH (2009) Modelling the impact of wind and waves on suspended particulate matter fluxes in the East Frisian Wadden Sea (southern North Sea). Ocean Dyn 59(2) 239-262

Förderung

Teilprojekt im Forschungsverbund Klimafolgenforschung (KLIFF) des Niedersächsischen Ministeriums für Wissenschaft und Kultur (MWK)

Kleine Tropfen, große Wirkung Grobstruktursimulationen zum Einfluss der Turbulenz in Wolken auf das Tropfenwachstum

S. Raasch, T. Franke, Institut für Meteorologie und
Klimatologie, Leibniz Universität Hannover

Kurzgefasst

- Präzise Niederschlagsvorhersagen sind von großer wirtschaftlicher und gesellschaftlicher Bedeutung.
- Die Qualität der Niederschlagsvorhersage hat sich in den letzten Jahren kaum verbessert.
- Das Verständnis der Prozesse, die für die Niederschlagsbildung relevant sind, muss verbessert werden und insbesondere auch realistischer modelliert werden.
- Dieses Projekt untersucht den Einfluss der Turbulenz in Wolken mit Hilfe einer neuen Methode mit der Wolkentropfen explizit simuliert werden.

Die Abschätzung der zukünftigen Wetterentwicklung interessiert die Menschen seit Jahrtausenden. Dabei ist besonders die Niederschlagsvorhersage von großer wirtschaftlicher und gesellschaftlicher Bedeutung, z.B. für die Land- und Wasserwirtschaft, den Verkehr und den Tourismus. Leider hat sich die Qualität der Niederschlagsvorhersage in den letzten Jahren trotz vieler Anstrengungen kaum verbessert. Eine wesentliche Ursache dafür ist, dass die Niederschlags- und Wolkenbildung zu den komplexesten Prozessen in der Atmosphäre überhaupt zählt und hinsichtlich vieler Details immer noch unzureichend verstanden ist.

Um die Niederschlagsvorhersage zu verbessern muss deshalb zunächst das Wissen der für die Niederschlagsbildung relevanten Prozesse vertieft werden um diese anschließend realistischer modellieren zu können. Dies betrifft insbesondere die Vorgänge, die zur Bildung von einzelnen Wolkentropfen, Regentropfen und anderen Niederschlagspartikeln führen und unter dem Oberbegriff Wolkenmikrophysik zusammengefasst werden. Obwohl diese Prozesse im Mikrometer- und Millimeterbereich stattfinden sind sie von großer Bedeutung, da ihre kollektive Wirkung die Entwicklung der Wolke entscheidend beeinflusst. Auf der anderen Seite bestimmen aber die turbulenten Strömungen der Wolke und ihrer Umgebung die atmosphärischen Bedingungen in der Wolke und beeinflussen dadurch die mikrophysikalischen Prozesse. Um Niederschlagsereignisse realistisch zu simulieren müssen deshalb alle beteiligten Mechanismen berücksichtigt werden, von der Mikrophy-

sik im Millimeterbereich über die turbulenten Strukturen der Wolke im Meterbereich bis hin zur Entwicklung der bodennahen Atmosphäre im Kilometerbereich. Diese Tatsache macht es auf absehbare Zeit unmöglich alle Mechanismen direkt zu simulieren, selbst mit den derzeit leistungsstärksten Rechnern. Um die Wolken- und Niederschlagsbildung trotzdem simulieren zu können werden alle Prozesse, die nicht direkt simuliert werden können, parameterisiert, d.h. ihr Einfluss in Abhängigkeit von bekannten Modellgrößen berechnet. Das setzt aber voraus, dass die Prozesse bekannt sind.

Insbesondere im Bereich der Wolkenmikrophysik ist das Wissen über einige Mechanismen noch unzulänglich, z.B. über den Einfluss der Turbulenz auf das Tropfenwachstum. Obwohl bekannt ist, dass das Strömungsfeld in Wolken stark turbulent ist, basieren die aktuellen Parameterisierungen auf früheren Analysen für ruhende Umgebungsluft. Bis vor wenigen Jahren standen kaum Methoden zur Verfügung um die komplexen Wechselwirkungen zwischen den Tropfen und der turbulenten Strömung zu untersuchen. Inzwischen wird der Einfluss der Turbulenz mit theoretischen sowie fortschrittlichen numerischen Methoden untersucht. Erste Ergebnisse zeigen einen zum Teil deutlichen Einfluss der Turbulenz auf das Tropfenwachstum einzelner Tropfen. Allerdings ist es bisher noch nicht gelungen den Einfluss auf die gesamte Entwicklung der Wolke und damit auch auf die Niederschlagsbildung realistisch zu analysieren. Diese Fragestellung wollen wir mit Hilfe einer neuen Methode zur Simulation von Wolken systematisch untersuchen. Dazu verwenden wir ein Grobstruktursimulationsmodell (englisch: large-eddy simulation, LES) und verknüpfen es mit einem Lagrange'schen Partikelmodell. LES-Modelle werden zur Simulation von turbulenten Strömungen verwendet, die als Überlagerung verschieden großer Wirbel angesehen werden können. Sie haben die Eigenschaft, dass die meiste Energie von den großen Wirbeln (von einigen Metern bis zu einigen hundert Metern) transportiert wird, wohingegen die kleinen Wirbel (im Millimeter- und Zentimeterbereich) energiearm und für die Strömung kaum von Bedeutung sind. Diese Tatsache nutzen LES Modelle und berechnen nur die größeren Skalen direkt und parameterisieren den geringen Einfluss der kleinen Skalen. Dadurch sind sie in der Lage Gebietsgrößen von einigen Kilometern mit einer Auflösung im Meterbereich zu berechnen. Da eine solche Simulation immer noch einen extremen Rechenbedarf

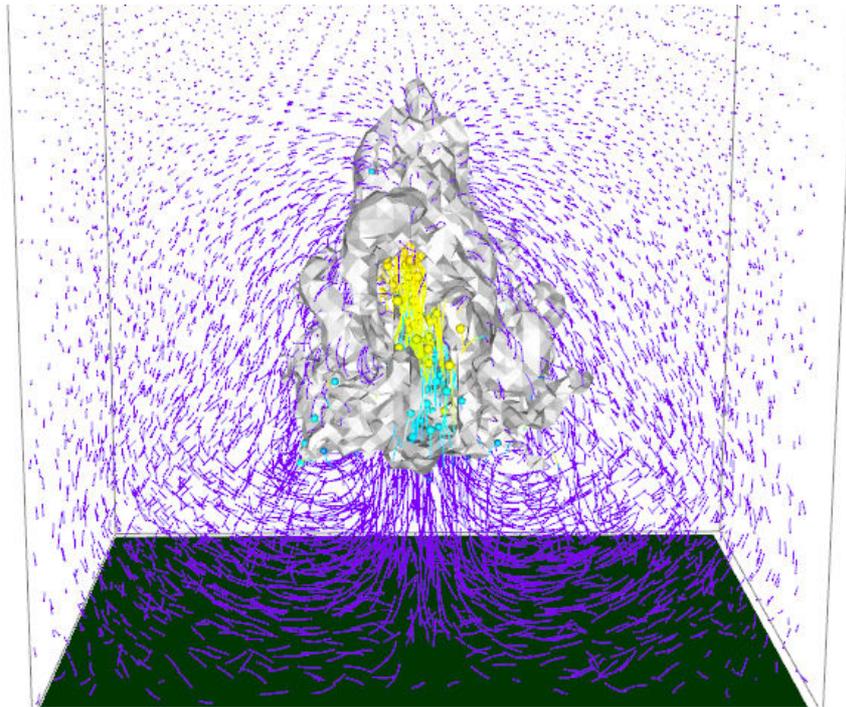


Abbildung 1: Strömungsbedingungen und Entwicklung der Tropfen im Bereich einer Wolke. Die Partikelgröße und -farbe ist dabei proportional zum Tropfenradius, wobei die lilanen Partikel Aerosole repräsentieren. Die Isooberfläche kennzeichnet Gebiete mit Flüssigwasser und macht dadurch die Wolke grafisch sichtbar.

darstellt wird dazu nicht nur ein Computer sondern eine Vielzahl von Prozessoren parallel verwendet. Für unser Projekt nutzen wir das LES-Modell PALM (Parallelisiertes LES Modell), das am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Leibniz Universität Hannover entwickelt wurde [1] und für den parallelen Betrieb auf mehreren tausend Prozessoren optimiert wurde.

Die Verknüpfung des LES-Modells mit einem Lagrange'schen Partikelmodell ermöglicht es Partikel im Modellgebiet freizusetzen und ihre Bewegungen in der turbulenten Strömung zu verfolgen. Diesen Partikeln können außerdem gewisse Eigenschaften, wie z.B. eine Masse und eine Größe, zugeordnet werden, so dass wir dadurch in der Lage sind, die Wolken- und Niederschlagstropfen einer Wolke explizit zu berechnen. Dieser neue Ansatz zur Wolkensimulation hat den Vorteil, dass die turbulente Strömung der Wolke und ihrer Umgebung realistisch simuliert werden kann (mit Hilfe des LES-Modells) und zusätzlich auch der Einfluss der Wolkenmikrophysik berücksichtigt wird (durch die Berechnung der Wolkentropfen). Außerdem ermöglicht diese Methode eine Reihe von neuen Analysen z.B. die zeitliche Entwicklung der Tropfenspektren und der Tropfenkonzentration sowie deren räumliche Variation innerhalb der Wolke.

Wie echte Wolkentropfen bewegen sich die simulierten Tropfen entsprechend ihrer Masse und der Reibung mit der Strömung der Wolke mit (siehe Abbildung). Außerdem können sie durch Kondensation (Anlagerung von Wasserdampf) und durch Kollision mit anderen Tropfen zu Niederschlagstropfen anwachsen. Natürlich können nicht alle Tropfen einer Wolke simuliert werden - das wären 100-1000 pro cm^3 . Aber wir können einige dieser Tropfen simulieren, die dann stellvertretend für viele andere Tropfen stehen. Um trotzdem eine hinreichende Statistik zu erreichen müssen im gesamten Modellgebiet insgesamt mehrere hundert Millionen Partikel simuliert werden. Diese Tatsache führt zu einem extremen Rechenaufwand und verlangt den Einsatz von einigen tausend CPU-Kernen über mehrere Tage hinweg.

Mehr zum Thema

1. Raasch S. and M. Schröter, 2001: A large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. Meteorol. Z., 10, 363-372. doi:10.1127/0941-2928/2001/0010-0363.

Förderung

DFG-Schwerpunktprogramm 1276 MetStröm

Polare Luftmassen auf ihrem Weg in die gemäßigten Breiten Darstellung der konvektiven Grenzschicht während Kaltluftausbrüchen in Wetter- und Klimamodellen

M. Gryschka, J. Kampmeyer, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover

Kurzgefasst

- In polaren Kaltluftausbrüchen gibt der Ozean große Wärme- und Feuchtemengen an die Atmosphäre ab, sodass ursprünglich kalte und trockene Luftmassen der polaren Regionen die gemäßigten Breiten (z.B. Europa) wesentlich wärmer und mit Schauerbewölkung erreichen.
- In Anbetracht der großen Energiemengen, die in einem Kaltluftausbruch umgesetzt werden, ist eine möglichst gute Wiedergabe der hierbei stattfindenden Austauschprozesse in Wetter- und Klimamodellen wünschenswert.
- Mit turbulenzauflösenden Simulationen werden hierzu exemplarisch Fälle von Kaltluftausbrüchen mit sehr hoher Auflösung und Modellgebietslängen von mehreren 100 km Länge gerechnet, sodass die Austauschprozesse im Detail untersucht werden können.
- Die aus den turbulenzauflösenden Simulationen gewonnen Erkenntnisse sollen in sogenannte Parametrisierungen der turbulenten Prozesse in Kaltluftausbruchsituationen für Wetter- und Klimamodelle einfließen.

In einem polaren Kaltluftausbruch strömt großräumig eine sehr kalte und trockene Luftmasse von den Polregionen über den relativ zur Luftmasse warmen Ozean und nimmt dabei viel Wärme und Feuchte auf. So erreicht beispielsweise eine über Grönland ursprünglich trockene Luftmasse mit einer Temperatur von -20°C Europa mit einer Temperatur von über 0°C und nicht selten mit kräftiger Schauerbewölkung. Der gesamte Fluss an Wärme in einem Kaltluftausbruch vom Ozean in die Atmosphäre ist von der Größenordnung 10^{15} Watt. Das entspricht einer Leistung von einer Million Kohlekraftwerken.

In Anbetracht der großen Energiemengen die bei diesem häufig auftretenden Phänomen umgesetzt werden, ist eine möglichst gute Wiedergabe der Austauschprozesse in Wetter- und Klimamodellen erstrebenswert. Nicht zuletzt hängt hiervon auch die Güte der Wettervorhersage für Deutschland bei bestimmten Wetterlagen ab. Bei den Austauschprozessen handelt es sich um turbulente Prozesse, welche auf einer Skala von eini-

gen 10 bis einigen 100 Metern ablaufen, sodass die Austauschprozesse nicht explizit in Wetter- und Klimamodellen berücksichtigt werden können, sondern parametrisiert werden müssen. D.h. es müssen Gesetzmäßigkeiten gefunden werden, mit Hilfe dessen sich die Austauschprozesse in einem Kaltluftausbruch auch ohne expliziter Berücksichtigung der Turbulenz beschreiben lassen. Hierzu werden mittels des turbulenzauflösenden Modells **PALM** (Parallelized Large Eddy Simulation Model) hochaufgelöste Simulationen von Kaltluftausbrüchen durchgeführt, sodass die Auswirkungen der Turbulenz auf den Wärme- und Feuchte-austausch studiert werden kann. **PALM** wurde am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Leibniz Universität Hannover entwickelt und ist für den parallelen Betrieb auf mehreren tausend Prozessoren ausgelegt.

Quasi jeder polare Kaltluftausbruch geht mit sogenannter Rollenkonvektion einher. Hierbei ist die Strömung spiralförmig in Form von zahlreichen nebeneinander liegenden Rollen mit horizontaler Rotationsachse organisiert, wie in Abbildung 1 exemplarisch anhand einer Simulation eines Kaltluftausbruches gezeigt. In Satellitenbildern lässt sich dieser Strömungstyp indirekt anhand von sogenannten Wolkenstraßen erkennen, d.h. in Form von parallel zueinander liegenden Wolkenbändern. Diese bilden sich in den aufsteigenden Ästen zwischen zwei Rollen. Der Abstand zwischen zwei Wolkenbändern wächst dabei stromabwärts an, typischerweise von anfänglich 2 km auf bis zu 8 km einige hundert Kilometer stromabwärts.

Der Einfluss der Rollenkonvektion auf die turbulenten Austauschprozesse steht im Fokus der genannten Untersuchungen. Hierzu ist ein tieferes Verständnis der den Rollen zu Grunde liegenden Physik erforderlich. So sind z.B. die notwendigen Bedingungen für das auftreten von Rollen noch nicht vollständig verstanden, wie auch die Wachstumsprozesse stromabwärts. Des Weiteren wird der Einfluss von Feuchte- und Strahlungsprozessen an den Wolken auf die turbulenten Austauschprozesse sowie Rollenkonvektion untersucht.

In einem Vorgängerprojekt konnten unter den Bedingungen eines kräftigen Kaltluftausbruches erstmals Konvektionsrollen mittels eines turbulenzauflösenden Modells simuliert werden, die auch sämtliche wie in der Natur beobachteten Charakteristiken aufwiesen. Es hat sich gezeigt, dass die Struktur der Eisrandzone einen wesentlichen Einfluss auf die Ausbildung von Konvektionsrollen hat.

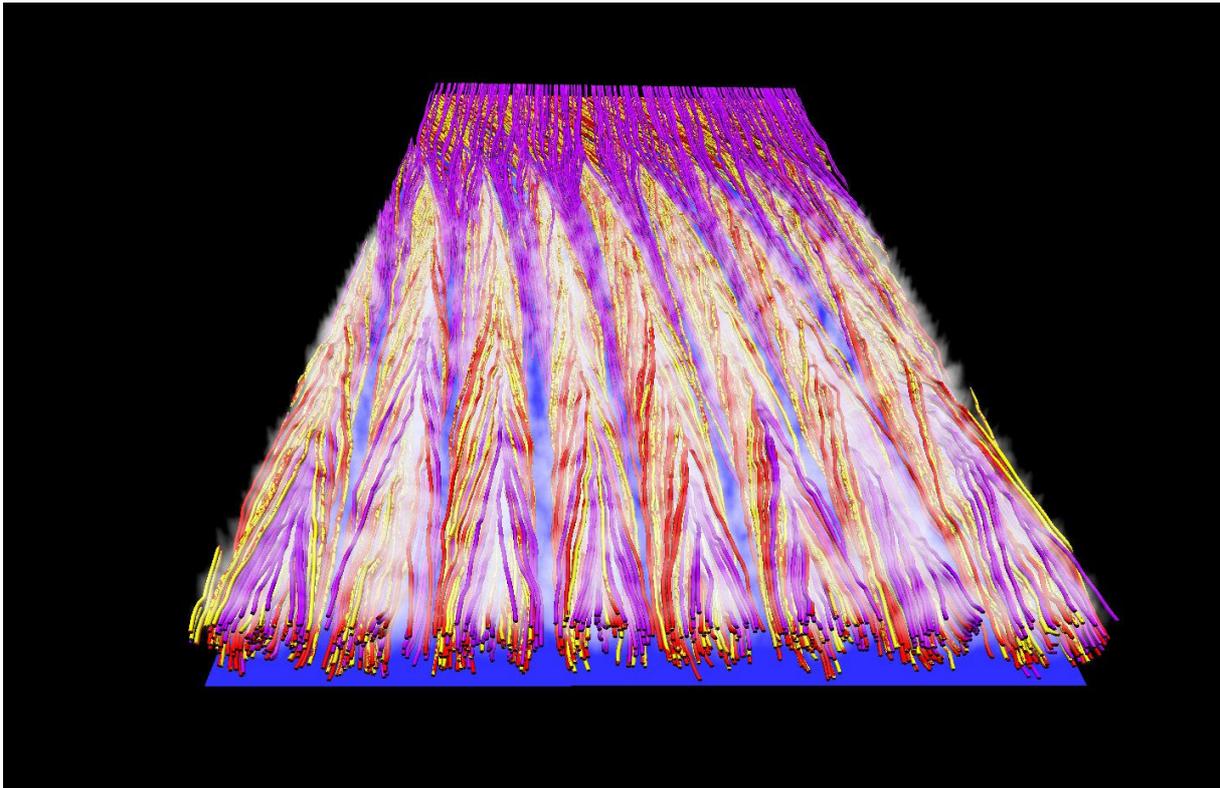


Abbildung 1: Stromlinien in einer turbulenzauflösenden Simulation eines Kaltluftausbruches: Deutlich lässt sich die spiralförmige Struktur der Konvektionsrollen erkennen.

Da in den Simulationen hierzu zum einen die kleinskaligen Turbulenzen aufgelöst werden müssen und zum anderen ein Kaltluftausbruch ein großskaliges Phänomen darstellt, sind diese sehr rechenintensiv und können nur auf Großrechnern durchgeführt werden. Mit Modellgebietsgrößen von bis zu $400 \times 60 \times 5 \text{ km}^3$ und Auflösungen des Modellgitters von bis zu 25 m weisen die Simulationen in diesem Projekt bis zu 8×10^9 Gitterpunkte auf.

Die Untersuchungen werden zusammen mit dem Alfred Wegener Institut Bremerhaven durchgeführt.

Mehr zum Thema

1. Gryschka, M., 2010: Untersuchungen zur Entwicklung von Rollenkonvektion in Kaltluftausbrüchen mittels Grobstruktursimulationen, Dissertation (2009), Technische Informationsbibliothek u. Universitätsbibliothek Hannover, 110 S.
2. Gryschka, M. C. Drüe, D. Etling, S. Raasch, 2008: On the influence of sea-ice inhomogeneities onto roll convection in cold-air outbreaks, *Geophys. Res. Lett.*, 35, L23804
3. Lüpkes, C., V. M. Gryanik, B. Witha, M. Gryschka, S. Raasch, and T. Gollnik, 2008: Modeling convection over arctic leads with LES and a non-eddy-resolving microscale model, *J. Geophys. Res.*, 113, C09028
4. Brümmner, G., 1998: Boundary layer mass, water, and heat budgets in wintertime cold-air outbreaks from the arctic sea ice, *Month. Weath. Rev.*, 125, 1824-1837

Förderung

DFG-Schwerpunktprogramm 1158 Antarktischerforschung

Welchen Einfluss hat atmosphärische Turbulenz auf die Flugsicherheit?

Numerische Simulation zur Wechselwirkung der Atmosphäre mit der Tragflügelumströmung

S. Raasch, C. Helmke, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover

Kurzgefasst

- Für Untersuchungen des Strömungsabrisses an Flugzeugflügeln während der Landephase werden Computersimulationen eingesetzt.
- Das Ziel dieser Untersuchungen ist eine Erweiterung des fliegbaren Bereiches, der geringere Fluggeschwindigkeiten als bisher üblich zulässt. Dies führt u.a. zu weniger Lärmimmissionen.
- Die atmosphärische Turbulenz in der unteren Atmosphäre kann einen großen Einfluss auf diesen Strömungsabriss haben.
- Entsprechende Turbulenzsimulationen sind extrem aufwendig.
- Solche Modellläufe benötigen mehrere Wochen CPU-Zeit auf 4096 Prozessorkernen und zählen zu den weltweit aufwendigsten meteorologischen Turbulenzsimulationen, die je durchgeführt wurden.

Flugzeuge müssen während des Landeanfluges innerhalb der Grenzen des risikofrei fliegbaren Bereiches bleiben. In diesem Bereich ist die Gefahr eines sogenannten Strömungsabrisses um den Tragflügel normalerweise sehr gering. Bei einem Strömungsabriss wird die Luft, die oberhalb des Tragflügels strömt, abgelöst, das Flugzeug hat keinen Auftrieb mehr und sackt ab. Verursacht wird diese Ablösung durch zu hohe Anstellwinkel der Tragflügel. Die Gefahr ist besonders groß bei geringen Fluggeschwindigkeiten, denn hier sind wesentlich größere Anstellwinkel nötig. Aufgrund des hohen Risikos können die genauen Grenzen des fliegbaren Bereiches allerdings nicht ausgetestet werden. Für den Flugverkehr hätte es jedoch Vorteile, wenn im Landeanflug langsamer als bisher üblich geflogen werden könnte. Weniger Lärmimmissionen und höheren Flugfrequenzen wären die Folge. Ein Ziel ist es daher, die Grenzen des fliegbaren Bereiches zu ermitteln und unter Beibehaltung der Sicherheit zu erweitern. Hierfür sind gezielte Untersuchungen des Strömungsabrisses notwendig. Reale Flugexperimente eignen sich für solche Untersuchungen weniger, da sie meist zu teuer vor allem aber auch zu risikoreich sind. Eine Alternative bieten nu-

merische Computersimulationen von Strömungen um Tragflügel. Die Simulationen erlauben einen detaillierten Einblick, da Tragflügelumströmungen verschiedenster Flugzustände berechnet werden können und an jeder Stelle des Tragflügels zu jedem Zeitpunkt der Simulation Daten zur Verfügung stehen.

Während des Landeanfluges befinden sich die Flugzeuge nahe der Erdoberfläche. Hier herrschen Windverhältnisse, die sich von denen in größeren Höhen stark unterscheiden. Die Strömungen in der unteren Atmosphäre werden von der Erdoberfläche direkt beeinflusst. Je nach Wetterlage und Tageszeit ist dieser Einfluss vertikal auf einen Bereich von wenigen Dekametern bis maximal 2-3 km beschränkt. In dieser Schicht, der atmosphärischen Grenzschicht, ist die Strömung sehr turbulent, also stark verwirbelt. Die Art und Stärke der Turbulenz ist dabei sehr vom Untergrund und der Wetterlage abhängig. Diese verschiedenen Wirbel können einen großen Einfluss auf die Tragflügelumströmung eines Flugzeuges und damit auf den Strömungsabriss haben. Für Simulationen von Tragflügelumströmungen werden bisher die Turbulenzverhältnisse in der Atmosphäre gar nicht oder nur sehr unzureichend mittels statistischer Modelle berücksichtigt. Unser Ziel ist daher, realistischere atmosphärische Windfelder für solche Simulationen bereitzustellen. Das Projekt ist Teil der DFG-Forschergruppe "Simulation des Überziehens von Tragflügeln und Triebwerksgondeln" (FOR1066), an der auch industrielle Partner wie Airbus und Rolls Royce beteiligt sind. Unsere Projektpartner benutzen von uns simulierte Windfelder dann in ihren Modellen, um den Einfluss unterschiedlicher atmosphärischer Turbulenzverhältnisse auf den Strömungsabriss zu ermitteln.

Für die Bereitstellung der turbulenten Windfelder werden zwei verschiedene Methoden angewandt. Die erste Methode nutzt Daten realer eindimensionaler Flugmessungen in der atmosphärischen Grenzschicht und berechnet damit ein dreidimensionales Windfeld, das die gleichen statistischen Eigenschaften besitzt, wie die Atmosphäre zur Zeit der Messungen. Diese Methode ist vergleichsweise schnell und kann auf eine große Datenbank von Messungen zurückgreifen. Ihr Nachteil ist jedoch, dass dreidimensionale kohärente Strukturen und geordnete Formationen, die typischerweise in der unteren Atmosphäre auftreten, nicht erzeugt werden können. Die zweite Methode verwendet

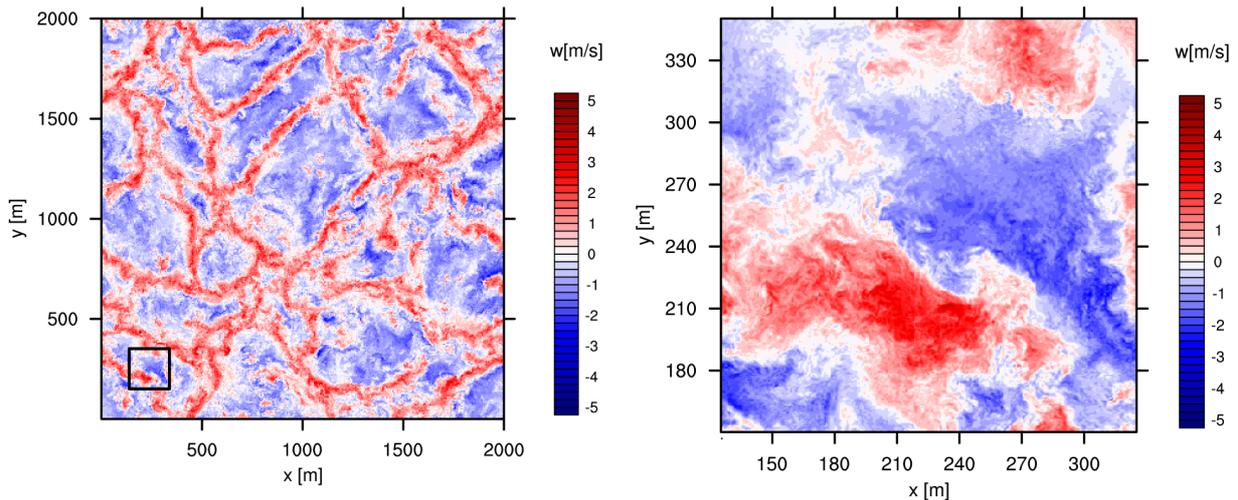


Abbildung 1: Sicht von oben auf einen Schnitt durch die Atmosphäre in 50 m Höhe. Dargestellt ist der vertikale Wind w (Rot entspricht Aufwinden, Blau Abwinden), wie er sich z.B. bei einer sommerlichen Hochdrucklage über einem homogenem Untergrund ergäbe, simuliert mittels LES. Das 2 km x 2 km große Gebiet links zeigt organisierte Strukturen breiter Abwindbereiche umgeben von Aufwinden. Die rechte Graphik entspricht dem 200 m x 200 m kleinen gekennzeichneten Ausschnitt und zeigt, bis zu welchen Details die turbulenten Strukturen aufgelöst werden.

das Grobstruktursimulationsmodell (engl.: large-eddy simulation, LES) **PALM** und simuliert realistische Windfelder. **PALM** (**PAR**allelisiertes **LES** **Modell**) wurde innerhalb des letzten Jahrzehnts am Institut für Meteorologie und Klimatologie der Universität Hannover entwickelt. Es ist in der Lage, die turbulenten Windverhältnisse innerhalb der atmosphärischen Grenzschicht zu berechnen und typische realistische Strukturen sehr präzise wiederzugeben (vgl. Abbildung 1).

Das LES Modellgebiet, in dem die Strömung berechnet wird, repräsentiert einen Teil der Atmosphäre und bedient sich eines dreidimensionalen regelmäßigen Gitters. Die Atmosphäre wird dabei in viele kleine Gitterboxen, deren Kantenlänge man als Gitterweite bezeichnet, unterteilt. Für jede Box berechnet das Modell einen Wert der meteorologischen Größen, z.B. Wind oder Temperatur. Aus all diesen Werten ergibt sich dann die komplexe dreidimensionale Struktur der Strömung. In der unteren Atmosphäre existieren Wirbel der unterschiedlichsten Größe (wenige Millimeter bis zu einigen Kilometern im Durchmesser). Die Gitterweite des Modells bestimmt dabei die Größe der kleinsten Wirbel, die vom Modell noch simuliert werden können. Für die Simulation zur Tragflügelumströmung müssen noch Wirbel berücksichtigt werden, die mindestens eine Größenordnung kleiner als die Spannweite des Tragflügels sind. Dies erfordert eine sehr kleine Gitterweite von nur 0.5 m. Gleichzeitig muss das Modellgebiet aber groß genug gewählt werden, da-

mit sich eine realistische atmosphärische Grenzschicht entwickeln kann, die sehr große Strukturen enthält (siehe Abbildung 1). Beide Bedingungen führen zu einer sehr hohen Anzahl an Gitterpunkten (mehr als 20 Milliarden). Die entsprechend extrem aufwändigen Simulationen der atmosphärischen Grenzschicht sind weltweit einmalig und erfordern selbst beim parallelen Einsatz von 4096 Prozessorkernen Rechenzeiten von mehreren Wochen.

Solch aufwändige Simulationen sind derzeit im Rahmen der industriellen Flugzeugentwicklung noch nicht realisierbar. Hier werden die anfangs genannten statistischen Modelle eingesetzt. In unserem Projekt wird derzeit durch Vergleich mit den LES-Ergebnissen ermittelt, ob die statistischen Modelle die atmosphärische Turbulenz hinreichend genau beschreiben. Später soll dann die grundsätzliche Wirkung atmosphärischer Turbulenz unterschiedlicher meteorologischer Szenarien auf den Strömungsabriss untersucht werden.

Mehr zum Thema

1. Raasch, S., Schröter, M., 2001. PALM-A large-eddy simulation model performing on massively parallel computers, *Meteo. Z.*, 10, 363-372. doi:10.1127/0941-2948/2001/0010-0363.

Förderung

DFG-Forschergruppe 1066

Deutschland geht offshore

Entwicklung und Validierung eines Grobstruktursimulationsmodells zur Berechnung der Strömungsverhältnisse inner- und außerhalb von Offshore-Windparks

G. Steinfeld, ForWind - Zentrum für Windenergieforschung, Institut für Physik, Carl von Ossietzky Universität Oldenburg

Kurzgefasst

- Über dem Meer weht der Wind stetiger und kräftiger als an Land. Windenergieanlagen (WEA) auf dem Meer lassen höhere Erträge als vergleichbare WEA an Land erwarten.
- Zur optimalen Nutzung der Offshore-Windenergieressourcen bedarf es eines verbesserten Verständnisses der marinen atmosphärischen Grenzschicht (MAG). Simulationen können dabei die wenigen (sehr teuren) Mastmessungen ergänzen.
- Ertragsprognosen für Windparks erfordern die Berücksichtigung von Abschattungseffekten, denn WEA im Nachlauf anderer WEA erfahren ein Windgeschwindigkeitsdefizit und eine erhöhte Turbulenzintensität.
- Bisher werden recht einfache Ingenieursmodelle für Ertragsberechnungen eingesetzt. Unter Verwendung tausender CPUs können Windparkströmungen nun auch detailliert mit LES-Modellen simuliert werden und die Ergebnisse in Verbesserungen der Ingenieursmodelle einfließen.

Ziel der Bundesregierung ist eine deutliche Erhöhung des Anteils der erneuerbaren Energien an der Energieversorgung. Daher strebt sie einen Ausbau der Nutzung der Offshore-Windenergieressourcen an. In einer EU-Studie von 1995 wurde das Offshore-Windenergiepotenzial innerhalb der EU mit 3000 TWh pro Jahr abgeschätzt (Stromverbrauch in der EU 2002: 2563 TWh). Aufgrund der geringen Rauigkeit der Meeresoberfläche im Vergleich zu Landoberflächen ist über dem Meer mit günstigeren Bedingungen für die Windenergienutzung zu rechnen: höhere mittlere Windgeschwindigkeiten und ein stetiger wehender Wind, der geringere mechanische Belastungen der WEA erwarten lässt.

Zur Initialisierung der Nutzung der Windenergieressourcen in deutschen Gewässern fördert das Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit (BMU) die technisch-wissenschaftliche Begleitforschung im deutschen Offshore-Testfeld alpha ventus. Es liegen zwar z.B. aus Dänemark bereits Erfahrungen mit Offshore-

WEA vor, allerdings zeichnen sich die geplanten deutschen Offshore-Windparks durch große Wassertiefen und Entfernungen von der Küste aus. Die eingesetzten WEA sind größer als bisher eingesetzte WEA.

Eines der Projekte der BMU-Forschungsinitiative im Testfeld alpha ventus, ist das Verbundforschungsprojekt OWEA (Verifikation von Offshore-WEA). Ziele dieses Projekts sind unter anderem eine erhöhte Genauigkeit von Ertragsprognosen für Offshore-WEA und Offshore-Windparks sowie eine Reduktion der Investitions- und Betriebskosten für Offshore-WEA durch eine verbesserte Prognose der zu erwartenden, teilweise durch benachbarte Anlagen verursachten Belastungen.

ForWind (Universität Oldenburg) trägt zum OWEA-Projekt auch durch Grobstruktursimulationen der MAG, von WEA-Nachlaufströmungen in der MAG sowie der atmosphärischen Strömung innerhalb des Windparks alpha ventus bei. Zur Anwendung gelangt dabei das LES-Modell PALM [1]. Mit Hilfe der Simulationen soll die ungestörte, vor allem aber die durch vorhandene WEA modifizierte Struktur der MAG mit in Messungen und vorangegangenen numerischen Simulationen bisher nicht erreichter räumlicher und zeitlicher Auflösung untersucht werden. Die genaue Kenntnis des Windangebots am Standort einer WEA ist Voraussetzung für verlässliche Ertragsprognosen. Die Struktur der MAG ist bisher bei weitem noch nicht so gut erforscht wie die Struktur der atmosphärischen Grenzschicht über Land. Aufgrund der vergleichsweise hohen Kosten für die Errichtung entsprechender Messtürme im Meer existieren bisher nur wenige Messmasten, an denen ein Bild über die vertikale Struktur der MAG bis in Höhen von etwa 100 m gewonnen werden kann. Grobstruktursimulationen stellen ein vielversprechendes Mittel dar, um die Erkenntnisse aus den Messungen zu erweitern, denn WEA reichen weit über Höhen von 100 m hinaus.

Die Abschätzung des potentiellen Energieertrags sowie der Lebensdauer einzelner WEA innerhalb eines Windparks wird dadurch erschwert, dass die atmosphärische Grenzschicht durch eine in Betrieb befindliche WEA stark modifiziert wird. Auch noch viele Rotordurchmesser hinter einer WEA ist ein Windgeschwindigkeitsdefizit und eine Erhöhung der Turbulenzintensität im Vergleich zur ungestörten Strömung festzustellen.

Wie stark die Modifikation der Strömung ist, hängt unter anderem vom Abstand zwischen den

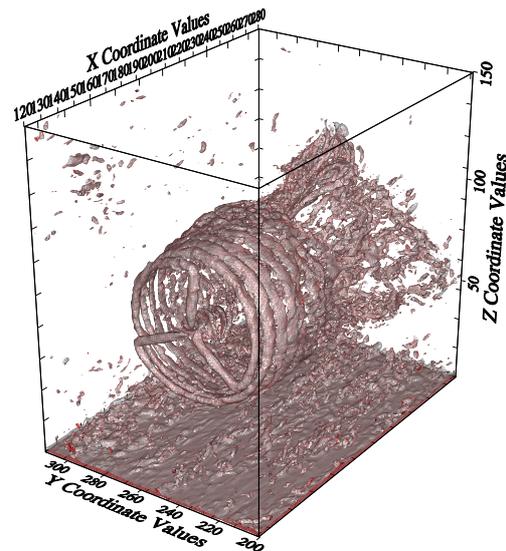


Abbildung 1: Vorticity-Isooberfläche in einem Teil des LES-Modellgebiets bei turbulenter Anströmung einer WEA mit Signalen einer helikalen Wirbelstruktur im nahen Nachlauf und eines Übergangs zum fernen Nachlauf. Die Einheit der Achsenrößen ist m.

beiden WEA, aber auch von der atmosphärischen Schichtung und der Rauigkeit des Untergrundes ab. Es ist zu erwarten, dass die Erholung des Nachlaufs umso langsamer erfolgt, je geringer die Turbulenzintensität der ungestörten Strömung ist. Über dem Meer ist mit geringeren Werten der Turbulenzintensität zu rechnen als über Land. Die Erholung der Nachlaufströmung erfolgt daher über dem Meer vermutlich langsamer, so dass eventuell größere Abstände zwischen benachbarten Windenergieanlagen benötigt werden. Grobstruktursimulationen von Nachlaufströmungen für verschiedene Unterlagen können zur Quantifizierung des Einflusses der Turbulenzintensität auf die Nachlaufenerholung beitragen.

In diesem Projekt am HLRN soll eine systematische Untersuchung der Struktur der mittleren Eigenschaften sowie der Turbulenzcharakteristiken der MAG inner- und außerhalb des vor Borkum gelegenen Offshore-Testfelds alpha ventus mit dem Grobstruktursimulationsmodell PALM für verschiedene thermische Schichtungen, Rauigkeiten und großskalige Druckgradienten erfolgen. Die WEA werden dabei nicht explizit aufgelöst (die gleichzeitige Auflösung der Strömung an den Rotoren und innerhalb eines kompletten Windparks ist derzeit selbst auf den leistungsstärksten Hochrechnern nicht möglich), sondern die Auswirkungen der WEA auf die atmosphärische Grenzschicht werden parametrisiert. Hierfür wurden die sogenannte Aktuatorscheiben- sowie die Aktuatorlinienmethode in das Modell PALM implementiert [2].

Die Ergebnisse der Simulationen (Schritt 1: MAG ohne WEA; Schritt 2: MAG mit einzelner WEA, Schritt 3: MAG mit Windpark) sollen mit Messdaten aus dem deutschen Offshore-Testfeld alpha ventus und der benachbarten Messplattform FINO-1 verifiziert werden. Die Ergebnisse sollen schließlich zur Ableitung geeigneter Beschreibungen von Nachlaufströmungen in Ingenieursmodellen sowie in mesoskaligen Modellen, mit denen die großskaligen Auswirkungen eines Ausbaus der Windenergienutzung auf dem Meer untersucht werden sollen, verwendet werden.

Mehr zum Thema

1. Raasch, S. und M. Schröter, 2001: A large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. *Meteorol. Z.*, 10, 363-372, doi:10.1127/0941-2948/2001/0010-0363
2. Steinfeld, G., Tambke, J., Heinemann, D. und J. Peinke, 2010: Development of a large-eddy simulation model for the analysis of flow conditions in offshore wind farms, *Proceedings of Torque 2010, Heraklion, Greece*

Förderung

Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und Reaktorsicherheit, RAVE-Initiative, Verbundprojekt Verifikation von Offshore-Windenergieanlagen (OWEA)

Turbulenz in der Wettervorhersage

Hochauflösende Grobstruktursimulationen atmosphärischer Grenzschichtturbulenz

R. Heinze, S. Raasch, Institut für Meteorologie und Klimatologie, Leibniz Universität Hannover

Kurzgefasst

- Atmosphärische Strömungen in Bodennähe sind in der Regel turbulent.
- In der Wettervorhersage muss diese Turbulenz über vereinfachte Modelle berücksichtigt werden, die immer noch eine der wesentlichen Schwachstellen der Vorhersage sind.
- Die Weiterentwicklung dieser Turbulenzmodelle erfordert ein besseres Verständnis der Turbulenzeffekte, die durch Messungen nur sehr schwer zugänglich sind.
- Turbulenzeffekte können aber auch mit sehr hochauflösenden Simulationsmodellen untersucht werden.
- Solche Turbulenzsimulationen sind sehr rechenintensiv und erfordern den gleichzeitigen Einsatz von mehreren tausend Prozessoren.

Die Atmosphäre setzt sich aus mehreren Schichten zusammen. Die unterste Schicht wird als atmosphärische Grenzschicht bezeichnet und ist diejenige Schicht, in der wir leben. Sie hat eine Höhe von 1–2 km und in ihr macht sich der Einfluss des Bodens bemerkbar. Im Gegensatz zu den anderen Schichten der Atmosphäre, zeichnet sich die Grenzschicht durch das Vorhandensein von Turbulenz aus. Unter Turbulenz versteht man mehr oder weniger zufällige, sowohl räumliche als auch zeitliche Schwankungen des Windes, der Temperatur und weiterer Größen, die für den Menschen beispielsweise als Böen spürbar sind. Allgemein wird Turbulenz als Überlagerung von Wirbeln unterschiedlichster Größe, von Millimetern bis zu einigen hundert Metern, beschrieben. Durch Turbulenz werden u.a. Impuls, Wärme und Feuchte vom Erdboden aus in die Atmosphäre transportiert. Somit stellt die Turbulenz einen wesentlichen Antrieb für das Wettergeschehen dar. Am Oberrand der Grenzschicht bilden sich in der Regel Wolken aus. Diese Wolken sind im Vergleich zu Wolken höherer Schichten relativ flach und produzieren selten Niederschlag. Man unterscheidet zwei Arten. Zum einen können sich kleine, haufenförmige Wolken, die sog. Kumuluswolken ausbilden. Zum anderen kommt eher schichtartige Bewölkung vor, in der aber noch haufenförmige Strukturen zu erkennen sind. Diese Wolkenart bezeichnet man als Stratokumulus.

Das Wettergeschehen wird mittels Wettervorhersagemodellen, die natürlich auch die atmosphärische Grenzschicht umfassen, vorausberechnet. Die Vorhersagen werden nur für diskrete Punkt im Raum gemacht, die Abstände (Gitterweiten) von einigen Kilometern aufweisen. Da aber die einzelnen Wirbel, die Turbulenz ausmachen, wesentlich kleiner als die Gitterweiten sind, können sie nicht vom Wettermodell selber berechnet werden. Aber die Wirkung der Turbulenz muss in der Wettervorhersage dennoch berücksichtigt werden, weil ohne sie ein physikalischer Prozess fehlen würde und dieses zu schlechten Vorhersagen führen würde. Die Berücksichtigung geschieht durch Verwendung von sog. Turbulenzmodellen, die auf der statistischen Beschreibung von Turbulenz beruhen. In diesen Modellen wird die Turbulenz parametrisiert, d.h. aus geeigneten Annahmen heraus mit Hilfe der Modellgrößen berechnet.

In unserem Projekt, das in Zusammenarbeit mit dem Deutschen Wetterdienst durchgeführt wird, geht es darum, die Turbulenz und ihre statistischen Eigenschaften im Hinblick auf diese Turbulenzparametrisierungen zu untersuchen und damit die Wettervorhersage zu verbessern. Dazu verwenden wir ein Modell, welches die Turbulenz auflöst, d.h. direkt berechnet und nicht nur ihre Wirkung modelliert, wie es in der Wettervorhersage notwendig ist. Daher setzen wir ein sog. Grobstruktursimulationsmodell (englisch: large-eddy simulation, LES) ein, in dem Gitterweiten von einigen Metern benutzt werden. Damit können zwar die kleinsten Turbulenzelemente von einigen Millimetern immer noch nicht explizit berechnet werden. Dies stellt aber kein Problem dar, weil die kleinen Wirbel auch nur einen geringen Anteil am Transport haben. Letztendlich kann mit der LES eine turbulente Strömung simuliert werden und damit auch eine Untersuchung der Turbulenz stattfinden.

Das LES Modell, welches für unsere Untersuchungen zum Einsatz kommt, ist das **PAR**allelisierte **LES** Modell **PALM** [1]. Es wird stetig am Institut für Meteorologie und Klimatologie weiter entwickelt [2] und ist für den Einsatz auf Großrechnern optimiert.

Im Grunde beruhen die Turbulenzmodelle in den Wetter- und auch in den Klimamodellen auf den Bilanzen von statistischen Momenten. Statistische Momente der Turbulenz sind u.a. Varianzen der einzelnen Modellvariablen, wie zum Beispiel die quadratische Temperaturfluktuation. Für diese Momente werden Gleichungen aufgestellt, welche die zeitliche Entwicklung der Momente beschreiben. Bei der Bilanzanalyse werden die einzelnen Ter-

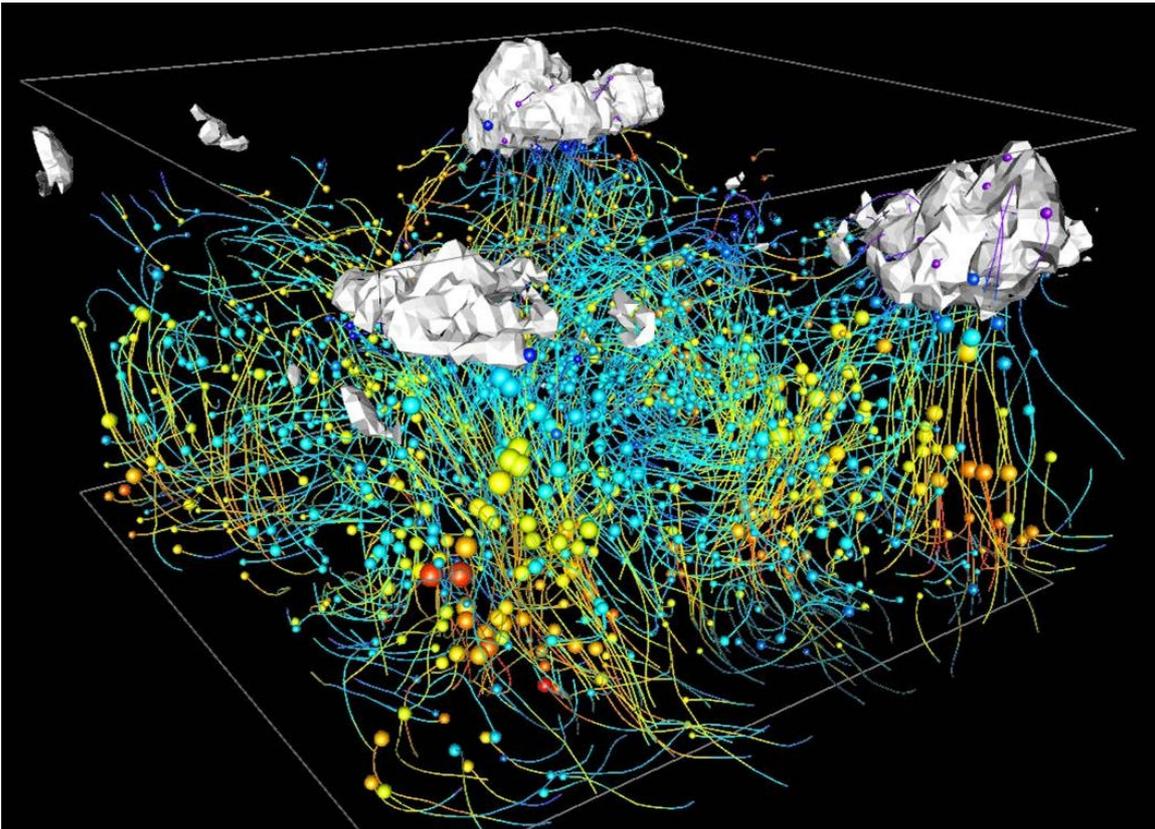


Abbildung 1: Momentaufnahme einer turbulenten Strömung mit Kumulus Wolken, die mit LES simuliert wurde. Partikel, die in der Strömung freigesetzt werden, machen die turbulenten Bewegungen sichtbar. Die Farbe der Partikel zeigt ihren Auftrieb an, wobei rot für positiven und blau für negativen Auftrieb steht. Große Partikel bewegen sich schnell und kleine langsam. Kumuluswolken sind weiß eingefärbt und bilden sich dort, wo der Auftrieb besonders hoch ist.

me dieser Gleichungen miteinander verglichen, um zu bestimmen, welche Terme, und damit natürlich auch physikalischen Prozesse, das zeitliche Verhalten der Momente bestimmen. Daraus ergibt sich schließlich, welche Prozesse in der Parametrisierung berücksichtigt werden sollten. Außerdem ermöglicht die Bilanzanalyse die generelle Eignung von bereits verwendeten Parametrisierungen zu überprüfen und auf deren Grundlage weiter- oder auch neu zu entwickeln. Insbesondere wurde der Einfluss von flacher Bewölkung (Kumulus, Stratokumulus) auf die Bilanzen bisher noch nicht systematisch untersucht. Da vor allem Stratokumulusbewölkung wichtig für den Strahlungshaushalt der Erde ist, ist eine gute Berücksichtigung dieser Prozesse in den Turbulenzparametrisierungen der Wetter- und Klimamodelle notwendig. Daher werden im Rahmen dieses Projektes insbesondere Bilanzen für bewölkte Grenzschichten, wie in der Abbildung dargestellt, untersucht. Die Abbildung zeigt eine Momentaufnahme der turbulenten Strömung in einer Grenzschicht mit Kumuluswolken.

Um die Bilanzen nun mit höchst möglicher Genauigkeit zu bestimmen, wird unser LES-Modell PALM mit kleinen Gitterweiten von einigen Metern betrieben. Solche Simulationen sind sehr aufwendig und erfordern die Verwendung von mehreren tausend Prozessoren, wie sie am HLRN zur Verfügung gestellt werden.

Mehr zum Thema

1. Raasch, S. und M. Schröter, 2001: A large-eddy simulation model performing on massively parallel computers. *Meteorol. Z.*, 10, 363-372. doi:10.1127/0941-2948/2001/0010-0363
2. <http://palm.muk.uni-hannover.de>

Förderung

Extramurale Forschung des Deutschen Wetterdienstes (DWD). Das Projekt wird am HLRN mit bis zu 7680 parallel genutzten CPU-Kernen unterstützt.

Kann das Schmelzen des Grönlandeises den Golfstrom schwächen? Auswirkungen des Klimawandels auf die Zirkulation des Atlantischen Ozeans

E. Behrens, C.W. Böning, IFM-GEOMAR, Leibniz-Institut für Meereswissenschaften an der Universität Kiel

Kurzgefasst

- Der Klimawandel und die damit einhergehende globale Erwärmung, insbesondere der Polargebiete, können das Abschmelzen des grönländischen Gletschereises beschleunigen.
- Das dadurch zusätzlich frei werdende Schmelzwasser kann neben dem bekannten globalen Meeresspiegelanstieg auch zu Veränderungen in der Ozeanzirkulation, z.B. dem Golfstrom, der Warmwasserheizung Europas, führen.
- Die Ausbreitung des Schmelzwassers wird durch Randströmungen und Wirbel geprägt.
- Mithilfe wirbelauflösender Ozeanmodelle wird untersucht, welche Auswirkungen künstliche Abschmelzszenarien auf die Ozeanzirkulation im Nordatlantik haben können.

Ein besonders gefährdeter Lebensraum in Zeiten des Klimawandels sind die Polargebiete auf der Nord- und Südhalbkugel, da hier das Gleichgewicht extrem empfindlich auf Veränderungen reagiert und die Nischen der dort vorkommenden Lebewesen nur sehr klein sind.

Um die Folgen des Klimawandels verstehen und studieren zu können, sind numerische Modelle unabdingbar, da man allein aus Beobachtungen von Klimagrößen wie z.B. Lufttemperatur an einem Ort nur bedingt Rückschlüsse auf globale Prozesse ziehen kann. Numerische Modelle versuchen daher auf Basis von physikalischen Gleichungen die realen Prozesse und Reaktionen des Klimasystems zu simulieren. Um die komplexen Prozesse berechnen zu können sind gewaltige Rechenkapazitäten notwendig.

In diesem Projekt liegt das Hauptaugenmerk auf dem Ozean und dessen Reaktion auf ein bestimmtes Klimawandel-Szenario, das Abschmelzen des Grönländischen Festlandeises. Aktuelle Arbeiten von Rignot[1] und Serreze[2] haben ein deutlich beschleunigtes Abschmelzen des Grönlandeises und des polaren Meereises über die letzten Jahrzehnte festgestellt. Allein diese Veränderungen haben weitreichende globale Folgen. So kommt es zum Beispiel zu Rückkopplungsprozessen im globalen Strahlungshaushalt der Erde, da Eisflächen mehr Sonnenlicht zurück in den Weltraum abstrahlen als eisfreie und damit die Klimae-

rwärmung durch deren Schrumpfung weiter beschleunigt werden kann.

In unseren Simulationen wird die Reaktion des globalen Ozeans auf vorgegebene atmosphärische Bedingungen untersucht. Anders als in gekoppelten Klimasimulationen werden dadurch direkte Rückkopplungsprozesse zwischen Atmosphäre und Ozean unterdrückt, andererseits kann aber das rechenzeitintensive Atmosphärenmodell eingespart werden. Die dadurch frei werdenden Ressourcen werden für eine erhebliche Verfeinerung des Ozeanmodells verwendet. Somit ist es möglich, die horizontale Auflösung um ein vielfaches gegenüber heute gängigen Klimamodellen zu steigern und weitere wichtige Prozesse (sogenannte mesoskalige Wirbel) zu simulieren. So beträgt die Maschenweite in der Region um Grönland weniger als 5 km gegenüber von ~ 100 km in Klimamodellen. Dadurch werden wichtige Wirbelprozesse in den Bildungsregionen von Tiefenwasser aufgelöst, welche in Klimamodellen völlig fehlen. In den durchgeführten Abschmelzszenarien wird künstlich der kontinentale Süßwasserabfluss um Grönland erhöht und mit einem Referenzlauf verglichen. Dies erlaubt Rückschlüsse auf die Auswirkungen des Abschmelzens des Grönländischen Eisschildes. Besonders interessant ist, wo dieses zusätzliche Schmelzwasser mit den vorherrschenden Strömungen hintransportiert wird. Hierzu wird künstlich das zusätzliche Schmelzwasser "eingefärbt" d.h. es wird ein virtueller Spurenstoff eingebracht der die Ausbreitung infolge advektiver und diffusiver Strömungsprozesse sichtbar werden lässt (Abb. 1).

Ein wichtiger Prozess durch den zusätzliches Schmelzwasser Einfluss auf den Ozean haben kann, ist neben dem Beitrag zum Meeresspiegelanstieg, die empfindliche vom Salzgehalt abhängige Tiefenwasserbildung. In den Gebieten um Grönland sinken große Wassermengen in die Tiefe - ein wichtiges Element der globalen Umwälzzirkulation, durch die im Nordatlantik, als Ausläufer des Golfstromes, warmes Oberflächenwassers weit nach Norden transportiert wird. Dieses filigrane Gleichgewicht wird aber durch den Eintrag von Schmelzwasser, das auf Grund seines geringen Salzgehaltes eine geringere Dichte als das Meerwasser hat, gestört. Das Schmelzwasser schwimmt quasi auf dem Meerwasser und entzieht es so dem Einfluss der winterlichen Abkühlung, welche notwendig für das Absinken und den Antrieb der Umwälzbewegung im Nordatlantik ist. Eine dadurch verursachte Ver-

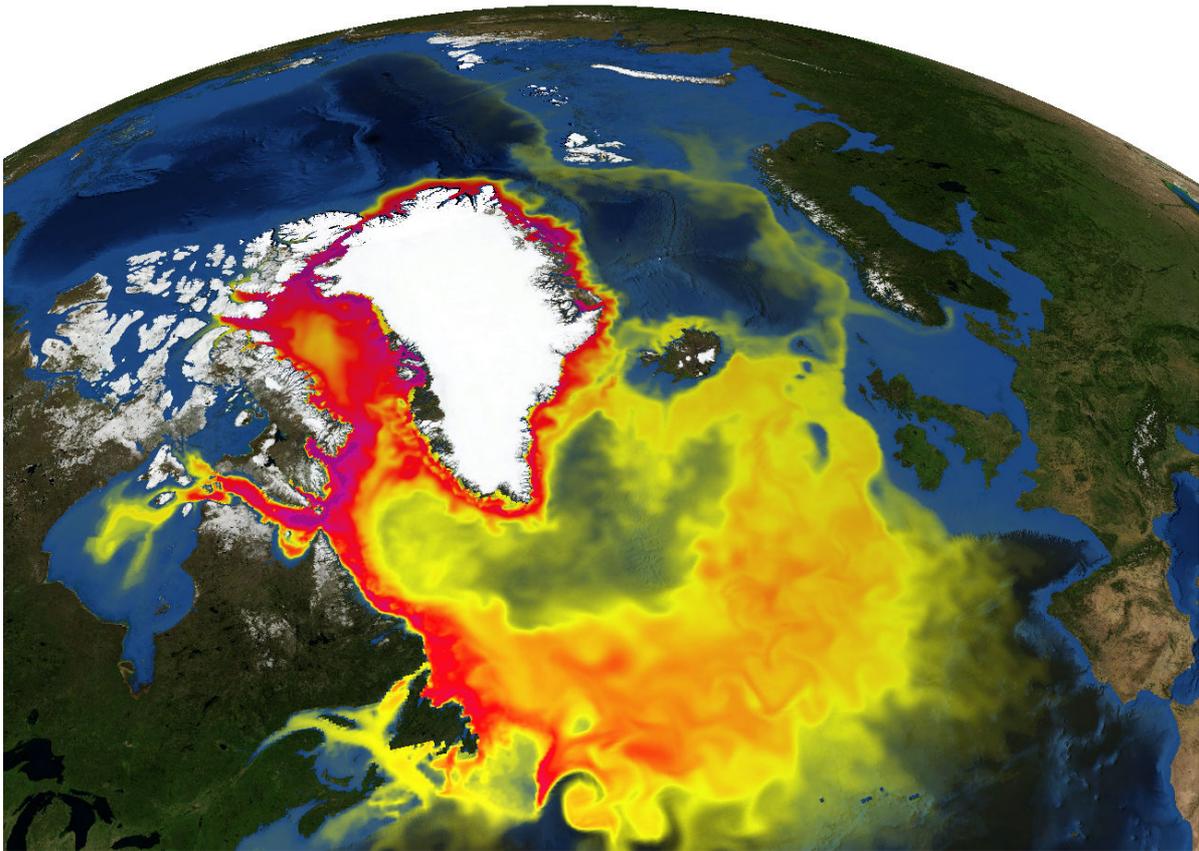


Abbildung 1: Schmelzwasserverteilung von Grönland nach rund 10 Jahren. Die Abbildung zeigt die Region um Grönland mit Topographie, überlagert von der vertikal integrierten Schmelzwasserverteilung die um Grönland herum ins Meer gelangt und dann mit den Küstenströmungen und ozeanischen Wirbeln verteilt wird. Hohe Schmelzwasseranteile (rot) findet man entlang der Küste Grönlands, in der Baffin Bucht und entlang des Labrador Stromes. Die wichtigen konvektiven Regionen in der Labrador See und nördlich von Island werden zunächst nur gering beeinflusst.

ringerung der Umwälzbewegung und damit verringertem Wärmetransport aus dem südlichen Atlantik nach Norden könnte weitreichende Folgen für Europa und dessen mildes gemäßigtes Klima haben. Eine wichtige offene Frage in diesem Geschehen ist die Ausbreitung des Schmelzwassers: sind die kritischen Tiefenbildungsgebiete überhaupt betroffen, welche Rolle spielen die Randströmungen und die Wirbel im Ozean? Erste Ergebnisse unserer Simulationen zeigen mit dem relativ hochauflösenden Modell deutlich (Abb. 1), dass kleinskalige Strömungsprozesse, wie im realen Ozean, entscheidend für die Ausbreitung des Schmelzwassers sind. Dies können derzeitige Klimamodelle durch ihr grobe Auflösung nicht leisten: das Schmelzwasser wird dort über die ganze Region eher gleichmäßig verteilt, was sichere Abschätzungen z.B. der Reaktion der Konvektion auf vermehrtes Schmelzwasser und damit auch die Reaktion auf die Umwälzbewegung bisher verhindert.

Mehr zum Thema

1. Rignot, E. and Kanagaratnam, P., 2006: Changes in the velocity structure of the Greenland ice sheet. *Science* 311, 986–990
2. Serreze, M. C., M. M. Holland, and J. Stroeve, 2007: Perspective on the Arctic's shrinking sea-ice cover, *Science*, 315, 1533–1536

Förderung

EU-THOR, "Thermohaline Overturning, at Risk?"
<http://www.eu-thor.eu>

Wann, woher und wohin? - Untersuchungen zur Geschichte und Zukunft von CO₂ im Ozean

Investigating the role of ocean ventilation in anthropogenic CO₂ uptake and sequestration via Green functions

A. Oschlies, I. Kriest, IFM-GEOMAR, Leibniz-Institut für Meereswissenschaften an der Universität Kiel

Kurzgefasst

- Die ozeanische Ventilation spielt eine große Rolle für den Verbleib des anthropogenen CO₂ und anderer gelöster Gase im tiefen Ozean.
- Das räumliche Muster des Gasaustausches zwischen Ozean und Atmosphäre und des anschließenden Transports in den tiefen Ozean ist komplex, und kann eine Vielzahl von Zeit- und Raumskalen beinhalten.
- Mit Hilfe von sogenannten "Green"-Funktionen soll ein verbessertes Verständnis des Transports von anthropogenem CO₂ und O₂ in den tiefen Ozean, seines Verbleibs bzw. seines erneuten Kontakts mit der Atmosphäre erzielt werden.

Die ozeanische Ventilation transportiert Wasser von der Oberfläche in den tiefen Ozean. Wo die Wassermassen absinken, und wie lange sie von der Oberfläche isoliert waren spielt, durch den dadurch bedingten Transport von Wärme und gelösten Gasen wie z.B. CO₂, eine erhebliche Rolle für das globale Klimasystem. So wären etwa ohne die ozeanische Senke die atmosphärischen CO₂ Konzentrationen fast 20% höher als derzeit. Auf längeren Zeitskalen beeinflusst die ozeanische Ventilation durch den Transport von Sauerstoff die biologischen Prozesse insbesondere im tiefen Ozean.

Das räumliche Muster des Gasaustausches zwischen Ozean und Atmosphäre ist allerdings sehr komplex: die Aufnahme bzw. Abgabe von CO₂ durch den Ozean hängt sowohl von den Bedingungen an der Wasseroberfläche, als auch von der darunter stattfindenden Zirkulation ab, und variiert regional. Je nachdem, wo z.B. Aufnahme von CO₂ stattfindet, kann dies entweder in flachen Tiefen verbleiben, und durch die flache, relativ schnelle Zirkulation transportiert werden, oder tiefer in den Ozean eindringen und damit für längere Zeiträume von dem Kontakt mit der Atmosphäre abgeschnitten sein [1], [2]. Demnach ist die Aufnahme bzw. Abgabe von anthropogenem CO₂ nicht direkt an die durchschnittliche Ventilation in einer bestimmten Region gebunden, sondern abhängig von verschiedenen Prozessen und Zeitskalen. Ein ver-

bessertes Verständnis und eine Quantifizierung der involvierten Zeitskalen und der Prozesse, die das räumliche Muster der CO₂-Aufnahme, seines Transportes und Verbleibs in tieferen Wasserschichten bedingen ist somit wesentlich für Prognosen in Bezug auf zukünftige Klimaänderungen.

Eine grundsätzliche Herausforderung liegt dabei in der hohen Turbulenz und Diffusivität des Ozeans. Aus diesem Grund ist jedes "Wasserpaket" im Ozeaninneren aus Elementen unterschiedlicher Herkunft (in Bezug auf die Entstehung an der Oberfläche) zusammengesetzt, die diesen Ort auf diversen Wegen und Zeitskalen erreicht haben.

Bei der Betrachtung des im tiefen Ozean gespeicherten CO₂ müssen daher sowohl die Vielfalt der Herkunftsregionen an der Oberfläche (wo das jeweilige Element zum letzten Mal in Kontakt mit der unter Umständen anthropogen beeinflussten Atmosphäre war), als auch die dazugehörigen Zeitskalen berücksichtigt werden. Darüber hinaus beeinflusst der Ozean die atmosphärischen CO₂ Konzentrationen nicht nur durch seine Aufnahme, sondern auch durch den Zeitraum, der zwischen Aufnahme und Wiederabgabe zur Kohlenstoffakkumulation zur Verfügung steht.

Zur Bearbeitung dieses Problems werden wir das mathematische Instrumentarium der "Green"-Funktionen verwenden. Diese erlauben sowohl die Transportpfade von Wasser und anthropogenem CO₂ von der Oberfläche in das Ozeaninnere zu bestimmen, als auch die Pfade vom Ozeaninneren zurück an die Wasseroberfläche. Die "Vorwärts"-Green-Funktion verbindet dabei die Konzentration eines Stoffes im Ozeaninneren mit seiner Herkunftsregion und "Geschichte". Sie charakterisiert demnach den Oberfläche - Ozeaninneres Transport, bzw. bearbeitet die Frage: Wo und wann war das Wasser zuletzt im Kontakt mit der Atmosphäre? Die adjungierte Green-Funktion beantwortet umgekehrt die Frage wann und wo dieses Wasser wieder in Kontakt mit der Atmosphäre treten wird.

In unserem Projekt werden wir zur Berechnung der Green-Funktionen die Zirkulation eines an Daten abgeglichenen Ozeanmodells verwenden, die in ein effizientes "offline" Verfahren zum Transport passiver Bestandteile eingebettet ist. Die Green-Funktionen werden dann in Bezug auf die Transportwege und -zeitskalen von (anthropogenem) CO₂ und O₂ analysiert werden, letzteres um Fra-

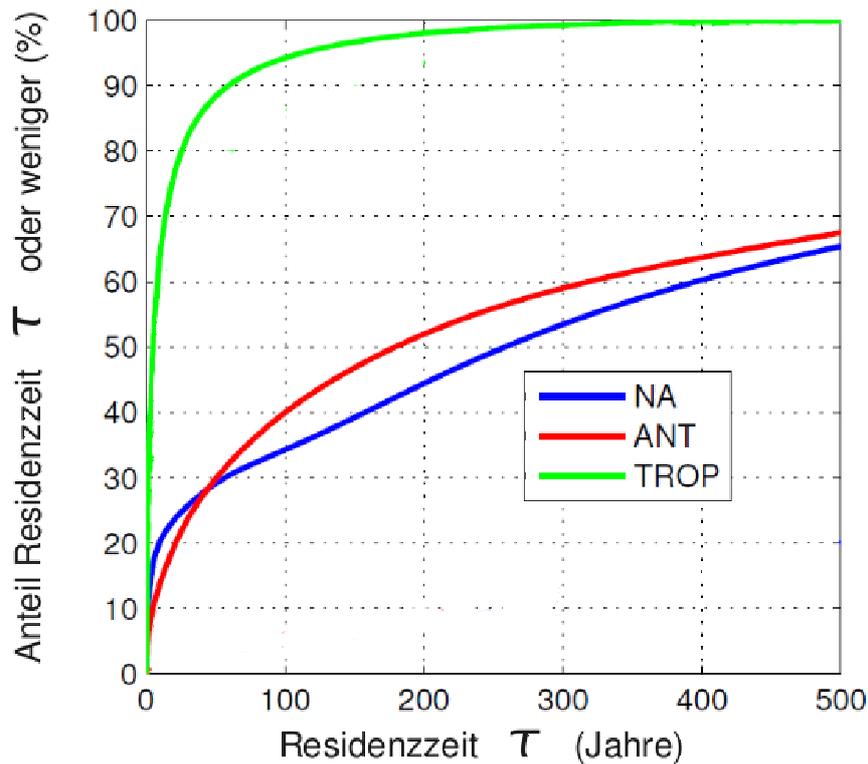


Abbildung 1: Anteil des ozeanischen anthropogenen CO₂ Inventars, das bis zu einer Zeit τ im Ozean verbleibt, für den Nord Atlantik (NA), Südlichen Ozean (ANT), und die Tropen (TROP).

gen zu möglichen zukünftigen Änderungen der räumlichen Ausdehnung suboxischer Zonen (Bereiche niedriger Sauerstoffkonzentrationen) zu untersuchen.

Vorläufige Untersuchungen, durchgeführt mit der Zirkulation aus einem Modell sehr grober räumlicher Auflösung und der adjungierten Green-Funktion zeigen, dass obwohl z.B. tropische Regionen einen hohen Anteil an anthropogenem CO₂ aufnehmen, ungefähr 90% von diesem in einem Zeitraum von ca. 50 Jahren wieder an die Atmosphäre abgegeben werden (Abb. 1). Die Berechnungen, die auf den Prozessoren des HLRN durchgeführt werden sollen, werden die Zirkulation aus einem wesentlich höher aufgelösten, datenbasierten Modell verwenden, das insbesondere die Oberflächenregionen besser auflöst.

Mehr zum Thema

1. Khatiwala, S., F. Primeau, and T. Hall. Reconstruction of the history of anthropogenic CO₂ concentrations in the ocean. 2009, Nature, 462, doi: 10.1038/nature08526
2. Khatiwala, S., F. Primeau, and M. Holzer. Ventilation of the deep ocean constrained with tracer observations. 2010, eingereicht.

Förderung

Universität Kiel

Wie gut sind unsere Beschreibungen biologischer Vorgänge im globalen Ozean?

Einfluss von Remineralisierungsparametern auf globale biogeochemische Ozeanmodelle

A. Oschlies, I. Kriest, IFM-GEOMAR, Leibniz-Institut für Meereswissenschaften an der Universität Kiel

Kurzgefasst

- Sowohl biologische, als auch physikalische Faktoren bedingen die globalen Verteilungen von Nährstoffen, O₂, und CO₂ im Ozean.
- Die Darstellung biologischer Vorgänge in globalen ozeanischen Modellen ist nicht einheitlich.
- Die Bewertung der unterschiedlichen biogeochemischen Modelle erfolgt häufig subjektiv, und oft nicht umfassend.
- Eine umfassende Bewertung der biologischen Modelle ist sehr rechenzeitaufwendig, allerdings notwendig, um Aussagen zur Belastbarkeit der Modelle machen zu können.

Der Ozean spielt im globalen Kohlenstoffkreislauf und für den Verbleib der anthropogenen CO₂ Emissionen eine entscheidende Rolle. Bisher sind im Ozean mehr als die Hälfte des durch den Menschen produzierten (anthropogenen) CO₂ für lange Zeit gespeichert. Die zukünftige Aufnahme von CO₂ durch den Ozean, dessen Verbleib auf unterschiedlichen Zeitskalen, und die Auswirkung des zusätzlichen CO₂ auf marine biologische und/oder biogeochemische Prozesse hängen neben physikalischen und chemischen Faktoren auch von biologischen Vorgänge wie z.B. der Photosynthese planktischer Mikroalgen und ihrem anschließenden Absinken bzw. Abbau ab.

Eine umfassende globale Abschätzung der Bedeutung verschiedener Prozesse erfolgt nicht zuletzt wegen der lückenhaften Datenlage vor allem durch an globale Zirkulationsmodelle gekoppelte Modelle, die die grundlegenden biologischen und biogeochemischen Mechanismen zu beschreiben versuchen. Allerdings ist die empirische Beschreibung dieser Interaktionen bei weitem nicht so eindeutig wie z.B. die auf grundlegenden Erhaltungssätzen beruhende Beschreibung physikalischer Prozesse. Dies ist u.a. durch die Vielfalt und physiologische Flexibilität der Organismen bedingt, die in den Modellen zu stark idealisierten und abstrahierten Gruppen zusammengefasst werden. Daher weichen die verwendeten biogeochemischen Modelle nicht nur in ihrer Komplexität, sondern auch in den Darstellungen ein-

zelner Prozesse voneinander ab. So erfolgt z.B. die Beschreibung des Sinkens und Abbaus organischer Substanz durch unterschiedliche Annahmen und Funktionen, mit z.T. nicht unerheblichen Folgen für die daraus resultierenden Nährstoff- und Sauerstoffverteilungen, sowie für den Gasaustausch von CO₂. Die Verteilungen werden außerdem zusätzlich durch die simulierte physikalische Zirkulation beeinflusst.

Prozesse wie die Tiefenzirkulation, aber auch eher langsame biologische Vorgänge wie z.B. der mikrobielle Abbau organischer Substanz im tiefen Ozean, und ihr Zusammenspiel erfordern häufig lange Zeitskalen der Simulation; damit ist aber auch eine größere Unabhängigkeit des Modells von den Startwerten, und somit eine eindeutiger Beurteilung seiner Leistungsfähigkeit gegeben.

Im Allgemeinen erfolgt die Anpassung eines globalen biogeochemischen Modells an ein physikalisches Modell (und an eine spezielle Fragestellung) durch eine Variation der Modellkonstanten und/oder Hinzufügen weiterer Komponenten. Die aus den anschließenden Simulationen über kürzere oder längere Zeiträume (i.A. Dekaden bis Jahrtausende) resultierenden Zustandsgrößen (z.B. Nährstoffe oder O₂) werden anschließend mit möglichst umfassenden, globalen biogeochemischen Datensätzen verglichen. Oft werden in sukzessiven und z.T. subjektiv geprägten "Tuning"zyklen die Modelle weiter an die Beobachtungen angepasst.

Eine "gute" Übereinstimmung der Modellgrößen mit den Beobachtungsdaten kann dann als Kriterium für die realistische Parametrisierung der biogeochemischen Vorgänge interpretiert werden. Dabei ist die Definition von "gut" durchaus häufig von subjektiven, z.T. visuellen Kriterien geprägt. Eine objektive, d.h. anhand von Metriken durchgeführte Beurteilung der Leistungsfähigkeit eines Modells wurde nicht immer verfolgt. Mit zunehmender Verwendung der Modelle für prognostische Zwecke wird allerdings auch die Forderung nach der obligatorischen Anwendung von verschiedenen quantitativen Verfahren zur Beurteilung der Modelle laut. Ein erster Ansatz zur Bewertung unterschiedlicher Modelle anhand verschiedener Metriken findet sich z.B. in [1].

Das vorliegende Projekt zielt auf die Anwendung und Weiterentwicklung eines einfach anwendbaren, möglichst objektiven Werkzeugs zur Analyse

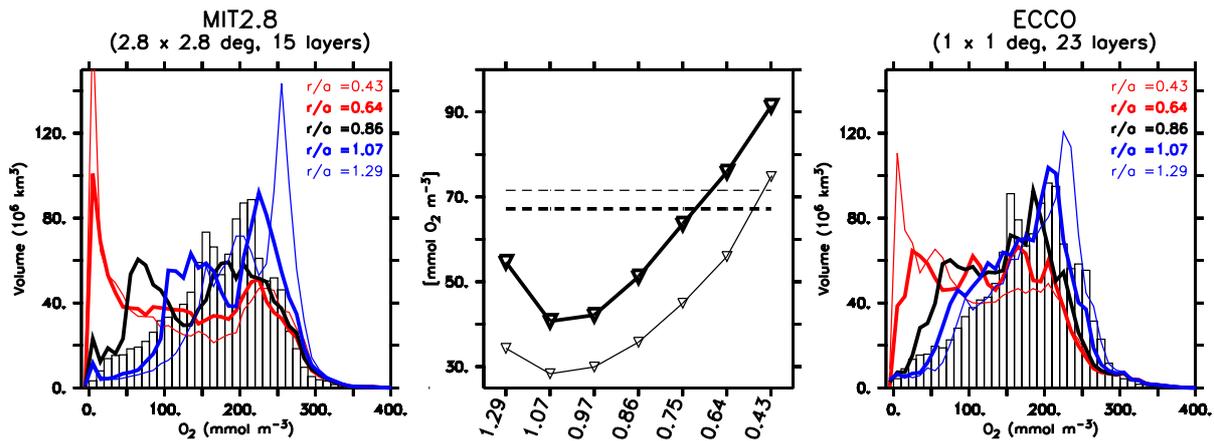


Abbildung 1: Links: Globale O₂-Verteilung der Beobachtungen (Balken) und von Modellen mit unterschiedlichen Partikelsinkgeschwindigkeiten (Linien, physikalischer Transport mittels grober räuml. Auflösung). Schwarz: Basisszenario. Blau: "Langsame" Partikel. Rot: "Schnelle" Partikel. Rechts: wie links, allerdings mit feinerer räumlicher Auflösung ("ECCO"). Mitte: Mittlere quadratische Abweichung von Modell-Daten für O₂ in Abhängigkeit von der Partikelsinkgeschwindigkeit. "Schnellere" Sinkgeschwindigkeiten sind am rechten Ende der x-Achse zu finden. Feine Linien: "ECCO", dicke Linien: "MIT2.8".

und Beurteilung einer Auswahl globaler biogeochemischer Modelle ab. Zu diesem Zweck wird ein effizientes "offline" Verfahren für die Darstellung der Zirkulation verwendet [2]. An dieses Transportmodell werden verschiedene biogeochemische Modelle gekoppelt und über mehrere tausend Jahre simuliert. Simulierte Nährstoffe und O₂ werden anhand verschiedener Metriken mit Beobachtungen verglichen und systematische Abweichungen der verschiedenen Modellvarianten von den Beobachtungen analysiert. Durch Verwendung der Transporte aus unterschiedlichen Zirkulationsmodellen wird die Bedeutung der biologischen Konstanten und Funktionen dem Einfluss physikalischer Parametrisierungen gegenübergestellt. Insbesondere die Anwendung von Zirkulationen aus höher aufgelösten physikalischen Modellen, oder sehr komplexer biogeochemischer Modelle wird auf den Prozessoren des HLRN betrieben.

Erste Ergebnisse dieses Projekts sind in Abb. 1 dargestellt. Hierbei handelte es sich sowohl um den Vergleich der Auswirkung der Zirkulation des räumlich grob aufgelösten (2.8° horizontale Auflösung, 15 vertikale Schichten) MIT2.8-Modells mit dem höher aufgelösten "ECCO"-Modell (1° horizontale Auflösung, 23 vertikale Schichten), als auch um die Auswirkung unterschiedlicher Sinkgeschwindigkeiten organischer Partikel. Die Gegenüberstellung zeigt, dass unterschiedliche Sinkgeschwindigkeiten einen erheblichen Einfluss auf die Verteilung gelöster Substanzen wie z.B. O₂ haben können. Weiterhin führt eine höhere Auflösung (in Verbindung mit einer realistischeren Zirkulation; "ECCO") zu einer Verbesserung der Darstellung

der Sauerstoffverteilung. Weitere Untersuchungen in Bezug auf räumliche Auflösung und biogeochemische Konstanten und Modellbestandteile sind geplant bzw. werden zur Zeit auf den Prozessoren des HLRN durchgeführt.

Mehr zum Thema

1. Kriest, I., Khatiwala, S. and Oschlies, A. Towards an assessment of simple global marine biogeochemical models of different complexity. *Prog. Oceanogr.*, 2010, 86, 337–360, doi:10.1016/j.pocean.2010.05.002
2. Khatiwala, S. A computational framework for simulation of biogeochemical tracers in the ocean. *Global Biogeochem. Cy.*, 2007, 21

Förderung

Universität Kiel

Geht den tropischen Ozeanen die Luft aus? Ventilation der Sauerstoffminimumzonen in den tropischen Ozeanen

F.U. Schwarzkopf, C.W. Böning, IFM-GEOMAR, Leibniz-Institut für Meereswissenschaften an der Universität Kiel

Kurzgefasst

- Meerestiere benötigen im Meerwasser gelösten Sauerstoff zum Leben.
- In den tropischen Ozeanbecken gibt es Zonen, in denen nur wenig Sauerstoff vorhanden ist: die Sauerstoffminimumzonen.
- Im Zuge des Klimawandels scheinen sich diese Zonen auszudehnen und die Sauerstoffkonzentrationen fallen weiter [1].
- Um die physikalischen Prozesse der Belüftung dieser Zonen zu untersuchen benötigt man hochauflösende Ozeansimulationen.
- Die Integration dieser feinskaligen Modelle wird auf 512 Prozessoren durchgeführt und bedarf einer hohen Speicherkapazität.

Die meisten Meerestiere atmen, wie auch der Mensch, Sauerstoff (O_2). Allerdings sind sie nicht in einer so luxuriösen Situation, ständig von diesem Lebenselixier in passender Dosierung umgeben zu sein. Komplexe physikalische sowie biologisch-chemische Prozesse beeinflussen die Sauerstoffverteilung im Ozean. Über die Oberfläche wird O_2 in den Ozean eingebracht und auch nur in der obersten Schicht durch Photosynthese freigesetzt. Darunter wird O_2 durch den Abbau organischen Materials verbraucht. Durch bestimmte Wind- und Strömungsbedingungen quillt in den Tropen nährstoffreiches Wasser auf, in dem O_2 besonders schnell abgebaut wird. Außerdem findet hier keine direkte Belüftung von der Oberfläche aus statt, wodurch in mittleren Tiefen zwischen 200 m und 600 m Bereiche entstehen, in denen nur sehr geringe Sauerstoffkonzentrationen vorkommen. Erst über lange Transportwege gelangt sauerstoffreiches Wasser aus höheren Breiten in diese Regionen. In diesem Projekt wird der Einfluss von Strömungsveränderungen auf die Sauerstofftrends in diesen Sauerstoffminimumzonen untersucht.

Diese Prozesse werden mit einem numerischen Modell, welches unter dem Schirm der europäischen DRAKKAR Gruppe, basierend auf dem System des "Nucleus for European Modelling of the Ocean" (NEMO) entwickelt wurde, simuliert: Der globale Ozean wird mit einem Netz überspannt, dessen Maschen ca. 50 km weit sind

und an jedem Knotenpunkt dieses Netzes werden Temperatur, Salzgehalt und die dreidimensionale Strömungsgeschwindigkeit berechnet. Dies passiert nicht nur an der Oberfläche sondern in 46 vertikalen Schichten, welche zwischen 6 m und 250 m auseinander liegen. Insgesamt sind das knapp 8 Millionen Wasserpunkte. Um die kritischen Strömungsprozesse mit hoher Wirbelaktivität in den tropischen Ozeanen angemessen darstellen zu können, wird in dieses globale Modell ein feineres Netz, ein sogenanntes "Nest", dessen Maschen nur noch ca. 10 km weit geöffnet sind, eingeflochten. Allein für den tropischen Atlantik kommen so nochmals über 13 Millionen Punkte hinzu. (Für eine ähnliche Konfiguration im tropischen Pazifik sind es 63 Millionen weitere Gitterpunkte.) Die dreidimensionalen Transportwege von Oberflächenwasser in den tiefen Ozean werden auf zwei verschiedene Weisen diagnostiziert: durch Verfolgen der Bahnen einzelner, markierter Wasserteilchen und durch die Betrachtung an der Oberfläche eingebrachter Spurenstoffe, welche keinen chemischen oder biologischen Prozessen unterliegen und sich allein durch Advektion und Diffusion ausbreiten. Diese Ozeanmodelle werden mit atmosphärischen (Wind, Wärmeflüsse) Reanalysedaten über den Zeitraum 1948 bis 2007 angetrieben, und simulieren so die Veränderungen der ozeanischen Bedingungen. Analysiert werden fünfjährige Mittelwerte für die ozeanischen Größen sowie die eingebrachten Spurenstoffe. Diese hohe zeitliche Auflösung ist von Nöten um zum Beispiel realistische Trajekorienanalysen betreiben zu können, welche komplementär zum Eulerschen Geschwindigkeitsfeld eine Lagrangesche Betrachtung der Strömungen ermöglichen. Die Integration eines Modelljahres des Atlantik-Nestes benötigt unter Verwendung von 512 Prozessoren auf der ICE2 4 bis 4 1/2 Stunden Zeit und produziert 176GB Daten.

Die obere Schicht der Ozeane ist dadurch gekennzeichnet, dass sie sehr gut durchmischt und damit auch sauerstoffreich ist. Ein Eintrag von Oberflächenwasser in tiefere Schichten findet nur in mittleren und höheren Breiten statt, nicht aber in den Tropen. Das Wasser dort hat schon lange Wege seit der letzten Berührung mit der Oberfläche hinter sich. Wasser aus den südlichen Subtropen strömt entlang der Küste Brasiliens in einem schmalen Strom, dem Nordbrasilstrom, zum Äquator. Auch von Norden kommt entlang der südamerikanischen Küste Wasser in diese Region. Von dort breitet es sich in mehreren

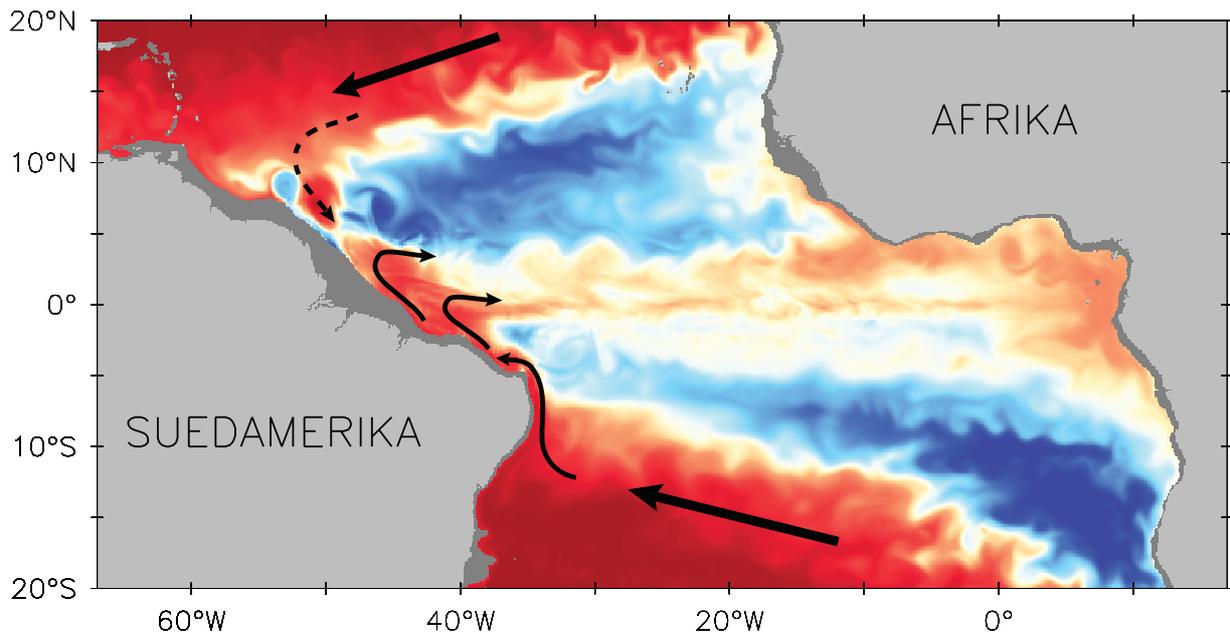


Abbildung 1: Momentaufnahme der Verteilung eines an der Oberfläche eingebrachten Spurenstoffes, der sich im Ozean allein durch Vermischungsprozesse und Strömungen ausbreitet. Dargestellt ist die Konzentration dieses Stoffes in 200 m Tiefe. Rote Bereiche markieren hohe, blaue Regionen geringe Konzentrationen. In den Bereichen, mit niedrigsten Konzentrationen befinden sich die Sauerstoffminimumzonen. Bis Wasser von der Oberfläche diese Regionen erreicht ist der meiste, in den subtropischen Ozeanen aufgenommene, Sauerstoff schon aufgezehrt. Schematisch dargestellt sind die Wege, auf denen das Wasser in diese Zonen gelangt (schwarze Pfade).

mäandrierenden Strombändern nach Osten aus. Die Wege des Wassers sind in der Abbildung schematisch dargestellt. Welche Strömungsprozesse und welche Veränderungen in ihrer Stärke oder Verteilung für die Belüftung der Sauerstoffminimumzonen maßgeblich sind, ist bisher ungeklärt. Weiterführende Analysen der hier erzeugten Modellsimulationen sollen zur Klärung beitragen.

Da direkte Beobachtungen im Ozean nur punktuell in Raum und Zeit durchführbar sind, werden die hier entwickelten numerischen Modelle (globales Modell mit Nest im Atlantik bzw. Pazifik) herangezogen um das Beobachtete in einen größeren Kontext einzubetten. So wurde das am HLRN gerechnete Modell des tropischen Pazifiks in Kombination mit Daten, die von Treibbojen im Rahmen des internationalen Argo-Programmes und während Forschungsfahrten vor den Küsten Perus und Chiles gesammelt wurden, dazu genutzt, die Strömungsbedingungen in der dortigen Sauerstoffminimumzone zu klären [2]. In weiteren Simulationen ist geplant, mit den hier entwickelten Modellen Sensitivitäten auf bestimmte Faktoren sowie einzelne Mechanismen, wie zum Beispiel den Einfluss globaler Erwärmung zu untersuchen und in entsprechenden "numerischen Experimenten" Szenarien für zukünftige Veränderungen zu simulieren.

Mehr zum Thema

1. Stramma, L., G. C. Johnson, J. Sprintall, and V. Mohrholz (2008), Expanding Oxygen-Minimum Zones in the Tropical Oceans. *Science*, 320, 655-658. doi: 10.1126/science.1153847
2. Czeschel, R., L. Stramma, F. U. Schwarzkopf, B. S. Giese, A. Funk, J. Karstensen (in press), Mid-depth circulation of the eastern tropical South Pacific and its link to the oxygen minimum zone. *Journal of Geophysical Research - Oceans*, doi: 10.1029/2010JC006565
3. <http://www.sfb754.de>

Förderung

DFG-Sonderforschungsbereich 754, Klima - Biogeochemische Wechselwirkungen im tropischen Ozean, Teilprojekt A2 [3]

Legt die globale Erwärmung eine Pause ein? Simulation des vergangenen, heutigen und zukünftigen Klimas

M. Latif, N.S. Keenlyside, IFM-GEOMAR, Leibniz-Institut für Meereswissenschaften an der Universität Kiel

Kurzgefasst

- Die globale Erwärmung ist Realität
- Kurzfristige natürliche Schwankungen überlagern den langfristigen Erwärmungstrend
- Ein besseres Verständnis der Ursache der kurzfristigen Schwankungen kann mit Hilfe von Klimamodellen gewonnen werden
- Anhand des vergangenen Klimas kann man die Modelle überprüfen
- Verbesserte Klimavorhersagen für die nächsten Jahrzehnte sind möglich

Der globale Klimawandel steht im Blickpunkt des öffentlichen Interesses. Wir Menschen entlassen seit Beginn der Industrialisierung große Mengen des Treibhausgases Kohlendioxid (CO₂) in die Atmosphäre, wodurch sich die Erde aufheizt. Die Temperatur der Erde zeigt einen offensichtlichen Erwärmungstrend von gut 0,7°C während des 20. Jahrhunderts. Die Auswirkungen der Erwärmung sind unübersehbar: So zieht sich das Eis der Erde beispielsweise immer mehr zurück. Die arktische Eisbedeckung hat sich allein während der letzten 30 Jahre um etwa 30% verringert. Die Gebirgsgletscher schrumpfen in allen Breitenzonen und der Meeresspiegel ist während des 20. Jahrhunderts um knapp 20 Zentimeter gestiegen, um nur einige Änderungen zu nennen.

Eine inhärente Eigenschaft des Klimas ist seine große Schwankungsbreite. Die Temperatur der Erde zeigt daher neben dem langfristigen Erwärmungstrend ausgeprägte Schwankungen auf kürzeren Zeitskalen, von Jahr zu Jahr und von Jahrzehnt zu Jahrzehnt. Das Klimasystem unterliegt vielfältigen natürlichen Einflüssen, woraus sich die irreguläre Temperaturentwicklung erklärt. Es verwundert daher nicht, dass es seit 1998 keinen neuen Temperaturrekord gegeben hat und das Klima eine Art „Atempause“ durchläuft. Die oftmals zyklischen natürlichen Klimaschwankungen können den von uns Menschen hervorgerufenen Erwärmungstrend kurzzeitig bremsen oder beschleunigen. Wir können daher nicht erwarten, dass es jedes Jahr neue Temperaturrekorde zu verzeichnen gibt.

Eine wichtige Aufgabe der Klimaforschung besteht darin, die Dynamik der natürlichen Klima-

schwankungen zu verstehen und ihre Vorhersagbarkeit zu untersuchen. Man unterscheidet prinzipiell interne und externe Klimaschwankungen. Interne Schwankungen sind der chaotischen Natur des Klimas geschuldet. Zu den internen Klimaschwankungen zählt man beispielsweise langperiodische Schwankungen der Winde und Meereströmungen, die durch Wechselwirkungen zwischen der Atmosphäre und dem Ozean hervorgerufen werden, ohne dass es eines äußeren Antriebs bedarf. Änderungen der Randbedingungen sind die Ursache externer Schwankungen. Vulkanausbrüche oder Änderungen der Solarkonstante beeinflussen die Strahlungsbilanz der Atmosphäre, ein wichtiger Antrieb für das Klima.

Das Projekt befasst sich mit der Dynamik natürlicher Klimaschwankungen und mit Vorhersagen zum globalen Klimawandel. Die natürlichen Schwankungen werden neben dem Anstieg der Treibhausgaskonzentrationen die Klimaentwicklung während der nächsten Jahrzehnte im erheblichen Maße mit bestimmen, insbesondere auf der regionalen Skala. Das Ziel ist es, die Vorhersagen zum globalen Klimawandel dadurch zu verbessern, auch die kurzfristigen natürlichen Klimaschwankungen vorherzusagen, die dem langfristigen durch den Menschen verursachten Erwärmungstrend überlagert sind. Dazu ist es notwendig, auch das Klima der Vergangenheit zu verstehen, dass ein breites Spektrum von Fluktuationen aufweist. Die Mittelalterliche Warmzeit oder die Kleine Eiszeit sind Beispiele.

Komplexe Klimamodelle sind hilfreiche Werkzeuge, um die Klimaveränderlichkeit zu verstehen und kurzfristige Fluktuationen vorherzusagen. Die Modelle haben inzwischen einen Standard erreicht, der es rechtfertigt, mit ihnen die Dynamik der natürlichen Klimaschwankungen zu untersuchen. In sog. Kontrollsimulation kann man etwa die interne Klimavariabilität studieren und deren Statistik mit Beobachtungen der letzten Jahrhunderte vergleichen. Andererseits kann man die Modelle mit externen Antrieben, etwa mit Schwankungen der Solarkonstante, „füttern“ und die Reaktion des Klimasystems simulieren. Die Ergebnisse liefern wertvolle Hinweise auf den natürlichen „Rauschpegel“ des Klimas und auf die potentielle Vorhersagbarkeit von kurzfristigen Klimaschwankungen. Insbesondere zeigen die Modelle, dass die kurzfristigen zwischenjährlichen und dekadischen Schwankungen in gewissem Maße vorhersagbar sind.

Bisherige Rechnungen zum globalen Wandel, wie die im letzten Bericht des UNO Klimarats

Global mean surface temperature

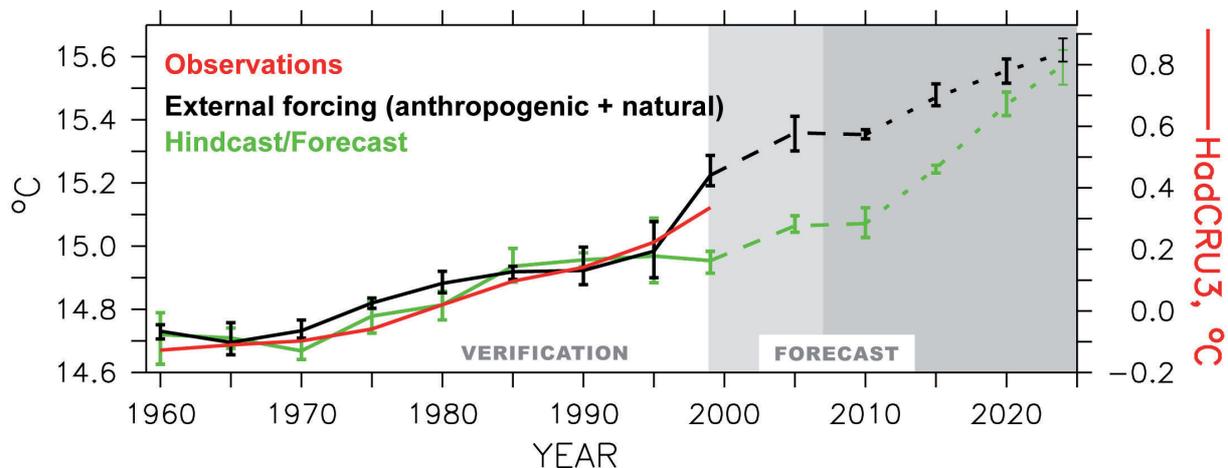


Abbildung 1: Die Abbildung zeigt die Vorhersage (grün) von Keenlyside und Kollegen aus dem Jahr 2008. Danach erhöht sich die globale Temperatur der Erde im Vergleich zu der Vorhersage ohne die Einbeziehung des aktuellen Klimazustands (schwarz) zunächst weniger schnell, um danach beschleunigt voranzuschreiten.

(IPCC) 2007 veröffentlichten, hat man unter Annahme bestimmter zukünftiger atmosphärischer Treibhausgasentwicklungen durchgeführt. Diese Strategie ist gerechtfertigt, solange man an der langfristigen Entwicklung des Klimas etwa bis zum Ende dieses Jahrhunderts interessiert ist. Um auch die kurzfristige Entwicklung in den kommenden Jahren vorherzusagen, müssen die Modelle zusätzliche Informationen über die natürlichen Klimaschwankungen erhalten, insbesondere über die Schwankungen der Meeresströmungen. Das Fehlen entsprechender Messungen hat das bisher verhindert. Wir haben eine Methode entwickelt, um die Strömungen aus den Meeresoberflächentemperaturen abzuleiten. Letztere sind für die vergangenen 50 Jahre gut bekannt. Mit dieser zusätzlichen Information lassen sich dann mit den Klimamodellen auch die kurzfristigen natürlichen Klimaschwankungen vorhersagen, welche die langfristige, anthropogene Erwärmung überlagern.

Die so verfeinerten Vorhersagen lassen vermuten, dass sich die globale Erwärmung in den kommenden Jahren etwas abschwächt. Ab der Mitte des Jahrzehnts wird es entsprechend der Vorhersagen dann wieder eine beschleunigte Erwärmung geben, weil die natürlichen Schwankungen vermutlich in ihre positive Phase umschlagen werden.

Die Modelle weisen allerdings auch noch erhebliche Schwächen auf, die u.a. darauf zurückzuführen sind, dass sie noch recht gro-

bauslösend sind. Das HLRN bietet die Möglichkeit, die horizontale Auflösung von derzeit knapp 400 Kilometer auf 50 Kilometer global zu erhöhen, was regional detailliertere Vorhersagen zulässt. In einigen Jahren sind dann vermutlich Rechnungen mit einer globalen Auflösung von 10 Kilometer möglich. Dann wird man auch kleinräumige Prozesse wie die mesoskaligen Wirbel im Meer auflösen können, die einen wichtigen Einfluss auf das großräumige Stromsystem, wie den Golfstrom, ausüben.

Mehr zum Thema

1. Keenlyside, N. S., M. Latif, J. Jungclaus, L. Kornblüeh, and E. Roeckner, 2008: Advancing Decadal-Scale Climate Prediction in the North Atlantic Sector. *Nature*, 453, 84-88.
2. Park, W., N. S. Keenlyside, M. Latif, A. Ströh, R. Redler, E. Roeckner, and G. Madec (2009): Tropical Pacific climate and its response to global warming in the Kiel Climate Model. *J. Climate*, 22 (1), 71-92, DOI: 10.1175/2008JCLI2261.1.

Förderung

Europäische Union (Dynamite und Ensembles)

Ingenieurwissenschaften

Dompteur der Strömung Numerische Simulation der Aktiven Strömungsbeeinflussung auf einer Hochauftriebskonfiguration

T. Höll, F. Thiele, Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik, Technische Universität Berlin

Kurzgefasst

- Moderne Flugzeugflügel bestehen aus Mehrfachklappensystemen, die während des Starts und der Landung für den nötigen Auftrieb sorgen.
- Diese Systeme sind allerdings komplex, schwer, wartungsaufwendig und teuer.
- Aktive Strömungsbeeinflussung durch Einblasen (und ggf. Absaugen) auf der Hinterkantenklappe hat das Potential den Auftrieb während der Langsamflug-Phasen zu erhöhen.
- Der Beeinflussungsmechanismus zeichnet sich durch zahlreiche Parameter aus, wie z.B. Impuls und Frequenz der Ausblas-Strömung.
- Die aktive Beeinflussung auf dem Flugzeugtragflügel wird in rechenaufwendigen Simulationen am HLRN untersucht und benötigt den Einsatz von mehreren hundert CPU-Kernen.

Moderne Verkehrsflugzeuge besitzen effiziente Hochauftriebssysteme, um im Langsamflug beim Start und bei der Landung den erforderlichen Auftrieb zu realisieren. Diese Systeme bestehen aus Vorflügel und Hinterkantenklappe und vergrößern zum einen die Flügelfläche und zum anderen die effektive Wölbung des Gesamtflügels. Betrachtet man die Hinterkantenklappe, so erfolgt die Vergrößerung der effektiven Wölbung durch eine Erhöhung des Ausschlagwinkels der Klappe. Diesem Mechanismus sind jedoch Grenzen gesetzt, da bei zu hohem Ausschlagwinkel die Strömung über der Klappe ablöst und die Auftriebserhöhung zunichte gemacht wird. Eine passive Maßnahme zur Verhinderung der Ablösung ist das Vorhandensein eines Spaltes zwischen Hauptprofil und Klappe, durch den energiereiches Fluid auf die Klappenoberfläche geleitet wird.

Design und Verwendung solcher Hochauftriebssysteme sind mittlerweile zum Industriestandard geworden. Darüber hinaus muss festgestellt werden, dass aus industrieller Sicht die Klappensysteme weitgehend optimiert sind und eine weitere Performance-Steigerung mit den heute zur Verfügung stehenden Mitteln kaum noch möglich erscheint. Dennoch ist eine Weiterentwicklung und Leistungssteigerung wünschenswert, da diese z.B. zu einer Verkleinerung der Klappen und so-

mit zu einer Gewichtsersparnis führen kann. Ein weiteres Entwicklungsziel ist es, die Komplexität der Klappensysteme zu verringern, um dadurch Konstruktions- und Wartungskosten einzusparen.

Die aktive Strömungskontrolle kann hier einen Beitrag leisten, diese Ziele zu erreichen. Durch gezielte Beeinflussung der abgelösten Strömung über der Hinterkantenklappe kann diese zum Wiederanliegen gebracht werden. Dadurch kann der Einsatzbereich der Hochauftriebssysteme zu höheren Klappenausschlagswinkeln hin verschoben werden.

Ziel des Projektes ist es, mit Hilfe von sowohl harmonischem Einblasen und Absaugen (synthetischer Jet) als auch gepulstem Einblasen auf der Hinterkantenklappe die Ablösung der Strömung zu vermindern bzw. vollständig zu vermeiden. Untersucht wird dieses Beeinflussungskonzept an einem praxisnahen Flügelmodell bestehend aus drei Komponenten: Vorflügel, Hauptflügel und Hinterkantenklappe. Um den Rechenaufwand zu verringern wird die Konfiguration als spannungweitig unendlicher Flügel mit periodischen Randbedingungen realisiert. Voruntersuchungen haben gezeigt, dass bei einem Anstellwinkel von 6° und einem Ausschlagswinkel der Hinterkantenklappe von 37° die Strömung auf dem Hauptflügel noch anliegt und dann an der Vorderkante der Klappe vollständig ablöst. Diese Konfiguration ist Ausgangspunkt der Beeinflussungsuntersuchungen. Der Kontrollmechanismus soll eingesetzt werden um die Strömungsablösung zu verhindern und den Auftrieb wieder zu steigern.

Basis für die numerischen Simulationen ist der am Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik entwickelte Strömungslöser ELAN (ELiptic Solution of the Navier-Stokes Equations) [1]. Dieser nutzt die Finite-Volumen-Methode für die Lösung der Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen (RANS). Des Weiteren ist es mit ELAN möglich hybride Verfahren, speziell Detached-Eddy Simulation, einzusetzen.

Es wurden zahlreiche numerische Simulationen der aktiven Strömungskontrolle durchgeführt, in deren Rahmen die wesentlichen Parameter einer angeregten Strömung untersucht und variiert wurden. Dies sind die Intensität des Ausblase-Jets (Impulsbeiwert), die Frequenz des instationären Anregestroms, der Ausblaswinkel und beim gepulsten Einblasen der Duty Cycle (Zeit, die der Puls aktiv ist, bezogen auf die Periodendauer der instationären Anregung).

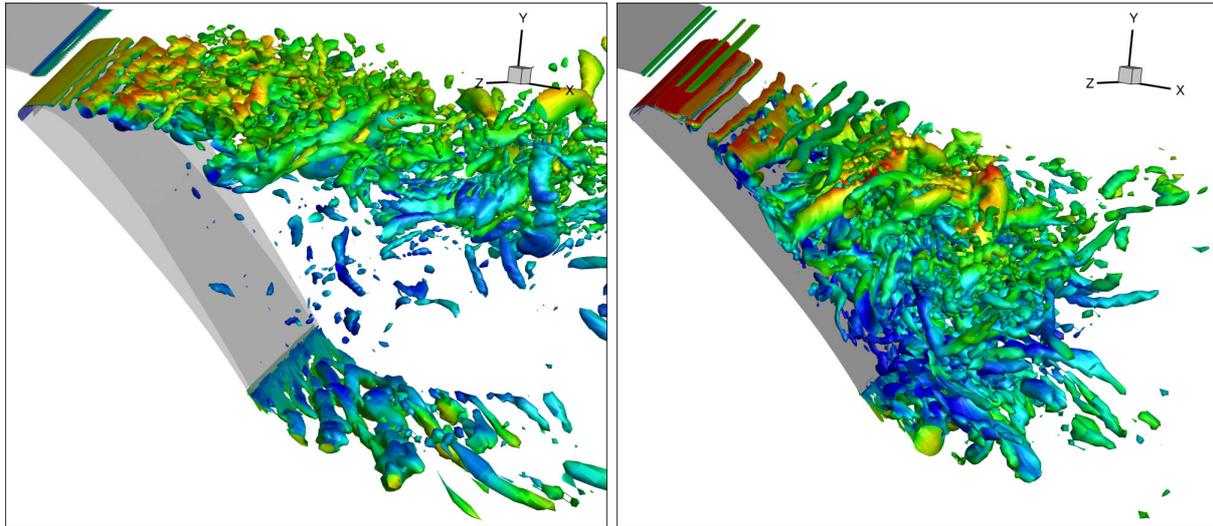


Abbildung 1: Detailansicht der Hinterkantenklappe der Hochauftriebskonfiguration. Dargestellt ist ein Schnappschuss der Detached-Eddy Simulation einer unangeregten (links) und einer mit gepulstem Einblasen angeregten Strömung (rechts). Die Wirbel sind mit dem λ_2 -Wirbelkernkriterium visualisiert und mit der auf die Anströmgeschwindigkeit bezogenen lokalen Strömungsgeschwindigkeit eingefärbt. Es zeigt sich sehr deutlich, dass die unbeeinflusste, natürliche Strömung direkt an der Klappenvorderkante ablöst. Die angeregte Strömung hingegen liegt über einen langen Bereich auf der Klappe an, sorgt für günstigere Abströmbedingungen vom Hauptflügel und erhöht somit den Auftrieb des gesamten Flügels.

Die verwendeten Rechengitter bestehen aus bis zu 25 Millionen Zellen und sind blockstrukturiert. Die Simulationen auf diesen Rechengittern benötigten mehrere Wochen Rechenzeit auf 256 CPUs.

Es zeigt sich, dass bereits bei geringen Impulsbeiwerten die Strömung auf der Hinterkantenklappen zum Wiederanliegen gebracht werden kann, vorausgesetzt, dass eine geeignete Frequenz des instationären Anregeluftstroms vorgeben wird. Die benötigte Ausblasströmung kann z.B. als Zapfluft dem Triebwerk entnommen werden.

Das Wiederanliegen der Klappenströmung hat eine Auftriebssteigerung zur Folge. Weitere Steigerungen auf bis zu 25 Prozent über dem Auftrieb der unangeregten Strömung lassen sich durch geeignete geometrische Abmessungen des Ausblastschlitzes, geeignete Ausblaswinkel und durch eine Phasenverschiebung in der Aktuation einzelner Beschleunigungs-Segmente erreichen. Die optimalen Verhältnisse wurden in zahlreichen Parametervariationen gefunden. Prädestiniert für eine derartige Untersuchung wäre eigentlich eine adjungierte Optimierung. Solche Simulationen sind allerdings momentan noch viel zu aufwändig und teuer hinsichtlich des Rechenzeit- und Speicherbedarfs.

Mehr zum Thema

1. L. Xue: Entwicklung eines effizienten parallelen Lösungsalgorithmus zur dreidimensionalen Simulation komplexer turbulenter Strömungen, PhD thesis, Technische Universität Berlin, 1998.
2. T. Höll, E. Wassen and F. Thiele: Numerical investigation of segmented actuation slots for active separation control of a high-lift configuration, in R. King, *Active Flow Control II*, Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design, Vol. 108, Springer Verlag, 2010.
3. T. Höll, E. Wassen and F. Thiele: Active separation control on a high-lift configuration using segmented actuation slots, AIAA-Paper 2010-4249, 2010.

Förderung

DFG-Sonderforschungsbereich 557 "Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen"

Numerische Optimierung strömungsmechanischer Bauteile Fluidik-Elemente zur aktiven Strömungskontrolle

J. Sesterhenn, M. Lemke, Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik, TU Berlin

Kurzgefasst

- Fluidik-Elemente sind strömungsmechanische Schalter im Sinne von Dioden oder Transistoren.
- Die Einsatzgebiete reichen von Auftriebs- bis Verbrennungskontrolle.
- Die Konstruktion basiert bisher auf empirischen Regeln.
- Ziel ist die Schaffung einer fundierten und verlässlichen Wissens- und Methodenbasis zur Auslegung der Elemente.
- Es werden massiv parallelisierte direkte numerische Simulationen, Optimierungen mittels adjungierter Gleichungen und Stabilitätsanalysen durchgeführt.

Fluidik-Elemente schalten mit sehr kleinen Steuerimpulsen große Massenströme oder lassen die Strömung in einer Richtung passieren während sie die entgegengesetzte Richtung sperren. Bisherige Forschungsergebnisse auf diesem Gebiet stammen zu einem großen Teil aus den 60er und 70er Jahren und beschäftigen sich vorrangig mit der komplexen Verschaltung unterschiedlicher fluidischer Komponenten [1]. Ihre primären Anwendungsgebiete waren Schaltungen und Steuervorrichtungen im Bereich der Luft- und Raumfahrt. Da die Fluidik mit der Entwicklung elektronischer Rechner hinsichtlich logischer Schaltungen stark an Bedeutung verloren hat, liegt der Fokus des Interesses nun auf anwendungsbezogenen Problemen.

Die im Großprojekt untersuchten Bauteile sollen zum Beispiel der aktiven Strömungskontrolle dienen. Die Elemente besitzen keine beweglichen Teile und sind daher praktisch verschleißfrei. Dadurch sind sie unter schwierigen Bedingungen, wie zum Beispiel hohen Temperaturen und starken Druckschwankungen, sicherer als mechanische Ventile. Sie zeichnen sich zudem durch einen wesentlich höheren Wirkungsgrad aus und erlauben konstruktive Freiheiten, die gängige Bauteile nicht bieten. Insbesondere sind die Leistungsgrenzen nicht mehr durch Struktureigenschaften der Bauteile gegeben, sondern durch Strömungsformen.

Das wesentliche Problem bei der Konstruktion von Fluidik-Elementen ist, eine optimale Geometrie und die dazugehörigen Strömungsformen

zu finden. Die Strömungen müssen leicht und zuverlässig sowie mit bestimmten Frequenzen/Amplituden schaltbar sein. Das physikalisch/mathematische Problem ist analog zu einem Ball auf einer Hügelspitze der durch kleine Störungen entweder nach links oder nach rechts rollt und anschließend möglichst energieeffizient zwischen beiden Tälern hin- und herwandern (schalten) muß. Die Auslegung der Bauteile basiert bisher zu großen Teilen auf empirischen Regeln und soll mit Hilfe moderner numerischer Methoden auf eine fundierte und zuverlässige Basis gestellt werden.

Ziel des Großprojekts ist daher die direkte numerische Simulation komplexer Fluidik-Elemente und deren (Geometrie-)Optimierung in Bezug auf Frequenz- und Amplitudenverhalten sowie Frequenz-Massenstromverhältnis und einen geringen Druckverlust. Untersucht werden verschiedene Typen von fluidischen Transistoren in Form von selbst- und fremderregt schaltenden Bauteilen. Selbsterregte Elemente dienen dem Einsatz in Turbomaschinen zur Reduktion von Emissionen, der Senkung des Treibstoffbedarfs und der Lärmminimierung. Fremderregte Fluidik-Bauteile dienen der aktiven Kontrolle komplexer Strömungen. Die Vision sind leistungsfähige dynamische Aktuatoren mit geringem Strukturgewicht und Druckverlust.

Zur Modellierung der komplexen zwei- und dreidimensionalen Geometrien wird eine besondere Methode verwendet. Sie beruht auf der Grundidee, feste Körper als poröse Stoffe zu modellieren, bei denen die Porosität gegen Null strebt. Das Verfahren wird durch eine Erweiterung der beschreibenden Navier-Stokes-Gleichungen realisiert. Die Diskretisierung des Rechengebiets erfolgt unter Verwendung optimierter finiter Differenzen und pseudospektraler Ableitungen, wobei in beiden Fällen von einer charakteristischen Formulierung der Navier-Stokes-Gleichungen [2] ausgegangen wird. Für die zeitliche Diskretisierung wird ein explizites exponentielles Zeitintegrationsverfahren verwendet.

Zur Optimierung der Geometrie wird eine Methode verwendet, die auf den adjungierten Navier-Stokes-Gleichungen beruht und eine Optimierung unter Nebenbedingungen erlaubt. Mit Hilfe dieser Methode lassen sich sehr effizient Aussagen über den Gradienten (Optimierungsziel bezüglich Geometrie) ableiten. Über mehrere Iterationsschritte kann eine Optimierung über einen großen Parameterbereich, auch zeitlich durchgeführt werden.

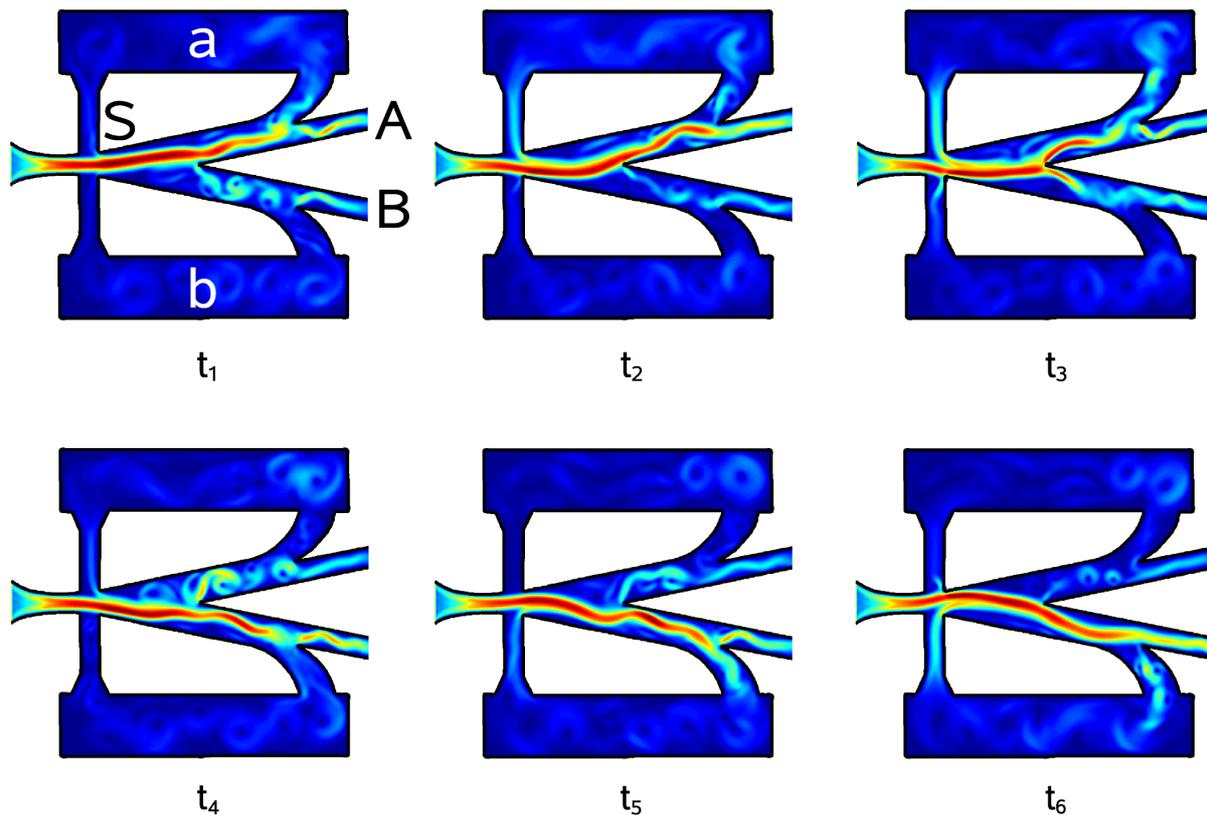


Abbildung 1: Verlauf einer Schaltsequenz im Fluidik-Element. Die Strömung ist von links nach rechts gerichtet. Die Geschwindigkeit des Fluides von 0-200 m/s ist durch den Farbverlauf von Blau nach Dunkelrot wiedergegeben. Zum Zeitpunkt t_1 strömt das Fluid durch den oberen Auslaß (A). Zeitversetzt (t_2) wird über die obere Rückführung (a) der Strahl an der Schaltstelle (S) nach unten abgelenkt und strömt in Folge ($t_3 - t_5$) durch den unteren Auslaß (B) aus. Zum Zeitpunkt t_6 erkennt man, wie durch die untere Rückführung (b) der Strahl wieder nach oben gelenkt wird, der Zyklus beginnt erneut.

Zudem liefern die Gleichungen Aussagen über die Sensitivität der Strömung gegenüber Störungen (Steuerströme) und damit Hinweise wie eine effiziente Schaltung zu realisieren ist.

Durchgeführt werden mehrere Parameterstudien mit Gitterauflösungen von $256 \times 256 \times 1$ bis $2048 \times 2048 \times 1$ Punkten (zweidimensional) und $256 \times 256 \times 64$ bis $2048 \times 2048 \times 256$ Punkten (dreidimensional). Dabei wird sowohl mit MPI als auch OpenMP parallelisiert. Der zu erwartende Speicherbedarf für eine hochauflösende Optimierungsrechnung liegt bei ≈ 20 TByte. Die entsprechende Simulation benötigt ≈ 2 Wochen Zeit auf 1000+ CPU-Kernen.

Die adjungierten Methoden sind Erweiterungen der bekannten direkten numerischen Simulation (DNS). Sie dienen dazu, daß eine Simulation nicht nur in der Lage ist die Physik korrekt widerzugeben, sondern einen wesentlichen Betrag bei der Optimierung von komplexen Geometrien und Mo-

dalstrukturen leistet. Durch die Weiterentwicklung dieser rechenintensiven Methoden können auch nicht offensichtliche Zusammenhänge in die Konstruktion und Optimierung von Fluidik-Elementen einfließen.

Mehr zum Thema

1. Rechten, A. W. (1976). Fluidik - Grundlagen, Bauelemente, Schaltungen. Springer.
2. Sesterhenn, J. (2000). A characteristic-type formulation of the navier-stokes equations for high order upwind schemes. *Computers & Fluids*, 30(1):37 - 67.

Förderung

Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

Kontrollierte Verdichtung in Flugtriebwerken

Numerische Simulation und Analyse einer Stator-kaskade mit aktiver Strömungskontrolle

C. Gmelin, M. Steger, E. Wassen, F. Thiele, Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik, Technische Universität Berlin

Kurzgefasst

- Steigendes Flugaufkommen und verschärfte Richtlinien erfordern effektivere Triebwerke.
- Methoden der aktiven Strömungsbeeinflussung bieten die Möglichkeit die Leistungsdichte eines solchen Antriebs zu erhöhen und somit Gewicht, Emissionen und Treibstoffverbrauch von modernen Flugtriebwerken zu senken.
- Da die Strömung in Axialverdichtern und die Beeinflussung durch Jets hochgradig turbulente Phänomene darstellen, werden die Untersuchungen hier an einer Stator-kaskade durchgeführt, welche den nicht-rotierenden Teil eines Axialverdichters repräsentiert.
- Hochauflösende Simulationen bieten Einsicht sowohl in die strömungsmechanischen Vorgänge der turbulenten Strömungen innerhalb des Verdichters als auch in die Interaktion zwischen der Hauptströmung und dem Jet der Aktuatorik.

Moderne Verdichter sind bereits stark optimierte Komponenten, welche effektiv unter stabilen Bedingungen arbeiten sollen. In stark belasteten Verdichtern neigt die Strömung dazu an den Statorschaufeln abzulösen. Praktisch wirkt sich dies in hohen Druckverlusten aus. Um moderate Stufenbelastungen einzuhalten, bestehen Verdichter stets aus einer großen Anzahl von Stufen. Durch aktive Beeinflussung der Ablösegebiete lässt sich der Strömungsabriss zu Betriebspunkten mit erhöhter Verdichterbelastung verschieben. Deshalb können entsprechende Fortschritte auf dem Gebiet der Verdichtertechnologie dazu beitragen, die Stufenzahl zu senken und somit das Gesamtgewicht zu verringern, den Treibstoffverbrauch zu senken und die Gesamtkosten zu reduzieren. Die in den letzten Jahren im aerodynamischen Bereich vorwiegend eingesetzten passiven Methoden wie Profilwölbung, 3D-Schaufelgeometrie sowie terrassierte Endwände sind mittlerweile weitgehend erschöpft. Die aktive Strömungsbeeinflussung verspricht auf diesem Gebiet den dazu nötigen Technologiesprung zu ermöglichen.

Es ist das Ziel dieses Projektes, die Ablösung an solchen hochbelasteten Turbomaschinenbe-

schaufelungen durch aktive Strömungsbeeinflussung zu vermindern bzw. vollständig zu vermeiden. Insbesondere soll das periodische Einblasen über Schlitze an den Gehäusewänden sowie den Schaufeloberflächen untersucht werden. *Aktive* Methoden zeichnen sich gegenüber *passiven* darin aus, dass die Beeinflussung lediglich bei Bedarf eingeschaltet werden kann und sie im ausgeschalteten Zustand keinen negativen, parasitären Effekt auf die Strömung ausübt. Darüber hinaus kann, in Kombination mit einem Regelmechanismus, für verschiedene Betriebspunkte auf die jeweils vorherrschenden Anströmbedingungen flexibel reagiert werden.

Die hierbei untersuchte ebene Stator-kaskade stellt eine vereinfachende Abwicklung der in Umfangsrichtung verteilten Leitschaufeln einer realen Turbomaschine dar. Die Kaskade wurde so ausgelegt, dass sie die typischen Strömungs- und Ablösephänomene einer hochbelasteten Verdichterschaufel aufweist. Auf der Schaufelaußenseite bilden sich auf Höhe der laminaren Ablöseblase massive Eckenwirbel aus, welche stromab die Strömung der Kaskade einschnüren. Bei ca. 70% Saugseitenlauflänge treffen die Eckenwirbel der beiden Endwände aufeinander und die Strömung löst senkrecht zur Strömungsrichtung ab. Die Endwände und die Schaufelaußenseite repräsentieren die Orte für zwei Beeinflussungskonzepte, welche in einem ersten Schritt unabhängig voneinander untersucht werden. Mit den Aktuatoren an den Endwänden sollen die Eckenwirbel an die Kaskadenendwände gerückt und somit die Einschnürung vermindert werden. Die Aktuatorik an der Schaufel zielt auf die Verzögerung bzw. Verhinderung der Ablösung nahe der Hinterkante ab. Nach Auffinden geeigneter Parameter für beide Beeinflussungspositionen soll die Kombination der beiden Konzepte simuliert werden.

Im Rahmen des Transferbereich (TFB) des Sonderforschungsbereiches (SFB) 557 „Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen“, Teilprojekt T2, an der Technischen Universität Berlin wurde, in Zusammenarbeit mit dem experimentellen Partnerprojekt, die Strömung analysiert und geeignete Aktuatorik-konzepte im Hinblick auf Art, Beeinflussungsposition, Frequenz und Amplitude der Aktuation ermittelt. Hierfür wurden instationäre Reynolds-gemittelte Navier-Stokes Simulationen durchgeführt [1].

Da bei einer Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Simulation (RANS) die Turbulenz durch

Reynolds-gemittelte Navier-Stokes Simulation (RANS)

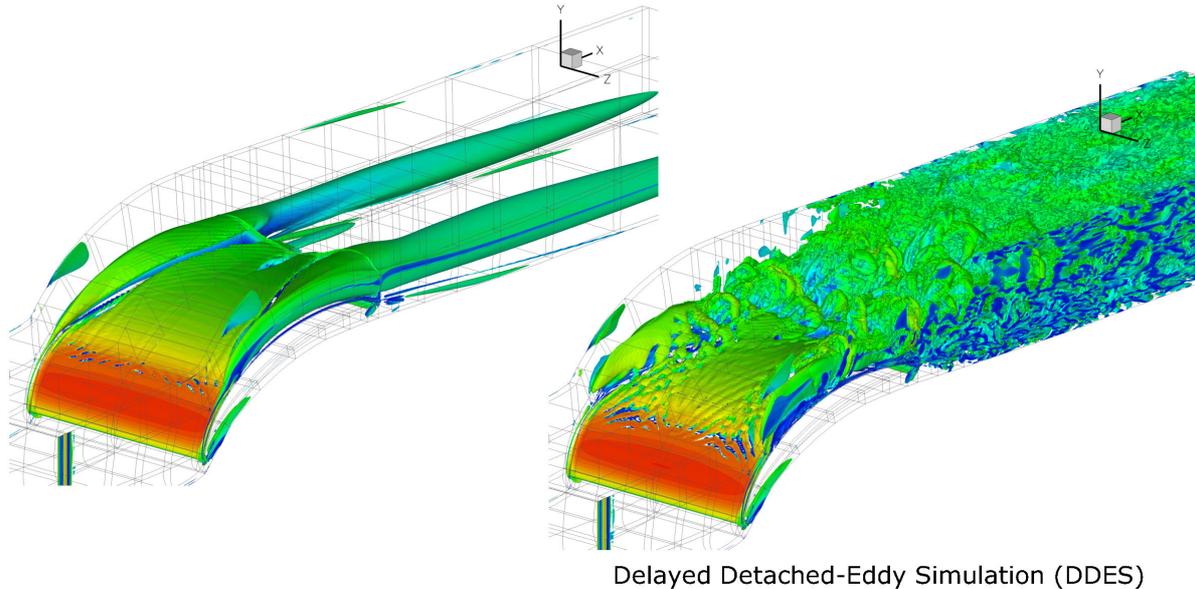


Abbildung 1: Visualisierung der Sekundärströmung in der Kaskade mit Hilfe von Isoflächen des λ_2 -Wirbelkriteriums eingefärbt mit der lokalen Strömungsgeschwindigkeit (rot: hohe, blau: niedrige Geschwindigkeit). Die linke Seite zeigt die Lösung der RANS-Simulation während die Rechte Seite die Lösung der DES darstellt. Die DES zeigt im Bereich der freien Scherschichten feine turbulente Strukturen auf, welche durch eine RANS nicht aufgelöst und erfasst werden können.

Modelle beschrieben wird, sind diese Verfahren zwar günstig in Bezug auf den Rechenaufwand, allerdings oft auch ungenau in der Beschreibung der Turbulenz, insbesondere bei abgelösten, instationären Phänomenen. Eine hochauflösende Large-Eddy Simulation (LES) modelliert nur die kleinsten Skalen während große Skalen direkt aufgelöst werden. Insbesondere ist eine LES speziell im wandnahen Bereich sehr teuer. Da bei einer Verdichterströmung zusätzlich zu den Schaufeln auch noch die Endwände berechnet werden müssen, wird hier ein hybrider Ansatz verwendet, welcher die Vorteile beider Berechnungsverfahren kombiniert. Die wandnahen Bereiche werden im RANS-Modus behandelt und in den wandfernen Bereichen turbulenter Strömungen werden die abgelösten, großskaligen Schwankungsbewegungen mit dem LES-Modus aufgelöst. Derartige hybride RANS-LES-Verfahren bezeichnet man als Detached-Eddy-Simulation (DES) [2]. Sie stellen einen Kompromiss aus aufgelösten Strömungsphänomenen und benötigter Rechenzeit dar, welcher in naher Zukunft industriellen Nutzen finden könnte. Die unterschiedliche Auflösung der Sekundärströmung in der Kaskade durch die beiden Verfahren (RANS – DES) ist deutlich in Abbildung 1 sichtbar.

Mehr zum Thema

1. Gmelin, C., Steger, M., Thiele, F., Huppertz, A., Swoboda, M.: Unsteady RANS Simulations of a Highly Loaded Low Aspect Ratio Compressor Stator Cascade with Active Flow Control. ASME Turbo Expo 2010, GT2010-22516, 2010.
2. Steger, M., van Rennings, R., Gmelin, C., Thiele, F., Huppertz, A., Swoboda, M.: Detached-Eddy Simulation of a Highly Loaded Compressor Cascade with Laminar Separation Bubble. 9th European Turbomachinery Conference, 2011.

Förderung

DFG-Sonderforschungsbereich 557

Does a sponge reduce jet screech? Optimal control to reduce supersonic jet-noise with porous media

J. Schulze, J. Sesterhenn, Institute of Fluid Mechanics and Engineering Acoustics, Berlin University of Technology

Abstract

- Supersonic jets used in aeronautics will be imperfectly expanded in flight. The adaption to the ambient pressure takes place in a sequence of oblique shocks
- The shock/shear-layer interaction may trigger the shear layer at the nozzle exit, forming a feedback loop which results in an extremely loud noise component called *screech* (160 dB).
- The minimization of supersonic jet noise (especially *screech*) is a matter of particular concern and the focus of the present project.
- The idea is to place an optimized porous medium around the nozzle to suppress the feedback loop and thus to minimize jet *screech*.
- Multidimensional high order and three-dimensional CFD optimization application solved on a half billion points with at least 1024 cores.

Supersonic jets, as found in civil- or military aircraft, are responsible for loud noise sources, polluting the environment [1]. One can distinguish between three physical flow phenomena responsible for supersonic jet noise. The first and usually quietest noise sources are of rather low frequency, and are caused by the turbulent mixing in the shear layers surrounding the jet core. Especially vortex pairing contributes to these sources. A second phenomenon, the so called shock induced noise, is caused by an interaction of these turbulent eddies with the oblique shocks in the jet core. Shock induced noise is of higher frequency than mixing noise and distributed over a vast range of frequencies in the power spectrum. In contrast to mixing noise which is mainly directed in downstream direction, shock induced noise is directed mainly in the upstream direction.

Considering a subsonic Co-flow of the supersonic jet, the upstream traveling shock induced acoustic waves can reach the nozzle exit. At this point, these acoustic pressure fluctuations are triggering the Kelvin-Helmholtz instabilities in the mixing layers. On their way downstream the jet, the instabilities are growing to larger coherent structures and interacting with the oblique shocks in the jet core. Again, shock induced noise is emanated upstream and closing a feedback loop with a certain

frequency. In the literature this effect is referred to as *screech* and can produce sound pressure levels of up to 160 dB.

As mentioned above, the *screech* feedback loop is closed by upstream traveling acoustics interacting with the nozzle exit lip. These acoustics are impinging at the nozzle lip, being reflected, and causing a pressure gradient at the nozzle exit, forcing the instabilities in the thin mixing layer. Thus, by a modification of the nozzle lip, the *screech* tone can be influenced. Generally speaking, a thick nozzle lip is producing louder *screech* tones than a small lip.

The focus of the present research project lies in the minimization of jet *screech* by a modification of the nozzle exit. In contrast of changing the nozzle geometry, we will follow a different approach by adding a porous medium at the nozzle exit to suppress *screech* tones. The idea is to damp impinging acoustic waves in the porous medium at the nozzle exit to suppress their sensitivity to forced instabilities in the mixing layers.

Porous media can be a complex three-dimensional geometry with pores of a vast range of different length scales. A usual fashion in CFD is to create a mesh around the geometry of interest and solve the flow in the resulting computational domain. Using a high order finite difference code with structured grids, as it is necessary for highly accurate aeroacoustic applications makes this approach impractical.

To this end, the porous medium investigated, is modeled by a volume force, similar to Darcy's law for incompressible flow. For the present aeroacoustic application the volume force is added to the full compressible Navier-Stokes equations leading to a new set of porous flow equations.

A porous medium is characterized by only two parameters, the porosity ϕ and the permeability \mathbf{K} . Whereas ϕ describes the volume ratio of void space to the whole volume of the porous material. Thus, a porosity equal to one represents void space only, and a porosity of zero a solid material, where no fluid could penetrate. The latter extreme would cause a singularity in the porous flow equations, thus only values of $0 < \phi \leq 1$ are feasible. The permeability \mathbf{K} is a symmetric tensor and measures the drag on the fluid penetrating the porous material.

Since it is by no means clear how to choose the two parameters to reduce *screech* tones, an optimization technique will be used to obtain the optimal distribution of the porosity and permeability.

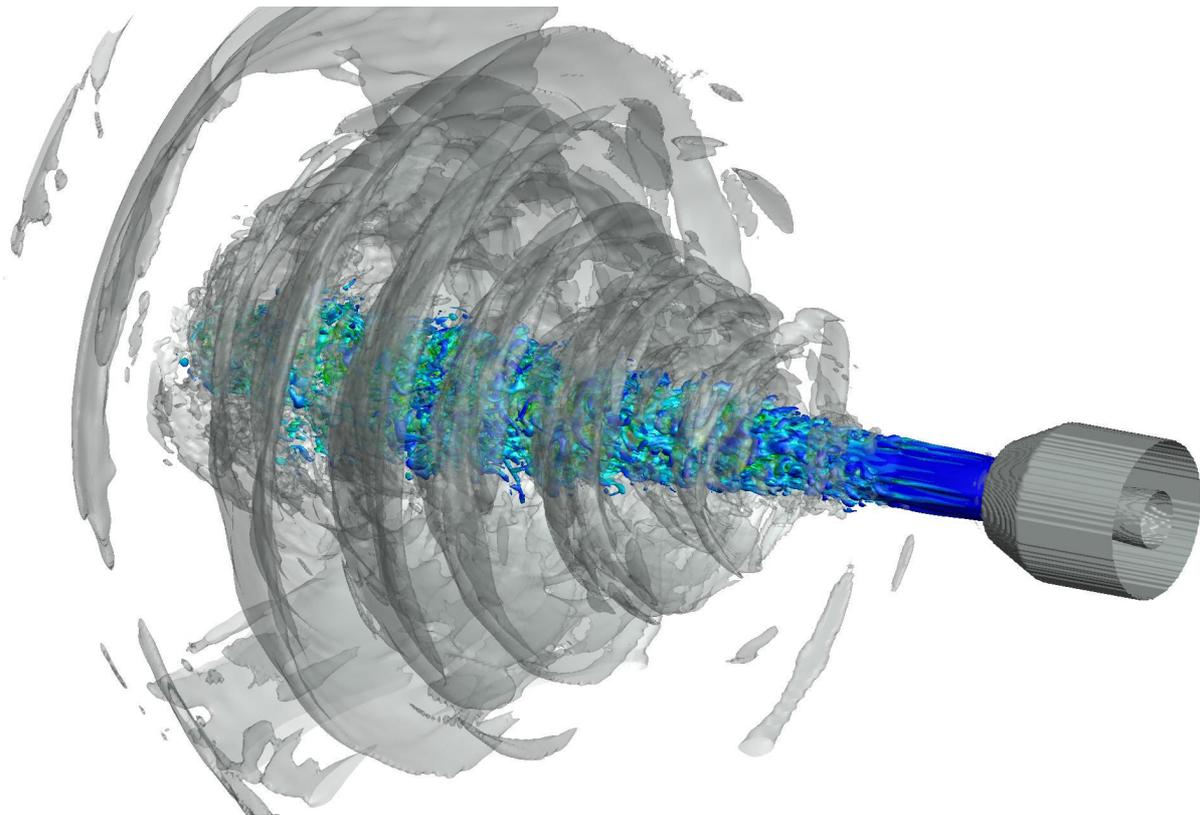


Figure 1: Vorticity iso-surface (color) and acoustic pressure iso-surface (translucent, gray) of an under-expanded supersonic and round jet including the complex geometry of the Laval nozzle (gray). Reynolds number based on the jet diameter: $Re = 30\,000$. Mach number at the exit of the jet: $M = 1.55$. Pressure ratio: $p_j/p_\infty = 2$ (under-expanded). Approx. 33 million grid points solved on 256 cores in only 3000 CPUh.

Due to the space-dependence of the design parameters, the number of parameters to control can easily be in the order of several thousand. To handle this amount of degrees of freedom in the optimization algorithm, adjoint methods will be used in an iterative design process to obtain the gradient information of the objective function (noise). The adjoint equations are based on the full compressible porous Navier–Stokes equations and are derived in a continuous manner without any further simplifications. Since the control parameters are constraint ($0 < \phi \leq 1$ and $\mathbf{K} < 0$), due to their physical properties, a method based on *slack* variables will be applied.

To solve the supersonic aeroacoustic application, direct numerical methods will be used in combination with a high order finite difference approach. Based on the high Reynolds number ($Re = 30\,000$) approximately $0.5 \cdot 10^9$ points will be used to resolve the flow in the computational domain.

Previous studies [2] showed that adjoint based methods, in combination with porous media, are a promising and efficient method to minimize trail-

ing edge noise. Beyond the aeroacoustic field, this type of flow optimization may find application in a variety of disciplines and configurations where the optimization of any objective by means of a modification of the geometry and/or material is desired.

More Information

1. Schulze, J. and Sesterhenn, J. (2008). Numerical Simulation of Supersonic Jet–Noise. *PAMM Proc. Appl. Math. Mech.* **8**(1):10703–10704.
2. Schulze, J. and Sesterhenn, J. (2010). Optimal distribution of porous media to reduce trailing edge noise. *EFMC8 Bad Reichenhall 2010*.

Funding

German Research Foundation (DFG)

Das Flugzeug muss leiser werden

Untersuchung und Beeinflussung von Breitbandlärm in Turbomaschinen mit neuartigen hybriden Simulationsverfahren

B. Greschner, F. Thiele, Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik, Technische Universität Berlin

Kurzgefasst

- Flugzeuge müssen leiser werden um die Belastung für die Umwelt und den Menschen zu reduzieren
- Bei Start/Landung sind Triebwerke einer der Hauptverursacher des Lärms
- Die Auslegung von Flugzeugtriebwerken hinsichtlich des breitbandigen Lärms erfolgt heutzutage größtenteils empirisch, da die Lärmentstehungsmechanismen weitgehend unbekannt sind
- Neueste hybride RANS/LES-Verfahren sollen erstmalig im Bereich der Turbomaschinen angewendet werden um die Verhersagemöglichkeiten mittels direkter numerischer Simulation in diesem Bereich zu demonstrieren
- Die Analyse der hochauflösenden Strömungssimulationen soll die hauptsächlichsten Lärmentstehungsmechanismen identifizieren und quantifizieren
- Aktive und passive Methoden zur Beeinflussung des Lärms in Triebwerken werden untersucht

Die zukünftigen Verschärfungen im Lärmschutz bei gleichzeitiger Zunahme des Flugverkehrs resultieren in der Forderung nach immer leiseren Flugzeugen bzw. deren Komponenten. Während sich in den vergangenen Jahrzehnten deutliche Fortschritte vorallem im Bereich des damals vorherrschenden Freistrahllärms abzeichneten, tritt nun der durch die Komponenten im Bypassstrom des Triebwerkes verursachten Lärm in den Vordergrund. Besonders kritisch werden dieser Effekte bei den von den Turbinenherstellern für die Zukunft favorisierten 'Ultra-High-Bypass-Ratio Fans' (UHBR-Fan), da hier der Lärm hauptsächlich von Rotor, Stator und Interaktion von diesen im Bypassstrom verursacht werden – der Freistrahllärm tritt weiter in den Hintergrund. In den letzten Jahren wurden mit grossem Aufwand die Quellmechanismen von tonalen Anteilen des Bypasslärms untersucht und Fortschritte bei der Verminderung/Kontrolle diese Lärmquellen gemacht. Der im Bypass verursachte Breitbandlärm wurde bisher jedoch kaum untersucht, da hier einerseits experi-

mentell aber vorallem auch von der Simulationsseite her enormer Aufwand betrieben werden muss. Die sehr schnell rotierenden Rotorblätter produzieren ein hochgradig turbulentes und instationäres Strömungsfeld. Die Interaktion dieser kleinskaligen turbulenten Strukturen mit Einbauten, Kanten, Statorblättern und den nachfolgenden Stufen lässt sich nur unzureichend mit einfachen Modellen erfassen. Die direkte numerische Simulation der lärmverursachenden instationären Strömung ist erforderlich für ein besseres Verständnis der Lärmquellen in Triebwerken.

In unserem Projekt werden einerseits Verfahren zur Simulation bzw. Vorhersage von Breitbandlärm in Turbomaschinen untersucht, andererseits werden erste Konzepte zur Beeinflussung dieses Breitbandlärms zur Verringerung des gesamten abgestrahlten Schalls untersucht. Die hauptsächlichsten breitbandigen Lärmquellen sind dabei einerseits der 'Selfnoise', d.h. der durch die turbulente Umströmung von Rotor und Stator erzeugte Lärm. Hierbei interagieren die kleinen, stark chaotischen Grenzschichtstrukturen mit der Flügelhinterkante und generieren breitbandigen Lärm. Des weiteren interagieren die vom Rotor generierten turbulenten Strukturen mit dem Stator, dies ist der sogenannte 'Interaction noise'. Der tonale Anteil ist hier besonders dominant, gekennzeichnet durch die 'blade passing frequency' (BPF), ist andererseits durch seine periodisches Verhalten gut verstanden und auch beeinflussbar. Der breitbandige Anteil am 'Interaction noise' ist bisher jedoch kaum untersucht worden, da er mit dem 'Selfnoise' ein gekoppeltes Problem darstellt. Die dritte vorherrschende breitbandige Schallquelle in Turbomaschinen ist der 'rotor tip clearance flow', d.h. die Endspitzenwirbel der schnell drehenden Rotorblätter interagieren mit der turbulenten Grenzschicht des Turbinengehäuses.

Die numerischen Kosten bei derartigen Untersuchungen sind enorm, da die Geometrien von Turbomaschinen sehr komplex sind und eine gewisse Mindestanzahl von Rotor- und Statorblättern für eine Passage gerechnet werden müssen - vereinfachte Modellierung wie bei stationären und instationären RANS-Simulationen sind bei der Untersuchung von Breitbandlärm nicht möglich. Des weiteren sind die in der Praxis relevanten Mach- und Reynolds-Zahlen sehr hoch und damit die Grenzschichten sehr dünn. Dabei erfordert jedoch die detaillierte Analyse der Akustik eine aufgelöste Simulation zumindestens des turbulenten Berei-

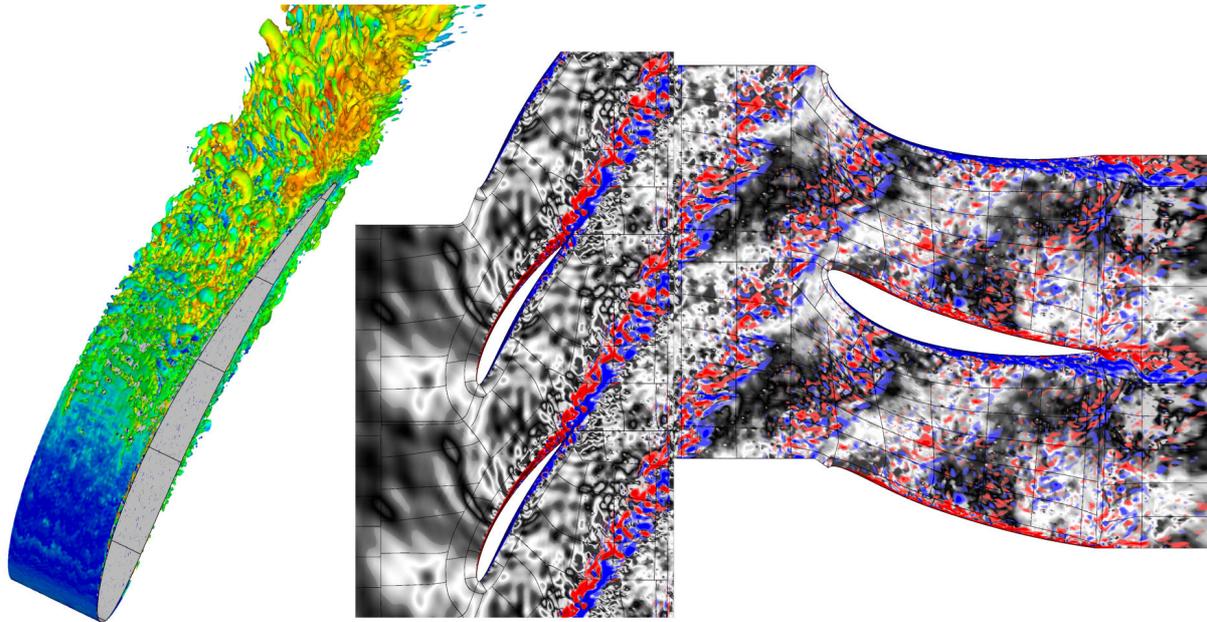


Abbildung 1: IDDES-Simulation des *DLR Fan Rig* als vereinfachte Rotor-Stator-Kaskade: Links sind die turbulenten Strukturen in der Grenzschicht und im Nachlauf eines Rotorblattsegmentes dargestellt (Isokontour λ_2 eingefärbt mit der Viskosität). Auf der rechten Seite ist ein Schnitt durch die Rotor-Stator-Kaskade abgebildet. In schwarz-weiß sind die Druckschwankungen (Schall) visualisiert, überlagert mit Wirbelstrukturen (Wirbelstärke ω_z in rot-blauer Farbskala).

ches dieser sehr dünnen Grenzschichten. Somit kommen nur Large-Eddy-Simulationen (LES) oder gar Direkte Numerische Simulationen (DNS) für die Untersuchung in Frage. Ein vielversprechender neuartiger Ansatz für die Simulation dieser Problemklasse ist ein hybrides RANS/LES-Verfahren, die Improved-Delayed-Detached-Eddy-Simulation (IDDES) von Travin u.a. 2006 [2]. Diese neue Variante der DES bietet bei Nutzung feiner Gitter die Möglichkeit im Bereich abgelösten Strömungen und zusätzlich in der turbulenten Grenzschicht den LES-Modus zu nutzen und somit aufgelöst zu rechnen. In weniger wichtigen Bereichen wird mittels größerer Gitter weiterhin die sparsame RANS-Modellierung verwendet. Somit wird eine ähnliche Qualität der Simulation wie bei einer LES erreicht, jedoch mit geringeren Kosten. Die Simulation eines Triebwerkes wird auf Supercomputern somit erstmals realistisch möglich.

In unserem Projekt wird im ersten Teil der breitbandige Lärm des *DLR Fan Rigs* aus dem EU Projekt FLOCON in zwei verschiedenen Konfigurationen untersucht (Rotor-Stator-Kaskade mit 160 CPUs bzw. Vollkonfiguration mit 540 CPUs). In der zweiten Projekthälfte werden die in FLOCON vorgeschlagenen Beeinflussungskonzepte ebenfalls direkt mit hochauflösenden Simulationen untersucht, mit den unbeeinflussten Referenzsimulation verglichen und somit detaillierte Kenntnisse

der Strömung und Möglichkeiten zur Beeinflussung des Breitbandlärms in Turbomaschinen aufgezeigt.

Mehr zum Thema

1. B. Greschner, J. Grilliat, M.C. Jacob und F. Thiele, 2010: Measurements and wall modeled LES simulation of trailing edge noise caused by a turbulent boundary layer, *International Journal of Aeroacoustics*, Vol. 9, Nr. 3
2. A. K. Travin, M. L. Shur, P. R. Spalart und M. K. Strelets, 2006: Improvement of Delayed Detached-Eddy Simulation for LES with Wall Modelling, *ECCOMAS CFD*

Förderung

Europäische Union FP7 FLOCON

Turbulence simulations for greener and quieter air transport Further development of DES for the simulation of complex turbulent flows

C. Mockett, B. Greschner, L. Wang, F. Thiele,
Institut für Strömungsmechanik und Technische
Akustik, Technische Universität Berlin

Abstract

- Turbulent flow increases fuel consumption and noise in air transport.
- Precise computational fluid dynamics (CFD) for turbulent flow requires next-century computing power; affordable turbulence models are unreliable.
- Hybrid approach “detached-eddy simulation” (DES) aims at reliable turbulence prediction with near-future computational resources.
- Method development for simple flows; technology demonstration on complex application challenges.

The flow of gases or liquids can be laminar (smooth and unchanging in time) or turbulent (characterised by a chaotic and unsteady mixture of eddies with a wide range of different sizes). Turbulence is the rule rather than the exception in practical flows, and is a very important phenomenon related to mixing, heat transfer, energy dissipation and sound generation. The last two are particularly relevant to aerospace applications, since turbulence is responsible for much of the aerodynamic resistance and noise that defines the environmental impact of air transport: fuel consumption, emissions and noise pollution.

Although computer-aided engineering is increasingly employed by industry in efficient product design, computational fluid dynamics (CFD) lacks maturity in comparison with other disciplines. A key reason for this is turbulence: Although it is possible to simulate turbulent flow accurately by *resolving* the motion of every eddy in time and three-dimensional space, for practical applications this requires computing power not expected until the next century [2]. Alternatively, the effect of the turbulence on the flow can be *modelled*, making CFD for turbulent flow affordable today. However, such models are calibrated for specific types of flow and typically give very unreliable results in different applications.

The EU-funded ATAAC project [1] is tasked with developing and improving turbulence methods for CFD, with a particular emphasis on air transport applications. The TU Berlin is one of 22 project partners, with its focus on a methodology known

as detached-eddy simulation (DES). Since its introduction in 1997 [2], DES has become one of the most promising methods of its kind [3][4]. DES aims to provide reliable, time-resolved turbulence simulation with the computing capacity expected to become routine in the near future. The development, testing and demonstration of the method therefore requires large computing resources by today’s standards and the contingent provided by the HLRN is essential to the success of the project. DES can be described as a hybrid approach, whereby accurate resolution of the turbulent eddies is combined with efficient modelling in different regions of the flow.

In order to thoroughly test the DES method and to assess any improvements as well as the importance of various simulation setup issues, a wide range of different configurations are being simulated. Simplified geometries and canonical flows are employed for parameter studies, validation and method development due to their low computational expense and high-quality benchmark data. These include test cases such as fully-developed planar channel flow, a channel with a two-dimensional “hill” causing flow recirculation, the flow around tandem cylinders and a simplified aircraft landing gear. Complex “application challenge” test cases are simulated in order to demonstrate the robustness and quality of the improved turbulence modelling techniques for industrial configurations. Examples include the flow around a helicopter fuselage and the flow inside an aircraft engine air intake exerted to a crosswind.

Depending on the size of the problem, between 16 and 256 CPUs are employed in parallel for each simulation. Although these numbers are relatively modest, the high computational expense arises due to the very long simulation run times (often up to several weeks). This is necessary to obtain long time samples for accurate statistical quantities (e.g. the time-averaged flow speed and direction throughout the configuration).

Turbulent eddies also generate pressure fluctuations, which can give rise to strong sound sources in the flow. A practical example of such aeroacoustic sound generation, which leads to considerable environmental disturbance, is airframe noise: Protruding components on landing aircraft, such as landing gear and flaps, generate strong turbulent fluctuations and high levels of noise, particularly when the eddies interact with other parts of the aircraft. By avoiding the resolution of the turbulent fluctuations in the simulation, turbulent sound gen-

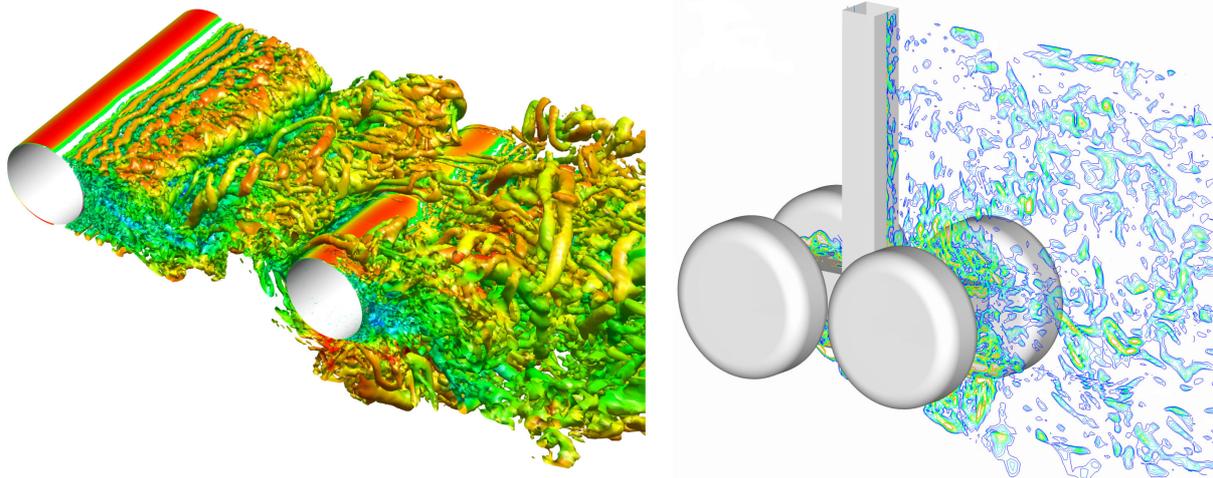


Figure 1: Snapshots of turbulent vortices resolved in two simulations: Tandem cylinders as a benchmark model for airframe noise (left) and a simplified landing gear model (right).

eration cannot be simulated using standard statistical turbulence models. Methods such as DES, which enable the resolution of as many turbulent eddies as is affordable are therefore ideally suited for efficient aero-acoustic simulations. This forms a particular emphasis of the TU Berlin work, with the aim of providing engineers with a useful aero-acoustic prediction tool to ultimately reduce such noise in future designs. Two flow configurations that are particularly interesting for airframe noise simulation are shown in the figure: The tandem cylinders are considered a benchmark test case for airframe noise as well as providing a very challenging flow in its own right. The simplified landing gear is the focus of international efforts to compare and improve computational aero-acoustic simulation methods.

These activities therefore contribute to the improvement and industrialisation of efficient methods for turbulence simulation, which can be applied by the air transport industry in the design of greener and quieter aircraft of the future.

More Information

1. The ATAAC Project Website:
<http://cfm.mace.manchester.ac.uk/ATAAC/>
2. P. Spalart, W. Jou, M. Strelets, and S. Allmaras. Comments on the feasibility of LES for wings, and on a hybrid RANS/LES approach. *Advances in DNS/LES*, 1, 1997.
3. P. Spalart. Detached-eddy simulation. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 41:181-202, 2009.
4. C. Mockett. A comprehensive study of detached-eddy simulation. Dissertation, TU Berlin, 2009.

Funding

European Union FP7, Project ATAAC, Research & Innovation

Das Triebwerk muss leiser werden

Untersuchung und Beeinflussung des Breitbandlärms von Triebwerksdüsen durch Modifikation der Düsenkante

D. Eschricht, F. Thiele, Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik, Technische Universität Berlin

Kurzgefasst

- Das sich stetig vermehrende Luftfahrtverkehrsaufkommen führt zu einer steigenden Lärmbelastung in flughafennahen Gebieten
- Dieser Lärm wird immer noch in großem Maße durch die Triebwerke erzeugt.
- Die Verringerung des Triebwerkslärms ist in der Vergangenheit durch eine Erhöhung des Nebenstromverhältnisses erreicht worden. Aufgrund konstruktiver Vorgaben ist das Potential hier jedoch nahezu erschöpft.
- Andere Maßnahmen zur Lärmreduktion werden darum untersucht. Dazu gehört auch die Beeinflussung der Strömung durch konstruktive Veränderungen an den Triebwerksdüsen.

Die führenden Flugzeughersteller gehen in ihren Wachstumsprognosen von einer stetigen Zunahme des weltweiten Luftverkehrsaufkommens aus. Man rechnet mit einer Verdoppelung in den nächsten 15 Jahren. Für die Bewohner flughafennaher Gebiete heißt das, dass die Zahl von Überflügen, von Starts und Landungen weiter zunehmen wird. Das bedeutet gleichzeitig, neben anderen Umweltbelastungen, auch einen Anstieg des Lärms durch den Luftverkehr. Aus diesem Grund ist es ein erklärtes Ziel der Europäischen Union und der Bundesregierung neben dem Treibstoffverbrauch, auch die Lärmemission mit Hilfe von industrienahen Forschungsprogrammen bis 2020 um 50% zu senken. Das würde nicht nur die Umweltbelastungen senken, innovative Technologien verschaffen der europäischen Luftfahrtindustrie auch Wettbewerbsvorteile gegenüber anderen Anbietern. Der optimale Entwurf von Flugzeugkomponenten ist ein weiteres Ziel der Luftfahrtindustrie. Wenn verlässliche, numerische Simulationen die Effizienz und den Lärm eines Triebwerks vorhersagen, könnten sie den aufwendigen Bau und Test von Prototypen ersetzen, und damit bereits früh in der Entwurfsphase die Güte einer Konstruktion bewerten. In unserem Projekt führen wir solche Simulationen durch um die Qualität der Vorhersage zu verbessern. Das Vorhersagen von guter Qualität möglich sind konnten wir in [1] zeigen. Durch Analyse des Strömungsfeldes soll das Verständnis

für die Mechanismen der Lärmentstehung verbessert werden.

Die Lärmemission von Flugzeugturbinen ist in den vergangenen Jahrzehnten bereits deutlich gesunken. Die Verringerung des Lärms wurde durch eine Erhöhung des Nebenstromverhältnisses erreicht. Dabei wird mehr Luft in den kalten, äußeren Luftstrom gegeben, wodurch dieser – bei gleichem Schub – langsamer aus dem Triebwerk austritt und dadurch leiser ist. Gleichzeitig mussten die Triebwerke dafür immer größer werden. Heutzutage ist das Potential der Erhöhung des Nebenstrom weitgehend ausgeschöpft, da konstruktive Größenbeschränkungen nahezu erreicht sind. Andere Maßnahmen zur Lärmreduktion werden darum schon länger untersucht. Dazu gehört neben zum Beispiel Einblasen von Luft quer zur Strömungsrichtung, auch die Veränderung der Düsenhinterkante, die die Ausbildung der dahinter entstehenden Wirbelstrukturen beeinflussen soll.

Das Strahltriebwerk erzeugt Vortrieb durch den ständigen Ausstoß von Luft. Beim Start zum Beispiel strömt die Luft mit nahezu Schallgeschwindigkeit aus dem Triebwerk aus. Zwischen dieser schnell strömenden Luft und der ruhenden Luft in der Umgebung herrscht ein extremer Geschwindigkeitsunterschied (typischerweise 850 km/h), dadurch kommt es zur Ausbildung von Wirbeln in der sogenannten Scherschicht, der Luftschicht zwischen der schnell und langsam strömenden Luft. Die Wirbel sind komplexe, turbulente Strukturen, die miteinander interagieren und dabei die langsam und schnell, strömende Luft vermischen. Dabei erzeugen sie den störenden Lärm.

Für eine numerische Simulationen ergeben sich dabei mehrere Schwierigkeiten. Zum einen müssen die Wirbelstrukturen vom Rechengitter erfasst werden, was heißt, dass das Gitter feiner sein muss als die turbulenten Wirbelstrukturen in der Scherschicht. Daraus ergeben sich Gitter mit mehreren 10 Millionen Punkten. Zweitens müssen die Simulationen zeitaufgelöst durchgeführt werden, da der entstehende Lärm einen breiten Frequenzbereich ausfüllt, wobei auch hohe Frequenzen von Interesse sind. Die daraus resultierenden kleinen Zeitschrittweiten der Simulation und die Notwendigkeit lange physikalische Zeiten zu berechnen, um statistisch sichere Mittelwerte und Spektren zu bekommen, führen zu einem großen Rechenzeitbedarf, der nur auf Höchstleistungsrechnern, wie dem HLRN zur Verfügung steht. Es gibt zwar Ansätze die Zeitkomponente aus den Simulationen

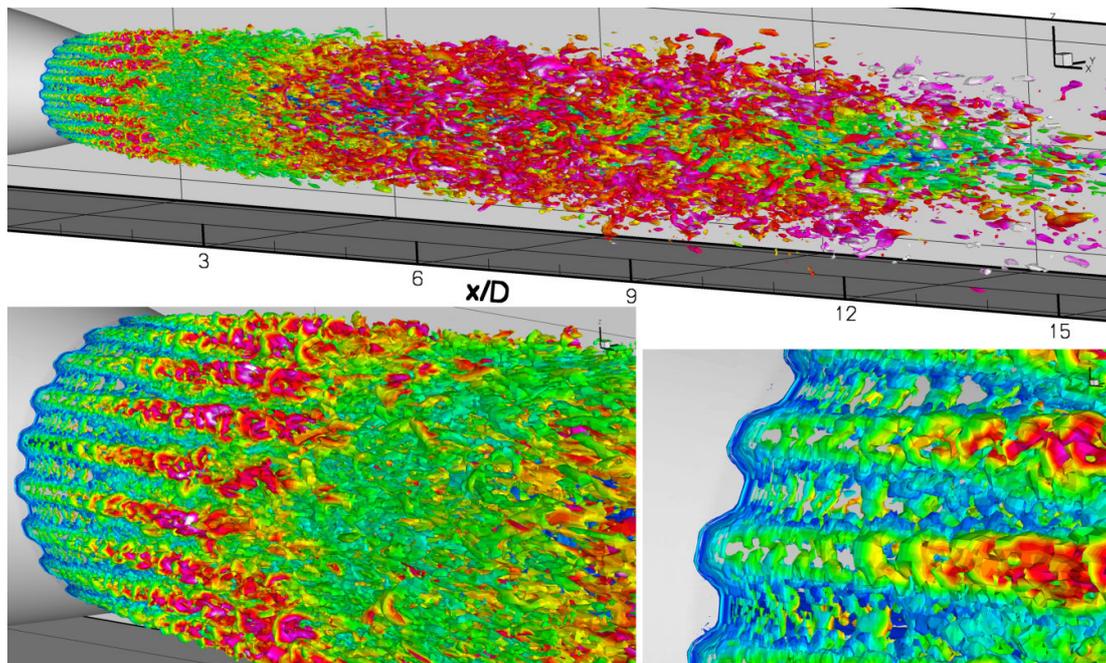


Abbildung 1: Wirbelstrukturen hinter der gezahnten Düse; Zu Erkennen sind an der Hinterkante angebrachte Zähne, diese erzeugen Längswirbel, die eine Verringerung des Lärms bewirken

zu entfernen und durch ein Modell zu ersetzen, das die Frequenzinformationen aus einem mittleren Strömungsfeld generiert – wodurch sehr viel Rechenzeit eingespart werden könnte. Ein solcher Ansatz basiert jedoch auf einer Strömungssimulation bei der die mittlere Auswirkung der Wirbel auf das Strömungsfeld durch ein Turbulenzmodell ersetzt wird. Gerade bei Geometriemodifikationen zeigen sich hier jedoch Schwächen der Modelle sowohl bei der Wiedergabe der mittleren Strömung als auch bei der Generierung der Frequenzinformationen.

Auch bei einer sehr großen Anzahl von Gitterpunkten, und der damit einhergehenden feinen Gitterauflösung, werden immer noch die sehr kleinskaligen Wirbel in der Strömung vernachlässigt. Um ihre Auswirkung auf das Strömungsfeld dennoch zu erfassen kommt auch hier ein Turbulenzmodell zum Einsatz. In unserem Projekt nutzen wir ein hybrides Modell, die DES (englisch: Detached-Eddy Simulation). Dieses Modell besitzt zwei Modi, erstens den zeitlich konstanten Modus in dem das Modell wie ein klassisches Turbulenzmodell funktioniert, und den Einfluß sämtlicher turbulenter Strukturen auf das Feld modelliert. Und zweitens, den räumlich und zeitlich aufgelösten Modus in dem das Modell nur die Auswirkung der sehr kleinen Wirbel auf das Strömungsfeld modelliert. Dieser Modus ist gekennzeichnet durch einen deutlich geringeren Einfluß des Modells auf die Strömung, da darauf vertraut wird, dass die größeren Wirbel vom

Gitter wiedergegeben werden, und so ihre Wirkung auf das Strömungsfeld selbst ausüben. Für diesen Modus gibt es auch andere Modelle, die Grobstrukturmodelle (englisch: Large-Eddy Simulation, LES). In früheren Arbeiten [2] haben wir zum Beispiel gezeigt, dass die DES ganz ähnliche Ergebnisse wie andere Grobstrukturmodelle liefert. Ein besonderer Vorteil der DES liegt jedoch in den Bereichen in denen die größeren Wirbelstrukturen so klein sind, dass sie nicht mehr aufgelöst werden können. Hier greift der erste Modus des Modells. Solche Bereiche gibt es innerhalb der Düse, dort sind es die Regionen sehr nah an der Wand in denen kleinste Wirbel für die Verluste in der Düse sorgen, die ihren Wirkungsgrad bestimmen.

Mehr zum Thema

1. D. Eschricht, U. Michel und F. Thiele, 2010: The Effect of Grid Refinement on Jet Noise Predictions Based on Detached-Eddy Simulation, Proceedings of the 19th Polish National Fluid Dynamics Conference, Posnan
2. D. Eschricht, J. Yan, U. Michel und F. Thiele, 2008: Prediction of Jet Noise from a Co-planar Nozzle, AIAA Paper AIAA-2008-2969

Förderung

Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie; Rolls Royce Deutschland

Eingefrorene Strömungen

Numerische Untersuchungen der Strömung von Kristallschmelzen beim Czochralski-Verfahren

R. Fornari, Institut für Physik, Humboldt-Universität zu Berlin

Kurzgefasst

- Oxidische Kristalle werden in vielen technischen Anwendungen benötigt.
- Die Kristalle werden im Czochralski-Verfahren aus der Schmelze gezüchtet.
- Die Strömung in der Kristallschmelze hat einen wesentlichen Einfluß auf die Qualität der fertigen Kristalle.
- Durch numerische Strömungssimulation sollen die Prozessparameter gefunden werden, die das Ergebnis günstig beeinflussen.

Oxidische Kristalle spielen eine wichtige Rolle in technischen Anwendungen wie Feststofflasern, Leuchtdioden und nichtflüchtigen elektronischen Speicherbausteinen (FeRAM). Diese Anwendungen stellen sehr hohe Anforderungen an die Qualität der Kristalle. Der Czochralski-Prozess ist das wichtigste Verfahren zur Herstellung von oxidischen Einkristallen dieser Qualität. Dabei werden die Rohmaterialien in einem Tiegel aufgeschmolzen. In die Schmelze wird ein Impfkristall getaucht und an diesem der Einkristall gezogen.

Die Züchtung dieser Kristalle ist noch immer eine große technologische Herausforderung. Die Qualität des fertigen Kristalls hängt wesentlich von der Strömung in der Schmelze und der sich daraus ergebenden Temperaturverteilung ab. So kann es zum Beispiel bei oxidischen Kristallen zu unerwünschtem Spiralwachstum kommen [1], siehe Abbildung 1. Auch hängt die Form der Phasengrenze zwischen Kristallschmelze und Kristall von dem Strömungsfeld ab [2]. Die Phasengrenze findet sich später in Form von Wachstumsstreifen (growth striations) im fertigen Kristall wieder.

Die Strömung in der Kristallschmelze wird durch verschiedene Kräfte angetrieben: Die Dichte in der Schmelze hängt von der Temperatur ab und dadurch steigt wärmere Flüssigkeit auf und kältere sinkt ab (Auftriebskonvektion). Aber auch die Oberflächenspannung an der freien Oberfläche der Flüssigkeit ist temperaturabhängig. Sie ist im kälteren Bereich der Oberfläche höher als im wärmeren. Dies treibt eine Strömung von der geheizten Tiegelwand in die Mitte zum relativ kalten Kristall an (Marangonikonvektion). Schließlich wird der fertige Kristall beim Czochralski-Prozess ge-

dreht und diese Rotation überträgt sich an der Phasengrenze zwischen festem Kristall und Schmelze auf die Flüssigkeit. Dabei wird die Flüssigkeit durch die Fliehkraft im Bereich der fest/flüssig-Phasengrenze nach außen getrieben.

Entsprechend kann die Strömung durch verschiedene Prozessparameter, wie die Heizleistung oder die Rotationsgeschwindigkeit des Kristalls beeinflusst werden. Aber auch Veränderungen im Prozessaufbau haben eine Wirkung. So kann durch den Einbau von Wärmereflektoren die Temperaturverteilung verändert werden. Und auch die Form des Tiegels kann das Strömungsfeld verändern. Ziel des Projektes ist es, die Parameter zu identifizieren, die den Prozess günstig beeinflussen.

Oxidische Kristalle haben einen hohen Schmelzpunkt von 1500°C bis 2100°C. Bei diesen Temperaturen sind Messungen und Beobachtungen der Strömung im Experiment nur sehr eingeschränkt möglich. Daher sind zum Verständnis der Strömungsmuster und des Einflusses der verschiedenen Prozessparameter auf die Strömung numerische Simulationen unverzichtbar.

Obwohl der Aufbau und die Randbedingungen im Czochralski-Prozess rotationssymmetrisch sind, können in der Schmelze doch Strömungsmuster entstehen, die diese Symmetrie brechen. Um dies zu untersuchen sind volle, dreidimensionale Simulationen nötig. Andererseits ist es notwendig, Staupunkte in der Strömung und dünne Temperaturgrenzschichten durch ein feines Rechengitter aufzulösen. Daraus ergibt sich insgesamt ein sehr hoher Rechenaufwand für die Simulationen, die den Einsatz von Hochleistungsrechnern erfordern. Durch Gebietszerlegungsmethoden soll der Strömungslöser parallelisiert werden, damit die Simulationen auf vielen Prozessoren effizient berechnet werden können. Für kleinere Rechnungen steht uns am Institut für Kristallzüchtung ein kleiner Parallelrechner zur Verfügung, dessen Hardware dem ICE-System des HLRN weitgehend gleicht. Damit können Programmentwicklung und kleinere Tests bei uns im Hause durchgeführt werden.



Abbildung 1: Spiralwachstum bei oxidischen Kristallen im Czochralski-Prozess, links Dysprosiumscandat (DyScO_3), rechts Samariumscandat (SmScO_3)

Mehr zum Thema

1. R. Uecker, H. Wilke, D. G. Schlom, B. Veličkov, P. Reiche, A. Polity, M. Bernhagen und M. Rossberg. Spiral formation during Czochralski growth of rare-earth scandates. *J. Crystal Growth*, 295 (1), 84–91, 2006.
2. D. Schwabe, R. R. Sumathi und H. Wilke. The interface inversion process during the Czochralski growth of high melting point oxides. *J. Crystal Growth*, 265 (3–4), 494–504, 2004.

Förderung

Deutsch-Israelische Stiftung für Wissenschaftliche Forschung und Entwicklung

Strömungssimulationen zur Lärminderung von Flugtriebwerken Numerical Investigation of Noise Generation and Reduction in Turbofan Engines

M. Steger, U. Michel, F. Thiele, Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik, Technische Universität Berlin

Kurzgefasst

- Insbesondere bei der Landung liefert das Fangeräusch einen wesentlichen Anteil an der Geräuschentwicklung moderner Flugtriebwerke.
- Durch die auch in künftigen Triebwerksgenerationen weiter anwachsenden Triebwerksdurchmesser (Zunahme des Nebenstromverhältnisses bzw. Mantelmassenstroms) tritt das Fangeräusch weiter in den Vordergrund.
- Das Spektrum des Fangeräusches wird von diskreten Frequenzen (Töne bei der Blattfolgefrequenz und den höheren Harmonischen) dominiert. Diese Töne resultieren im Wesentlichen aus der zeitlich periodischen Wechselwirkung der Strömung des rotierenden Fans (Rotor) mit den nicht-rotierenden Schaufeln (Stator). Durch den stochastischen Schwankungsanteil der Strömung (Turbulenz) wird zudem ein Breitbandgeräusch (Rauschen) abgestrahlt.
- Durch Einblasen im Blattspitzenbereich des Fans wird ein Gegenschallfeld erzeugt, was zu einer Lärminderung des gesamten abgestrahlten Schallfeldes führen soll.
- Hochauflösende Rechenverfahren auf der Basis von sogenannten „Detached Eddy Simulationen“ (DES) bieten die Möglichkeit, neben den Tönen auch den Breitbandanteil des akustischen Spektrums zu erfassen. Diese Simulationen sind sehr rechenintensiv und können daher nur auf modernen Großrechenanlagen durchgeführt werden.

Einen wesentlichen Beitrag für die gesamte Geräuschentwicklung moderner Turbostrahltriebwerke mit hohen Nebenstromverhältnissen liefert der Fanlärm. Kennzeichnend für die Weiterentwicklung der in der Vergangenheit eingesetzten Triebwerksgenerationen ist die kontinuierliche Zunahme der realisierten Nebenstromverhältnisse. Die daraus resultierenden steigenden Massendurchsätze führen bei gleich bleibendem Schubimpuls zu verringerten Strahlgeschwindigkeiten. Dies hat neben aerodynamischen Vorteilen durch einen verbesserten Vortriebswirkungsgrad auch eine deutliche Reduktion des Strahlärms zur Folge. Besonders beim Landeanflug eines Flugzeugs verliert der zuvor den Ge-

samtschallpegel dominierende Strahlärm entsprechend zunehmend an Bedeutung, wohingegen der Fanlärm durch die anwachsenden Fanschaufeln weiter in den Vordergrund gerät. Von großem Interesse ist daher die Entwicklung geeigneter Geräuschminderungsmaßnahmen des Fanlärms, welche sich zudem in künftigen Triebwerksentwicklungen praktisch realisieren lassen.

Das Fangeräusch wird durch stark unterschiedliche strömungsakustische Quellmechanismen erzeugt und besteht im akustischen Spektrum sowohl aus tonalen als auch aus breitbandigen Komponenten. Befindet sich die Blattspitzengeschwindigkeit des Fans im Unterschallbereich, wird das abgestrahlte Schallfeld von diskreten Frequenzen (Tönen) bei der Blattfolgefrequenz (BPF) und den höheren Harmonischen dominiert. In diesen Fällen können zeitlich periodische Wechselwirkungen, wie die Interaktion der Rotornachläufe mit den stromab befindlichen Statorschaufeln oder die Wechselwirkung der Rotorschaufeln mit einer ungleichmäßigen Zuströmung als wesentliche Geräuschentstehungsmechanismen zugeordnet werden. Die in dem abgestrahlten akustischen Spektrum zusätzlich zu beobachtenden Breitbandanteile haben dagegen ihren Ursprung in den stochastischen Schwankungsbewegungen der turbulenten Strukturen in der Strömung.

Ein Ziel des Projektes ist die aktive Minderung der tonalen Geräuschentwicklung moderner Flugtriebwerke mit hohen Nebenstromverhältnissen. Dazu wird das durch die Rotor/Stator-Wechselwirkung erzeugte Schallfeld mit einem zusätzlich generierten Gegenschallfeld destruktiv überlagert. Im Gegensatz zu konventionellen Techniken, in denen Lautsprecher für die Erzeugung des Gegenschallfeldes zur Anwendung kommen, wird hier das Gegenschallfeld aeroakustisch durch die Beeinflussung der Schaufelumströmung im Blattspitzenbereich des Rotors mittels Lufteinblasung erzeugt (siehe hierzu auch Abbildung 1).

Einen Beitrag zu dem Breitbandgeräusch liefert neben den turbulenten Strukturen der Schaufelumströmung auch die stark instationäre Spaltströmung in Verbindung mit dem Blattspitzenwirbel des Rotors. Durch die Einblasung im Blattspitzenbereich des Rotors wird ein zusätzlicher Breitbandanteil durch die Interaktion der Blattspitzenströmung mit dem Luftstrahl der Einblasung erwartet. Ein weiteres Ziel der Untersuchungen ist daher, inwieweit auch das Breitbandgeräusch durch die Einblasung beeinflusst wird.

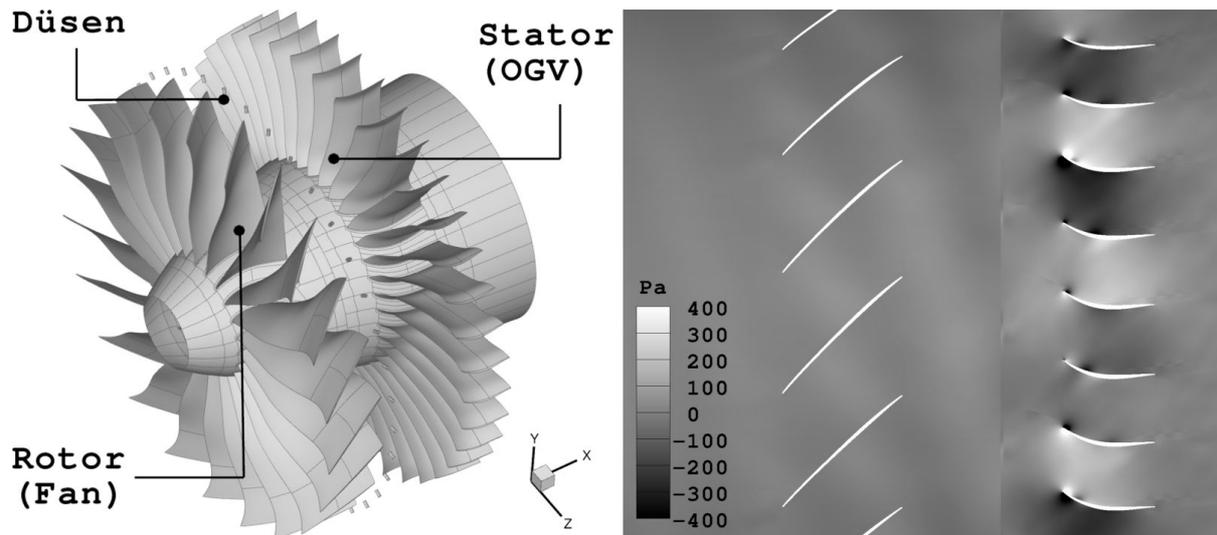


Abbildung 1: links: Konzeptdarstellung zur Beeinflussung des Fangeräusches durch Einblasen von Druckluft über Düsen am Gehäuse des Turbofantriebwerks; rechts: Momentaufnahme der Druckschwankungen nahe der Gehäusewand ohne Beeinflussung aus den Voruntersuchungen mit RANS-Simulationen. Die Ausbreitung der in der Darstellung schräg verlaufenden Druckschwankungen (akustische Moden) führen zu den dominanten Tönen im akustischen Spektrum des Fangeräusches.

Um sowohl die tonalen als auch die Breitbandkomponenten des Fangeräusches mit ausreichender Genauigkeit vorhersagen zu können, muss ein wesentlicher Anteil der turbulenten Strukturen der Strömung numerisch sehr genau abgebildet werden. Für die hier durchzuführenden numerischen Studien sind daher Untersuchungen auf der Basis von Detached-Eddy Simulationen (DES) geplant. DES ist ein hybrides Verfahren mit dem vorrangigen Ziel, die Vorteile einer effizienten Behandlung wandgebundener Strömungsbereiche durch die Lösung der Reynolds-Averaged Navier-Stokes Gleichungen (RANS) mit einer hoch auflösenden Large-Eddy Simulation (LES) in den wandfernen Strömungsbereichen zu kombinieren.

4. Steger, M., van Rennings, R., Gmelin, C., Thiele, F., Huppertz, A., Swoboda, M.: Detached-Eddy Simulation of a Highly Loaded Compressor Cascade with Laminar Separation Bubble, 9th European Conference on Turbomachinery, 2011.

Förderung

DFG-Sonderforschungsbereich 557 „Beeinflussung komplexer turbulenter Scherströmungen“

Mehr zum Thema

1. Schulz, J., Neise, W., Möser, M.: Active Control of the Blade Passage Frequency Noise Level of an Axial Fan with Aeroacoustic Sound Sources. *Noise Control Engineering Journal*, 54:33–40, 2006.
2. Spalart, P.: Detached-Eddy Simulation. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 41:181–202, 2009.
3. Steger, M., Michel, U., Ashcroft, G., Thiele, F.: Turbofan Tone Noise Reduction by Flow-Induced Unsteady Blade Forces. In: KING, R. (Herausgeber): *Active Flow Control II*, Band 108 der Reihe NNFM, Seiten 157–170. Springer, Berlin Heidelberg, 2010.

Rotierende Lärmquelle hinter Gittern

Numerische Simulation und Analyse der Interaktion von Strömung und Schall in einem stehenden Verdichterringgitter

R. van Rennings, M. Steger, K. Ehrenfried, F. Thiele, Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik, Technische Universität Berlin

Kurzgefasst

- In modernen Axialverdichtern von Turbomaschinen können strömungsmechanische Instabilitäten auftreten. Die Verdichterschaufeln werden starken Vibrationen ausgesetzt.
- Hochauflösende Simulationen einer Axialverdichterkomponente sollen Einblick in die Physik dieser Instabilität ermöglichen.
- Ziel des Projekts ist die Identifikation des Instabilitätsmechanismus und der Charakteristiken des abgestrahlten Lärms.
- Hohe numerische und statistische Genauigkeit machen speicherintensive und lange Simulationen notwendig.

Moderne Flugtriebwerke werden stetig weiterentwickelt und neue Technologien zur Reduktion von Emissionen werden untersucht. Ein Schlüsselfaktor zur Steigerung der Effizienz von Turbomaschinen – und damit der Reduktion des Treibstoffverbrauchs – ist der Verdichtereffizienzgrad. Kann dieser verbessert werden, steigt damit die Effizienz des gesamten Triebwerks.

Diese Entwicklung führt bei modernen Verdichterschaufeln zu hohen aerodynamischen Belastungen und erhöht die Gefahr des Auftretens von strömungsmechanischen Instabilitäten in Bereichen außerhalb des optimalen Betriebspunkts. Solche Instabilitäten können zum Beispiel einzelne Schaufeln des Verdichters zum Schwingen anregen, was sich mitunter negativ auf die Lebensdauer dieser auswirkt. Zusätzlich verschlechtern derartige Instabilitäten den Wirkungsgrad und erhöhen das Maß des abgestrahlten Lärms. Es ist also von großem Interesse mögliche Instabilitätsmechanismen zu verstehen, um sie vermeiden zu können.

Im Rahmen des hier beschriebenen Projekts soll der Mechanismus der Rotierenden Instabilität in Verdichterstufen untersucht werden. Das Phänomen der Rotierenden Instabilität ist seit längerem bekannt. Der Name wurde von Kameier und Neise geprägt und wird in [1] diskutiert. Bei den Messungen von Kameier und Neise wurden sowohl Druck- als auch Schallmessungen im Referenz- und rotierenden Sys-

tem durchgeführt. Die Rotierende Instabilität wurde in allen Messungen als bewegte, in Umfangsrichtung rotierende Schallquelle identifiziert. Nach dem bisherigen Stand der Forschung wird dieses Instabilitätsphänomen in engen Zusammenhang mit dem Aufplatzen des sogenannten Spaltwirbels gebracht (Schrapp [2]), welcher durch eine Ausgleichsströmung von der Druck- (konkav gekrümmt) zur Saugseite (konvex gekrümmt) einer Schaufel durch den konstruktiv bedingten Spalt zwischen Schaufel und Gehäusewand entsteht. Dieser dient der Entkopplung der Rotationsbewegungen der unterschiedlichen Bauteile.

Wie zuvor beschrieben, wird vermutet, dass der Instabilitätsmechanismus auf dem Aufplatzen des Spaltwirbels beruht. Hierbei zerfällt der Wirbelkern in kleinere turbulente Strukturen. Dieser strömungsmechanische Vorgang muss von dem Berechnungsverfahren korrekt abgebildet werden. Hierzu ist die Methode der sogenannten Delayed Detached-Eddy Simulation (DDES) in der Lage. Diese Methode beschreibt bei ausreichend hoher Gitterauflösung einen Großteil der turbulenten Schwankungsbewegungen und nur ein geringer Anteil wird modelliert. Die Methode verwendet ein Wirbelviskositäts-Modell für kleinskalige, energiearme turbulente Schwankungen, deren Eigenschaften eine einfache Modellierung zulassen. Solche Modelle sind heutzutage Standard in der Berechnung von Strömungen mit der Methode der RANS-Gleichungen (Reynolds-averaged Navier-Stokes). Des Weiteren wird bei der DDES-Methode die Turbulenz innerhalb der wandgebundenen Grenzschichten modelliert, da sich auch hier die RANS-Modelle besonders eignen.

Neben der korrekten Wiedergabe der strömungsmechanischen Eigenschaften, erfordert die untersuchte Strömung die Abbildung der erzeugten und abgestrahlten aeroakustischen Störungen. Zu diesem Zweck werden mit dem numerischen Verfahren die kompressiblen Strömungsgleichungen gelöst, welche diese beiden Eigenschaften der Strömung beschreiben.

Gegenstand der Untersuchungen im Rahmen dieses Projekts ist eine Statorkonfiguration bestehend aus 20 Verdichterschaufeln, die durch einen Spalt von der Nabe getrennt sind (vergleiche auch Abbildung 1). Die Konfiguration wurde zum Zweck der Untersuchung von Verdichterstufeninstabilitäten konstruiert und weist daher die gleichen geometrischen und strömungsmechanischen Parameter auf, wie moderne Flugtriebwerkverdichter.

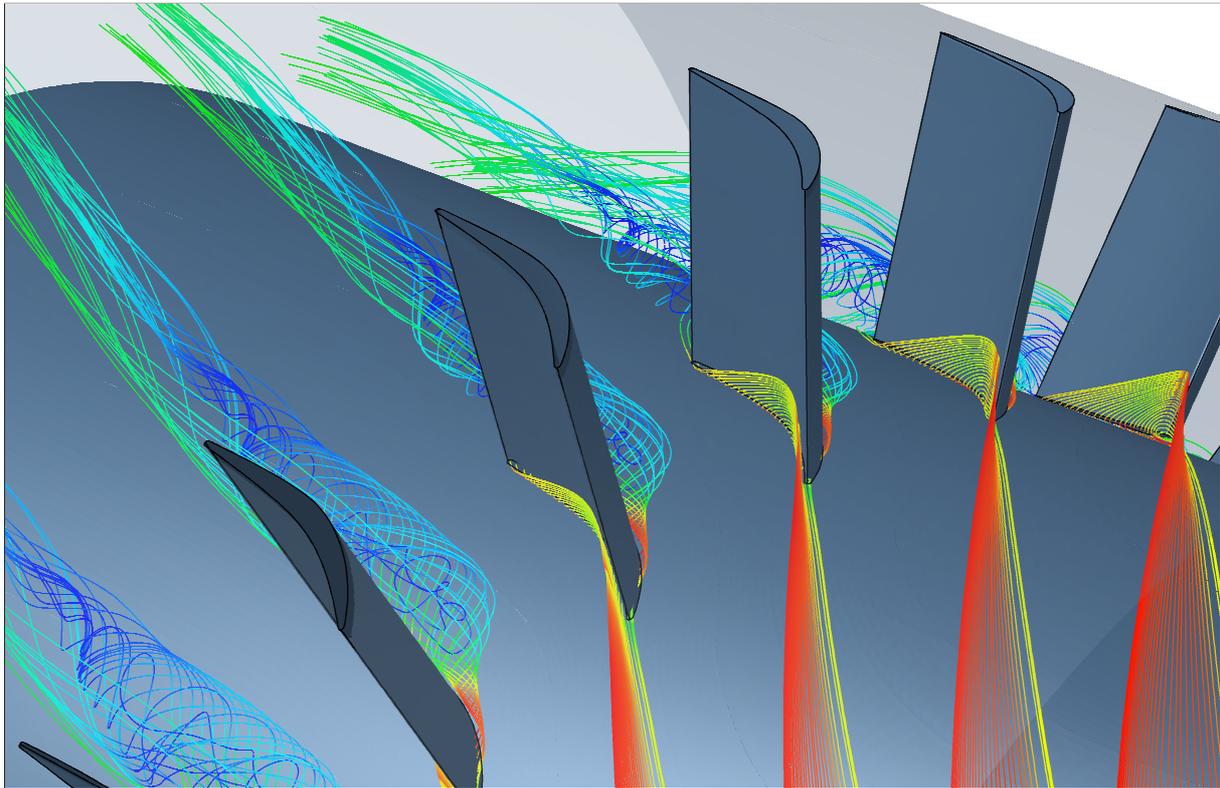


Abbildung 1: Visualisierung der zeitlich gemittelten Stromlinien durch den Nabenspalt der untersuchten Statorconfiguration. Die Strömung kommt aus Richtung des unteren Bildrandes, durchströmt das Schaufelgitter und verlässt das Simulationsgebiet an der linken oberen Bildecke. Die Stromlinien sind mit der lokalen Strömungsgeschwindigkeit eingefärbt: Rote Färbung bedeutet hohe und blaue Färbung niedrige Geschwindigkeit. Zu Beginn des Spaltwirbels ist dieser durch hohe Strömungsgeschwindigkeiten (Rote Färbung), einen geringen Wirbeldurchmesser und die helikale Struktur der Stromlinien gekennzeichnet. Das schlagartige Aufdicken des Wirbels wird mit dem Wirbelaufplatzen assoziiert und ist durch geringe Strömungsgeschwindigkeiten (türkis - blaue Färbung) und chaotisch verlaufende Stromlinien gekennzeichnet.

Solche Schaufelringe werden auch als Ringgitter bezeichnet.

Um den Einfluss des Abstraktionsniveaus der Geometrie auf das aeroakustische Phänomen zu untersuchen, werden Simulationen von drei verschiedenen geometrischen Modellen des Statorrings durchgeführt (1, 5 und 20 Schaufeln). Der volle Statorring mit 20 Schaufel stellt die vollständige Geometrie dar und ist numerisch am aufwändigsten. Für gesicherte Aussagen über den Mechanismus der Instabilität muss eine ausreichende statistische Konvergenz gewährleistet sein, was durch eine lange Simulationsdauer erreicht wird.

Der aus den geplanten Untersuchungen resultierende Rechenzeit- und Arbeitsspeicherbedarf kann heutzutage nur von einer massiv parallelen Rechnerarchitektur, wie zum Beispiel der des HLRN-II-Systems, zur Verfügung gestellt werden.

Mehr zum Thema

1. Kameier, F. und Neise, W.: Rotating blade flow instability as a source of noise in axial turbomachines. *Journal of Sound and Vibration*, Ausgabe 203, Nummer 5, Seiten 833–853, 1997.
2. Schrapp, H.: Experimentelle Untersuchungen zum Aufplatzen des Spaltwirbels in Axialverdichtern. Dissertation, Technische Universität Braunschweig, ZLR-Forschungsbericht 2008-09, 2008.

Förderung

Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

Economically Improved Road Vehicles

Numerical Simulation of the Flow around a Generic Vehicle Using Active Flow Control

S. Eichinger, F. Thiele, E. Wassen, Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik, Technische Universität Berlin

Abstract

- The road transport of passengers and cargo uses valuable fossil fuel and has a large contribution to greenhouse gas emissions.
- Reducing the aerodynamic drag of vehicles is one possible way to decrease these negative effects.
- In the case of ground vehicles the aerodynamic drag is mainly pressure drag, which is caused by flow separation at the rear end of the vehicle.
- With the help of active flow control devices (e.g. blowing slits) the flow around the vehicle can be changed, so that the evolving pressure on the surfaces results a lower aerodynamic drag.
- Within this project the authors aim to develop such a control strategy, using high-performance numerical simulation of the flow.

The aerodynamic drag of ground vehicles (e.g. trucks, busses or passenger cars) consists of two main components: the friction drag and the pressure drag. As the vehicle moves relative to the surrounding air, a friction force is generated between the gas and the solid body surfaces due to the effect of viscosity. Because of the bluff shape of most vehicles the flow is not able to follow the body contour at the rear end due to the effect of momentum. Here the flow separates, resulting in a pressure difference between the front and the rear parts which makes up the pressure drag. The separated regions are dominated by complex three-dimensional and time-dependent vortices. The pressure distribution on the body surfaces are also dependent on these structures. The drag force due to pressure is significantly larger than the friction force, and its transient character can additionally cause stability and handling problems. The aim of the project is to develop a method to influence the separated flow around a generalized vehicle in such a way that the pressure drag is reduced. Consequently, the overall aerodynamic drag decreases, and the stability and the handling improves as well.

For the numerical flow simulation the Large-Eddy-Simulation (LES) technique is used. The vehicle model is based on a form which is able to emulate the main characteristics of a real vehicle, and

it was introduced by Ahmed et.al. [1] and is called Ahmed body. The model has rounded edges at the front part and a vertical rear end, similar to vans, trucks or busses. For this configuration 85% of the aerodynamic drag is pressure-induced.

With the help of active flow control the aerodynamic drag can be reduced. The developed method uses steady blowing of air along the edges of the rear-end surface through small slits. As a first step, a baseline configuration without any actuation was simulated. Thereafter, the direction and the strength of the blowing was varied. A parameter study was performed, and a maximum drag reduction of 18% was achieved (for more details see: [2]). To ensure that the required energy input to realize the blowing is not higher than the energy gained due to the reduced drag, an efficiency check is necessary. It was found that the best energy efficiency is achieved at a lower blowing speed than the one that gives the highest drag reduction. The energy input decreases the benefit from the drag reduction, but still a net power gain of 10% was reached.

In the next step instead of stationary blowing the authors implemented a robust closed-loop controller into the method. This controller algorithm computes an instantaneous value of the actuation velocity, so that it is adjusted to the current flow conditions in order to reach a prescribed drag reduction value. The closed loop control method was shown to work robustly even in the case of actuator failure, when, for instance, a drop of pressure occurs in the actuator device during operation. An instantaneous flow situation on the road is never idealistic. For example, in many cases there is at least some cross-wind. It is important to check how the active flow control method reacts in such conditions. Two setups of the above mentioned parameter study were simulated in cross-wind conditions. It was found that at $\theta = 45^\circ$ and at a blowing speed equal to the inflow velocity the aerodynamic drag reduction was around 5%, while the net power gain was 4%. With stronger actuation, for example 2.0 times the inflow velocity, the drag reduction is 9%, but the net power gain drops to 1%.

Since the wake of the vehicle is not symmetric in this case, more efficient flow control can be achieved with asymmetrically distributed blowing. This is done by using different blowing angles and different blowing speeds at the different edges of the rear end. Currently the project deals with this parameter study. Because of the relatively big pa-

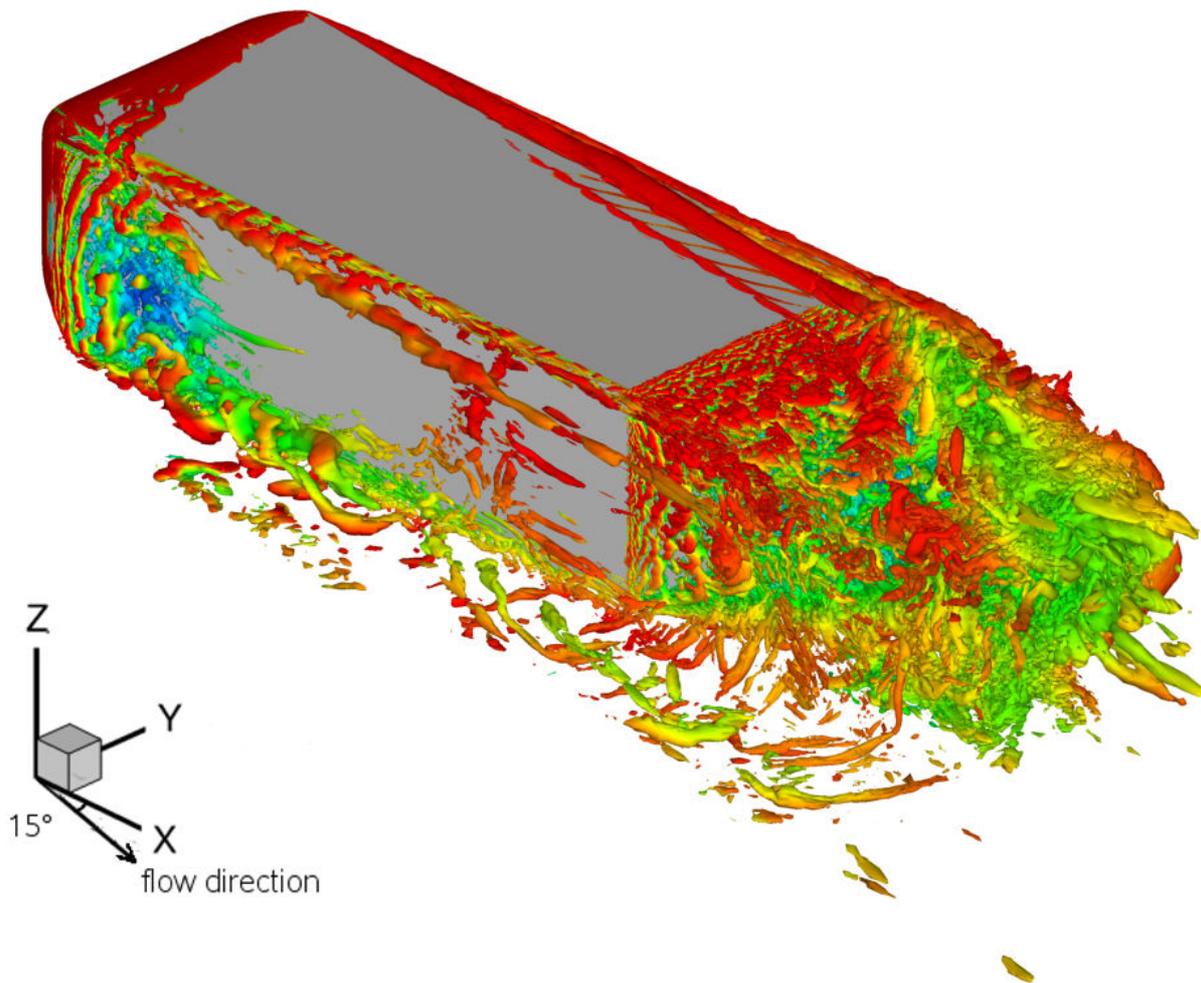


Figure 1: Visualization of vortex structures around the vehicle model in cross-wind conditions (vortices are colored with the streamwise velocity: red = high velocity, blue = low velocity).

parameter space it requires a large number of simulation runs. Thus the authors considered a statistically designed set of simulations based on orthogonal arrays. In such a way the number of required simulations can be drastically reduced. The influence of each parameter can be determined and at the end an optimum control setup can be concluded. In the future the authors would like to develop, similarly to the above mentioned robust closed-loop controller, a new method, which will be able to track the prescribed drag reduction with an asymmetric (more than one output parameter) actuation setup successfully, also in case of cross-wind conditions.

A visualization of the LES simulation result is shown in fig. 1 for cross-wind conditions without actuation. In the figure vortex structures are shown that have been colored by the local velocity. The snapshot indicates the level of complexity of this flow. This simulation requires approximately 72

hours of wall clock time on 270 processor cores of the HLRN system in order to reach an adequate level of time averaging.

More Information

1. Ahmed, S.R., Ramm, G. and Falin, G., Some salient features of the time-averaged ground vehicle wake, SAE Technical Paper Series, No. 840300, 1984.
2. Eichinger, S., Thiele, F. and Wassen, E., LES of active separation control on bluff bodies by steady blowing, Proceedings of ASME 2010 3rd Joint US-European Engineering Summer Meeting, August 2-4, 2010, Montreal, Quebec, Canada, FEDSM-ICNMM2010-30462.

Funding

German Research Foundation (DFG)

Hai-Schuppen verbessern, um Energie zu sparen

Untersuchungen zur Reduzierung des turbulenten Widerstands durch wellenförmige Lamellen

F. Kramer, E. Wassen, F. Thiele, Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik, Technische Universität Berlin

Kurzgefasst

- Die Struktur der Haifischhaut reduziert den Strömungswiderstand. Aktuelle technische Anwendungen dieses Prinzips erreichen zwischen 5 und 10%.
- Eine wellenförmige Gestaltung der Oberflächenstruktur verbessert die Effektivität.
- Die Wellenform soll optimiert werden, um die Widerstandsreduktion zu vergrößern.
- Der Energieverbrauch soll gesenkt und die wirtschaftliche Attraktivität erhöht werden.
- Zur numerischen Untersuchung ist nur die Direkte Numerische Simulationen geeignet.

Der durch die Strömung verursachte Widerstand eines Körpers oder Geräts setzt sich im Allgemeinen aus zwei Anteilen zusammen, dem Druck- und dem Reibungswiderstand. Bei modernen Verkehrsflugzeugen trägt z.B. die Wandreibung bis zu 50% zum Gesamtwiderstand und somit zum Energieverbrauch bei. Bei langen Rohrleitungen wie Pipelines ist die Wandreibung für nahezu 100% des Widerstands und des Energieverbrauchs verantwortlich. Da nahezu alle technisch relevanten Strömungen turbulent sind, kann eine signifikante Verringerung der Verluste durch Wandreibung turbulenter Strömungen große Auswirkungen auf den Energieverbrauch und somit u.a. auf den Ausstoß klimaschädlicher Abgase haben.

Es ist seit langem bekannt, dass die Oberflächenstruktur der Haut schnell schwimmender Haie einen widerstandsreduzierenden Effekt hat. Die Haut ist mit U-förmigen Rillen versehen, die in Längsrichtung - also in Hauptströmungsrichtung - ausgerichtet sind. Durch diese Oberflächenstruktur werden Querbewegungen der Strömung behindert, die durch wandnahe, für turbulente Strömungen typische Wirbel verursacht werden. Infolgedessen werden die Wirbel geschwächt und somit der ständige Strömungsaustausch mit der Hauptströmung reduziert. Letzterer ist verantwortlich für den Transport von Fluid mit höherer Geschwindigkeit zur Wand hin, was zu einem erhöhten Reibungswiderstand einer turbulenten gegenüber einer laminaren Strömung führt. Die Schwächung der wand-

nahen Wirbelstrukturen durch die Rillen hat daher eine Verringerung des Widerstands zur Folge. Dieses Prinzip der Haifischhaut wurde in der Vergangenheit in Laborversuchen sowie in praktischen Anwendungen in Form so genannter Riblet-Oberflächen in die Technik übertragen. In Laborversuchen konnte dabei eine Reduzierung der Wandschubspannung um bis zu 10% erzielt werden. Die maximale Widerstandsreduzierung kann jedoch nur erreicht werden, wenn die Anströmung in Richtung der Orientierung der Riblets erfolgt. Bei Fehlanströmungswinkeln von mehr als 15° nimmt der Effekt stark ab und ab 25° werden zusätzliche Verluste und somit ein höherer Widerstand erzeugt.

Eine ganz anderer Mechanismus erreicht durch aktive Querbewegungen einer glatten Wand eine Verringerung des Widerstandes um bis zu 50%. Da die aktive Bewegung viel Energie benötigt, ist diese Technik für sich stehend zur Zeit nicht geeignet, um tatsächlich verwendet zu werden.

Es ist das Ziel des Projektes, die Vorteile der Rillenoberfläche und der aktiven Querbewegung gezielt auszunutzen und dadurch zu einem praktikablen, passiv arbeitenden Ansatz zu gelangen, der eine deutlich höhere Widerstandsreduzierung erzielt als konventionelle Rillenoberflächen. Dies soll mithilfe von in Strömungsrichtung wellenförmig gestalteten Rillen geschehen, wie sie auch auf dem Bild auf der nächsten Seite dargestellt sind. Da die wandnahe Strömung dieser Wellenstruktur folgt, werden ihr auf passive Weise alternierende Querbewegungen aufgeprägt, ähnlich wie bei der aktiv bewegten Wand. Es ist bisher nicht bekannt, welche Wellenform und welcher Parameterbereich für die Wellenlänge und die Amplitude besonders effektiv den Widerstand verringern. Dies soll in diesem Projekt systematisch untersucht werden. Der Querschnitt der Riblets ist dabei trapezförmig und auf dem Bild im unteren Bereich gut zu sehen. Zusätzlich zu den Wellenparametern ist die Sensitivität gegenüber Queranströmung ein für die Anwendung wesentlicher Punkt, da nicht immer eine perfekt ausgerichtete Anströmung gewährleistet werden kann. Es ist zu erwarten, dass die Wellenform einen geringeren Abfall der Wirksamkeit aufweisen wird als gerade Rillen, da der lokale Anströmungswinkel von vorn herein nicht konstant ist.

Für die Simulationen müssen die vorhandenen turbulenten Strukturen der Strömung zeitlich und räumlich vollständig aufgelöst werden, da gerade im riblet- und wandnahen Bereich der Ein-

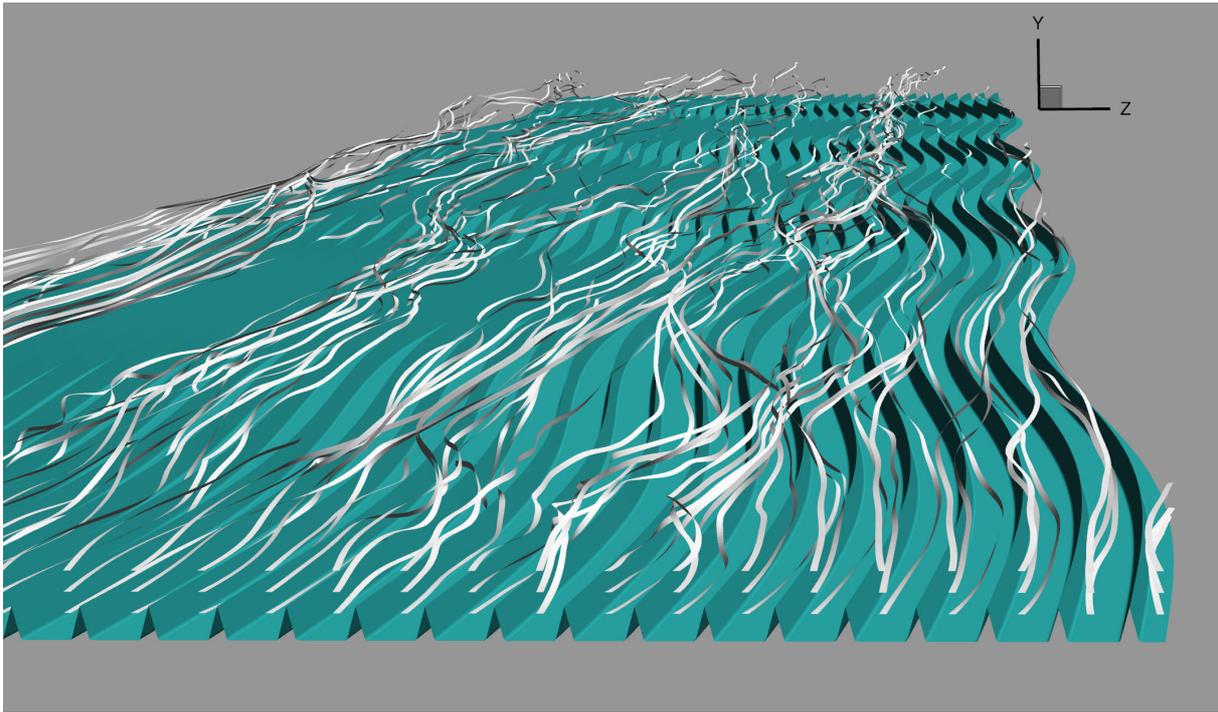


Abbildung 1: Wellenförmige Riblet-Oberfläche mit Stromlinien. Strömungsrichtung ist von vorne nach hinten. Die Stromlinien folgen anfangs den Rillen, werden durch Wirbel weiter in die Strömung getragen und bilden die für turbulente Strukturen typische Bündelung.

fluss von üblicherweise verwendeten Turbulenzmodellen ausgeschlossen werden muss. Daher eignet sich für die Simulation nur die Direkte Numerische Simulation, die gleichzeitig enorm hohe Anforderungen an Rechenleistung und Rechenzeit stellt. Durch sie ist es aber auch möglich, Einblick in kleinste Strömungsvorgänge zu erlangen, die sonst nur sehr schwer zu beobachten sind. Die Simulationen in diesem Projekt werden durch Experimente des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR), Abteilung Triebwerksakustik, begleitet. Ein besonderer Vorteil der Zusammenarbeit zwischen Experiment und Simulation ist, dass sich beide Ansätze in ihren Stärken und Schwächen ergänzen. Im Experiment lässt sich z.B. eine Erhöhung der Strömungsgeschwindigkeit einfach realisieren, während in der Direkten Numerischen Simulation die notwendige Gitterauflösung und damit der Rechenaufwand mit der Strömungsgeschwindigkeit übermäßig ansteigt. Andererseits hat die numerische Simulation den Vorteil, dass die sehr kleinskaligen, wandnahen physikalischen Vorgänge mit hoher zeitlicher und räumlicher Auflösung beobachtet werden können und so die lokale Wirkung der Riblet-Strukturen sehr genau beurteilt werden kann. Außerdem erlaubt sie, dass sehr viel größere Riblet-Oberflächen simuliert werden

können. Während im Experiment die maximale Größe der Versuchsfläche spätestens durch die Größe des Strömungskanals beschränkt ist, kann die Simulation unendlich große Flächen berücksichtigen. So können störende Effekte durch die Ränder der Oberfläche ausgeschlossen und der Einfluss der Riblet-Oberfläche unmittelbar untersucht werden.

Mehr zum Thema

1. Kramer, F.; Grüneberger, R.; Thiele, F.; Wassen, E.; Hage, W.; Meyer, R.: Wavy riblets for turbulent drag reduction. Proceedings of 5th AIAA Flow Control Conference, Chicago, AIAA 2010-4583, 2010
2. Wassen, E.; Kramer, F.; Thiele, F.; Grüneberger, R.; Hage, W.; Meyer, R.: Turbulent drag reduction by oscillating riblets. Proceedings of 4th AIAA Flow Control Conference, AIAA-2008-3771, 2008

Förderung

DFG-Schwerpunktprogramm 1207 "Strömungsbeflussung in der Natur und Technik"

A matter of disorder

Oxidized silicon nanowires as biomolecular sensors: *ab initio* structural and electronic analysis

L. Colombi Ciacchi, Hybrid Materials Interfaces Group, Faculty of Production Engineering and Bremen Center for Computational Materials Science, University of Bremen

Abstract

- Silicon nanowires are widely used as active functional elements in advanced electronic devices, most notably in biological sensors.
- While surface oxidation of the wires occurs upon exposure to a wet environment, theoretical studies are often limited to ideally crystalline, H-terminated wire models.
- We are performing accurate computational studies of the electronic and transport properties of natively oxidized, ultrathin silicon nanowires including dopant elements such as boron and phosphorous.
- We found that their conductance is determined by an unexpected interplay of effects due to oxidation-induced structural distortions and electronegative Si/SiO_x interfaces.

One of the major goals of the semiconductor industry is to continue scaling down the size of electronic components and place more and more transistors in a single silicon chip. This is necessary to follow the famous Moore's Law, which predicts the evolution of computer speed over the years based on device miniaturization. However, there are intrinsic limits to the device sizes reached by purely lithographic processes, or other so-called "top-down" technologies. These are both connected with exponentially rising costs and with physical laws (e.g. when entering a quantum-tunneling regime), and motivate the scientific and technological communities to search for novel devices and novel fabrication techniques.

Starting from the other end of the scale, several types of "bottom-up" approaches have been envisaged, all based on the controlled assembly of nano-scale building blocks into well-defined functional devices [1]. Silicon nanowires (SiNWs) are one of the most promising nanostructures developed so far and are becoming fundamental components in a new generation of mixed top-down and bottom-up electronic devices with important applications e.g. as sensors for biological molecules [2].

Due to their compatibility with silicon based technology, silicon nanowires are extensively studied

and numerous experiments have already characterized some of their structural and electronic properties [3]. Currently synthesized SiNWs present surfaces passivated either by hydrogen atoms or by a thin native oxide layer, and their conduction properties are modified by choosing an appropriate type and concentration of foreign atoms called dopants, usually P or B, which carry an additional electron or hole (the carriers for electric current).

Several theoretical studies have been undertaken to characterize the electronic properties of different SiNWs structures. However, the lack of a realistic model for Si/SiO₂ core-shell structures explains why most studies to date have focused on the properties of either bare, unpassivated wires or of wires whose surfaces are saturated with hydrogen atoms. This is the origin of a gap between the theoretical predictions made so far and the experimental reality, where the importance of considering the effects of surface oxidation is felt in numerous applications. In the typical cases of biological detection, the wet environment in which the devices operate leads to the formation of an ultrathin hydrated oxide layer. In electronic devices such as FinFETs the conducting wires are embedded in a thicker insulation layer of silicon oxide.

In the first part of our project at the HLRN, we are currently studying the intrinsic conductance of B and P doped SiNWs covered with a hydroxylated native oxide layer. The realistic modelling of a Si/SiO_x core-shell wire has been made possible by extensive previous work, entirely based on atomic-scale simulations performed on massively parallel computers using highly optimized quantum mechanical computer codes (see Ref. [4] and references therein). Starting from an oxidised Si(001) flat surface, we have fabricated a natively oxidised nanowire model structure by means of Molecular Dynamics simulations both at the classical and at the quantum mechanical *ab initio* level.

A key feature of the resulting structure is the intrinsic *disorder* of the Si core, naturally induced by the oxidation process. As a first interesting finding, we could prove that the electronic states mostly responsible for the conduction of such wires are located at the interface between the oxide shell and the silicon core (see Figure 1). Furthermore, our comprehensive total energy calculations have revealed the most stable sites for B and P dopant atoms. Contrary to our expectations, both types of atoms prefer to remain buried in the Si core rather than segregate near the oxide layer. This is inter-

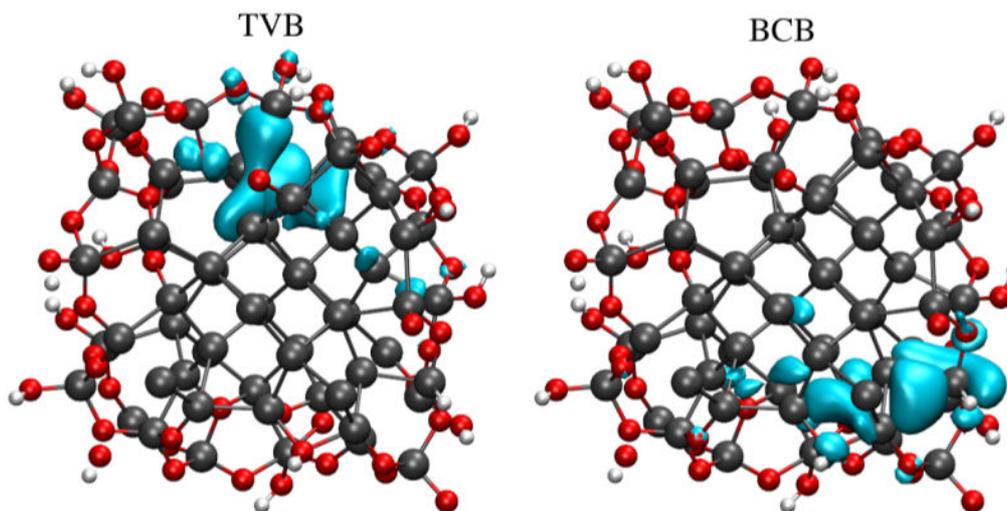


Figure 1: Cross-section of an undoped, natively oxidized Si nanowire showing that the most probable localization regions of hole (top of the valence band, TVB) and electron (bottom of the conduction band, BCB) carriers are at the Si/SiO_x interface.

esting, since the carriers of electronic current, provided by the dopants, face now two difficulties in their transport path: the disorder in the silicon core and the presence of an electronegative oxide shell. So, which of these effects will have the most prominent effect on the conductivity of the structures?

To answer this question, we have performed large-scale quantum mechanical calculations of the SiNW transport properties on the parallel supercomputers at the HLRN. While most previous studies of non-oxidized wires relied on more or less approximated approaches, our calculations are based on Density Functional Theory (DFT), which is a computationally very expensive approach for transport calculations even with simple systems. However, we realized that this level of precision is needed for our work, covering subtle effects such as dopant and structural backscattering, and relying on the precise determination of the transmission channels for conductance.

Our results achieved so far [5] clearly show that the conductance of the oxidized wires is decreased with respect to the case of ideally crystalline, H-terminated wires, and the main reason for this decrease is the oxidation-induced disorder. The overall conductance decrease is very similar for B and P dopants, despite the fact that the transmission of P doped wires is less influenced by structural disorder in the absence of an oxide shell. If an oxide shell is present, though, it attracts the extra electrons carried by the P atoms and changes the transmission channel from a localized (less sensitive to disorder) to a delocalized form.

Future work will be devoted to understanding the mechanisms of detection of biomolecules with such oxidized SiNWs. This will require further large-scale quantum transport calculations and thus call for extended use of the HLRN computational resources.

More Information

1. W. Lu, C. M. Lieber, "Nanoelectronics from the bottom up", *Nature Mater.* **6**, 841-850 (2007).
2. E. Stern et al., "A nanoelectronic enzyme-linked immunosorbent assay for detection of proteins in physiological solutions", *Small* **6**, 232-238 (2010).
3. V. Schmidt, J. V. Wittemann, U. Gösele, "Growth, thermodynamics, and electrical properties of silicon nanowires", *Chem. Rev.*, **110**, 361-388 (2010).
4. L. Colombi Ciacchi, D. J. Cole, M. C. Payne, P. Gumbsch, "Stress-driven oxidation chemistry of wet silicon surfaces", *J. Phys. Chem. C Letters* **112**, 12077-12080 (2008).
5. M. Koleini, L. Colombi Ciacchi, M.-V. Fernández-Serra, "Electronic transport in natively oxidized silicon nanowires", submitted to *ACS Nano* (2011).

Funding

University of Bremen; German Research Foundation (DFG)

Design neuer Metalloxyd-Halbleitermaterialien zur Wasserstofferzeugung durch Sonnenlicht (Photoelektrolyse)

Computational Combinatorial Materials Science study to optimize the band gap for metal-oxide based materials for their usage in photoelectrolysis cells

L. Mädler, T. Heine, Universität Bremen und Jacobs University Bremen

Kurzgefasst

- Es soll ein Metalloxyd-Halbleiter aus 2–5 Übergangsmetallen gefunden werden, der sich optimal für die Spaltung von Wasser mittels Sonnenlicht eignet, d.h. er muss wasserstabil sein, eine Bandlücke von ca. 1,5 eV haben, und geeignete Elektrodenpotenziale aufweisen.
- Durch Kombinatorik werden verschiedene Übergangsmetalle des Periodensystems in unterschiedlichen Konzentrationen für die Mischoxyd-Halbleiter ausgewählt. Mit Hilfe der Quantenmechanik (Dichtefunktionaltheorie) werden Struktur, Stabilität und Bandstruktur der Materialien berechnet.
- Rechenzeitintensive Simulationen zur Struktur und Bandstruktur der Materialien werden z.T. am HLRN auf parallelen Hochleistungscomputersystemen durchgeführt.
- Optimale Halbleitersysteme werden ausgewählt und mit experimentellen Techniken weiterverfolgt.

Unter allen erneuerbaren Alternativen zu fossilen Brennstoffen als Energiequelle erscheint die Wasserspaltung durch Licht (Photodissoziation) die vielversprechendste zu sein, denn sie nutzt die verlässlichste Energiequelle des Planeten – das Sonnenlicht, um Wasserstoff und Sauerstoff als Energieträger aus Wasser zu erzeugen. Sauerstoff kann bei der Wasserspaltung an die Atmosphäre abgegeben, und bei der Verbrennung des Wasserstoffs wieder aus der Atmosphäre entnommen werden, so dass ein geschlossener Kreislauf ohne Einfluss auf die Umwelt möglich ist. Speicherung und Transport des entstehenden Wasserstoffs sind immer noch problematisch, neue Forschungsergebnisse legen den Schluss nahe, dass in naher Zukunft zuverlässige Speichermedien zur Verfügung stehen werden.

Eine Photoelektrolysezelle ist ein Gerät, das Sonnenlicht absorbiert und mit Hilfe dessen Energie Wasserstoff (und Sauerstoff) durch Wasserspaltung produziert. Das prinzipielle Konzept wurde von Fujishima und Honda anhand einer Titanoxid-(Rutil)-Elektrode demonstriert. Aller-

dings kann dieses Material aufgrund der grossen Bandlücke von ca. 3 eV nur Licht im harten Ultraviolettbereich absorbieren und ist daher nicht als Material für Wasser-Photoelektrolysezellen geeignet. Verschiedene III-V-Halbleiter, beispielsweise CdS, haben elektronische Eigenschaften, die für die Wasserspaltung geeignet sind, müssen aber aufgrund ihrer Instabilität (Wasserlöslichkeit) ausgeschlossen werden. Woodhouse und Parkinson schlugen 2009 vor, das Problem mit einem kombinatorischen Ansatz zu untersuchen [1]. Sie wollen mit Hilfe der Robotik eine Vielzahl von binären bis zu tertiären Metalloxyd-Mischhalbleitern herstellen und untersuchen. Dieser interessante Ansatz beinhaltet jedoch ein Problem: die systematische, automatisierte Synthese von homogenen Metalloxydverbindungen mit verschiedenen Metallen ist nur selten möglich, da die reinen Oxyde in der Regel unterschiedliche Gitterstrukturen aufweisen. Es ist sehr aufwändig, die automatisch produzierten Materialien auf ihre Homogenität zu untersuchen.

In diesem Projekt soll daher ein zweistufiger Ansatz gewählt werden: Im ersten Schritt werden Metallmischoxydmaterialien unterschiedlicher Zusammensetzung mit Hilfe der Quantenmechanik untersucht. Die Materialien, die sich als besonders geeignet für die hier anvisierte Anwendung erweisen, werden danach im zweiten Schritt gezielt experimentell untersucht. Dabei wird die Synthese mit Hilfe der Flammsspray-Elektrolyse versucht, und das Produkt anschliessend mit verschiedenen Charakterisierungsmethoden, einschliesslich der Transmissionselektronenmikroskopie (TEM) und der Elektronenenergie-Verlustspektroskopie (EELS), untersucht. Ein Abgleich der experimentellen mit den zuvor berechneten Daten ist wesentlicher Teil der Qualitätssicherung der synthetisierten Materialien.

Zu Beginn dieses Projekts im November 2010 wurde in einer Pilotstudie Eisen-dotiertes Zinkoxyd ($\text{Fe}_x\text{Zn}_{1-x}\text{O}$, $x = 0,0 \dots 0,125$) untersucht. 2010 konnte experimentell gezeigt werden, dass ein Material aus bis zu 10 % FeO in ZnO synthetisiert werden kann. Die Gitterstruktur des Materials entspricht der des ZnO, und verschiedene Analyseverfahren stellten sicher, dass das FeO homogen in den produzierten Nanokristallen verteilt ist (siehe Abb. 1 und die weiterführende Literatur [2]).

Wir untersuchten Fe-dotiertes ZnO mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie (DFT) und konnten die ex-

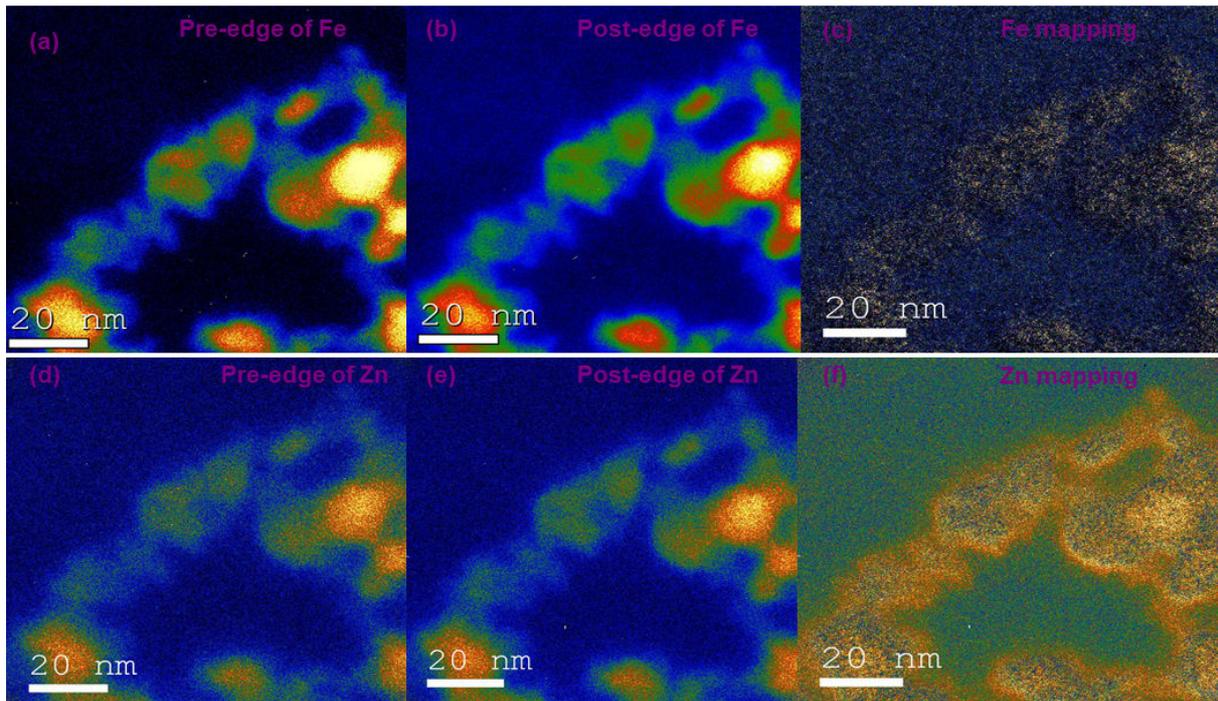


Abbildung 1: Ein prototypischer Misch-Metalloxyd-Halbleiter aus 90% ZnO und 10% FeO: Das Mapping charakteristischer Signale der Übergangsmetalle im TEM zeigt, dass die Fe-Atome homogen im ZnO-Trägermaterial verteilt sind (Grafik aus [2]).

perimentellen Ergebnisse sehr genau reproduzieren. Die Ergebnisse der DFT-Berechnungen lieferten die gleiche Gitterstruktur wie die TEM-Experimente, die Bindungsenergie des Materials deutet auf eine homogene Verteilung von Fe im ZnO hin, und die EELS-Berechnungen unterstützen dieses Ergebnis. Darüberhinaus zeigten unsere Berechnungen, dass die elektronischen Eigenschaften der reinen Systeme sehr gut reproduziert werden konnten. Im Fe-dotierten ZnO verringert sich die Bandlücke von 3,59 eV (Experiment: 3,4 eV) um bis zu ca. 1,5 eV. Es ist bemerkenswert, dass diese Änderung nichtlinear ist und daher nicht a priori aus den Kennwerten der Reinformaterialien abgeschätzt werden kann, jedoch mit Hilfe der quantenmechanischen Festkörpertheorie erklärbar ist. Dieses erste Ergebnis weist auf eine gute Erfolgsaussicht des Projekts, und auf die Notwendigkeit des gemeinsamen experimentell-theoretischen Ansatzes hin.

Mehr zum Thema

1. M. Woodhouse and B. A. Parkinson, 2009: Combinatorial approaches for the identification and optimization of oxide semiconductors for efficient solar photoelectrolysis. *Chem. Soc. Rev.* 38, 197-210.
2. S. George, S. Pokhrel, T. Xia, B. Gilbert, Z. X. Ji, M. Schowalter, A. Rosenauer, R. Damoiseaux, K. A. Bradley, L. Mädler, A. E. Nel, 2010: Use of a Rapid Cytotoxicity Screening Approach To Engineer a Safer Zinc Oxide Nanoparticle through Iron Doping. *ACS Nano* 4, 15-29. doi:10.1021/nn901503q

Förderung

Europäischer Forschungsrat (ERC), Research Executive Agency (REA)

Rise and Roll

3D Modeling of Hydrothermal Plumes

M. Walter, Y. Tao, Universität Bremen; Jacobs University

Abstract

- Hydrothermal plumes along mid-ocean ridges are crucial mechanisms by which Earth's crust transports heat and chemical components into the ocean.
- Data obtained by direct measurement of the plume is not sufficient to answer a slew of crucial questions so we ask help from numerical model.
- We developed a 3D time-dependent model to study the relation between plume heat flux and rising height and to investigate their 3D velocity profiles.
- The model has provided results with good agreement with other models and measurements, it also shows great potential in future study.

Hot deep-sea springs along mid-ocean ridges, so-called hydrothermal vents, are crucial for transporting heat and chemical components from inside the Earth's crust into the ocean. Data obtained by direct measurement are not sufficient to answer many crucial questions regarding the physical dynamics of the plumes of such hydrothermal vents. To study the spatial and temporal dynamics of such hydrothermal plumes we have developed a time-dependent fully three-dimensional model, which explores the relation between the plume's heat flux, rising height, and rising velocity for realistic environment configurations.

Hydrothermal fluids are generated, when seawater comes into contact with deeper layers of the Earth's crust at areas, where tectonic plates are moving apart, the so-called sea-floor spreading axes. There the water is charged with heat and various chemical substances and is subsequently re-injected into the ocean. When this mineral-enriched water, which can reach temperatures as high as 400°C , is ejected from the ocean floor into the near-freezing sea water, the minerals precipitate and form a plume of colored, mostly black, fluid (see Fig.1, left panel). This black plume is the reason why such hydrothermal vents are often called "black smokers".

The physical dynamics of such plumes are characterized by the shear flows between the hot buoyant rising fluid and the cold ambient water column of the surrounding ocean, which produce a lot of turbulence such as vortices and eddies. These

turbulence phenomena facilitate the mixing of the cold ambient water with the hot fluid, resulting in a continuous dilution of the original vent fluid. As the plume cools down while it rises, the buoyancy decreases until a neutral layer is reached, where the ambient water has the same density as the plume.

The knowledge about heat and material flux output from hydrothermal vents, which provide quite a significant portion of the overall global flux, could be significantly improved if the output and flux mechanisms of individual vents were better understood. The buoyancy-driven turbulence and its resulting mixing effects, however, have always been the main challenge in understanding these processes. Most of the current estimations of hydrothermal vent output are based on very simple one-dimensional model developed half a century before [1]. These approaches have distinct limitations as they cannot handle realistic environmental factors such as background current and irregular sea-floor topography.

With our time-dependent numerical 3D model we aim at solving these kinds of problems. As a first test we configured our model for simple environments such as those used in the one-dimensional model [1] and compared the results for the position of the layer of neutral buoyancy calculated by both models. The results were in very good agreement, which proves that our model in general correctly describes the dominant fluid dynamic processes and therefore is ready to be applied to more complex and thus realistic environment configurations.

The technical progress of recent years in exploring hydrothermal plumes, such as sonars that record acoustic 3D images or even Doppler velocity profiles of plumes, allow for much more detailed information about the inside plume structure [2]. Before this new technology was available, this was nearly impossible, because optical cameras were obstructed by the particle clouds and therefore could only observe the outer plume boundary. With our model we can now calculate the fluid velocity and plume diameter from such acoustic measurements. By combining those data with information obtained by chemical samples of the hydrothermal fluid itself and other physical in-situ measurements, we can calculate the heat and chemical flux of hydrothermal plumes semi-directly and thus substantially reduce the margin of error compared to other models.

In summary, our time-dependent, fully three-dimensional model of hydrothermal plumes allows

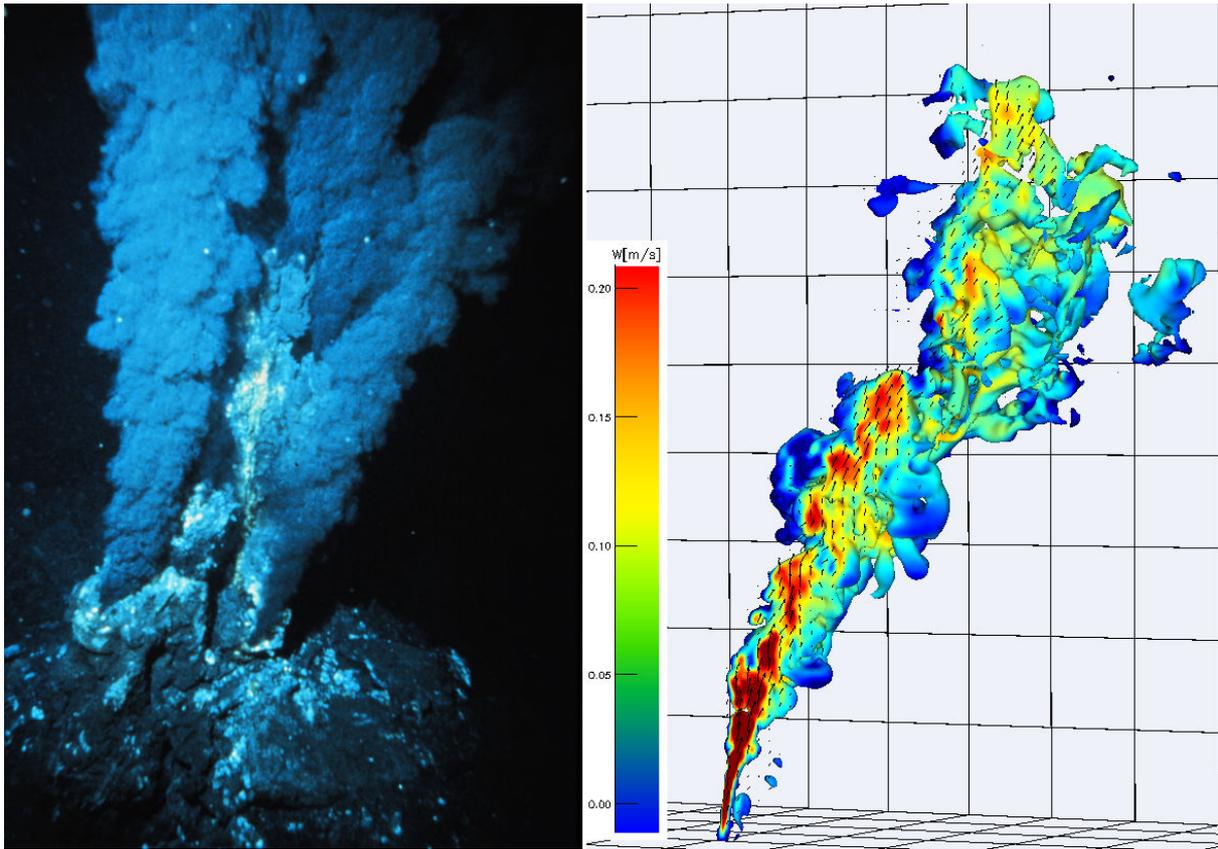


Figure 1: Left: Hydrothermal plume photo taken by research submarine (by the National Oceanic and Atmospheric Administration NOAA, Washington, DC). Right: A 3D plume simulation of our model; the color code represents vertical velocity while the arrows show both magnitude and direction of local velocity.

us to combine many different kinds of observations and data, which allows us a quite detailed description of its fluid and material plume dynamics that otherwise cannot be obtained by direct observations.

More Information

1. Morton, B.R. and G.I. Taylor and J.S. Turner, 1956: Turbulent gravitational convection from maintained and instantaneous sources. Proc. R. Soc. London, Ser.A., 243, 1-23.
2. Jackson, D.R., C.D. Jones, P.A. Rona and K.G. Bemis, 2003, A method for Doppler acoustic measurement of black smoker flow fields, G-Cubed, 4, 1095-1107.

Funding

This project is funded by Universität Bremen and Jacobs University.

Turbulenzen beim Wärmeaustausch

Thermalgetriebene Vermischung turbulenter Konvektionsströmungen in einem geschlossenen Container

R. Groll, C. Zimmermann, Zentrum für angewandte Raumfahrttechnologie und Mikrogravitation, Universität Bremen

Kurzgefasst

- Freie, turbulente Konvektionen sind thermal getriebene Strömungen, bei welchen aufgrund hoher lokaler Temperaturgradienten und daraus resultierender Dichteunterschiede Turbulenzen in Form von Wirbeln entstehen.
- In der Meteorologie treten Konvektionsströmungen z.B. als Tornados oder großskalige Wirbelstürme auf, welche sich aufgrund unterschiedlich durch die Sonneneinstrahlung erhitzter Luftschichten bilden.
- Ebenfalls werden sie in technischen Bereichen z.B. zur Kühlung von technischen Komponenten eingesetzt, wo Ventilatoren aufgrund von Lärmbelastung und Fehleranfälligkeit nicht gewünscht sind.
- Die Simulation dieser Strömungen soll Aufschluss über das Temperatur- und Geschwindigkeitsprofil und die daraus resultierende Wärmeübertragung vor allem in wand- bzw. bodennahen Bereichen geben. Außerdem soll die Stabilität der Strömung, auch in Hinblick auf den Einfluss der Erdrotation, untersucht werden.
- Aufgrund von Parameterstudien und kleinskaligen Einflussgrößen ist ein hohe Rechenleistung notwendig.

Turbulente Konvektionsströmungen werden entscheidend durch die auftretenden Wirbel charakterisiert, welche die Temperatur- und Geschwindigkeitsfelder beeinflussen und damit auch die Wärmeübertragung zwischen den einzelnen Fluidschichten. Um diese Verhältnisse in Konvektionsströmungen numerisch untersuchen zu können, muss zunächst eine vereinfachte, geeignete Geometrie gefunden werden. Hierfür wurde ein abgeschlossener, rechteckiger Container mit einer Höhe von 0.75 m, einer Länge von 0.75 m, und einer Tiefe von 1.5 m gewählt. Der Container ist mit Luft gefüllt und die vertikalen Wände werden unterschiedlich mit einer Temperaturdifferenz von 40 K temperiert. Diese Differenz dient als Grundlage für die Entstehung der freien Konvektion. Die horizontalen Wände des Containers sind adiabatisch.

Der Schwerpunkt der Simulationen liegt vor allem auf der Untersuchung der Temperatur- und

Geschwindigkeitsfelder der wandnahen Bereiche des Containers, da sich hier die turbulenten Wirbel entwickeln. An den vertikalen Wänden existieren hohe Temperaturgradienten, wodurch sich ein konduktionsdominiertes Temperaturfeld einstellt. In der linken oberen Ecke und der gegenüberliegenden rechten unteren Ecke des Containers bilden sich Scharen von Rezirkulationszonen aus, welche genauer untersucht werden sollen. Das Temperaturfeld in der Mitte wird durch niedrige Temperaturgradienten und Konvektion beherrscht, was einen Wärmestrom durch Massentransport bedingt. In Nähe der horizontalen adiabatischen Wände stellt sich ein fast homogenes Temperaturfeld ein. Hier ist die thermale Diffusion der horizontalen Wände noch näher zu betrachten.

Für die numerische Simulation der Konvektionsströmung wird eine Large-Eddy-Simulation (LES) durchgeführt. Bei einer LES werden nicht alle Skalen der auftretenden Wirbel numerisch direkt aufgelöst, was wie bei der direkten numerischen Simulation (DNS) einen erheblich höheren Rechenaufwand mit sich bringen würde. Die Simulation berechnet nur die großskaligen Wirbel, während die kleinskaligen Wirbel durch ein Subgridscale-Modell beschrieben werden. In diesem Fall wird hierfür ein Modell nach *Fureby* [1] gewählt, welches mit einer kompressiblen Form des Smagorinsky-Modells vergleichbar ist. Da sich die Turbulenzen vor allem in den Temperaturgrenzschichten der vertikalen Wände entwickeln, ist hier eine geeignete feine Auflösung des Diskretisierungsgitters der Simulationsgeometrie ausschlaggebend. Das entstehende Gitter umfasst ca. $5 \cdot 10^6$ Gitterpunkte. Aufgrund der notwendigen Simulationsdauer von 10^9 Zeitschritten wird eine hohe Rechenleistung und eine Parallelisierung auf mehrere hundert Prozessoren notwendig.

Bei der numerischen Untersuchung ist vor allem die Frage interessant, wie sich die Temperatur- bzw. Geschwindigkeitsfelder und die Wärmeübertragung für verschiedene Parameter, wie z.B. die Temperaturrandbedingung, verändern. Hierbei steht die Rayleigh-Zahl eine dimensionslose Kennzahl, welche den Wärmetransport in den Luftschichten beschreibt, im Mittelpunkt. Da die Rayleigh-Zahl in den vorzunehmenden Simulationen durch die Länge des Containers charakterisiert ist, müssen mehrere mögliche Dimensionen der Geometrie simuliert werden. Eine weitere Paramtervariation dieses Vorhabens beinhaltet die Orientierung der Wärmetauscher. Bei ei-

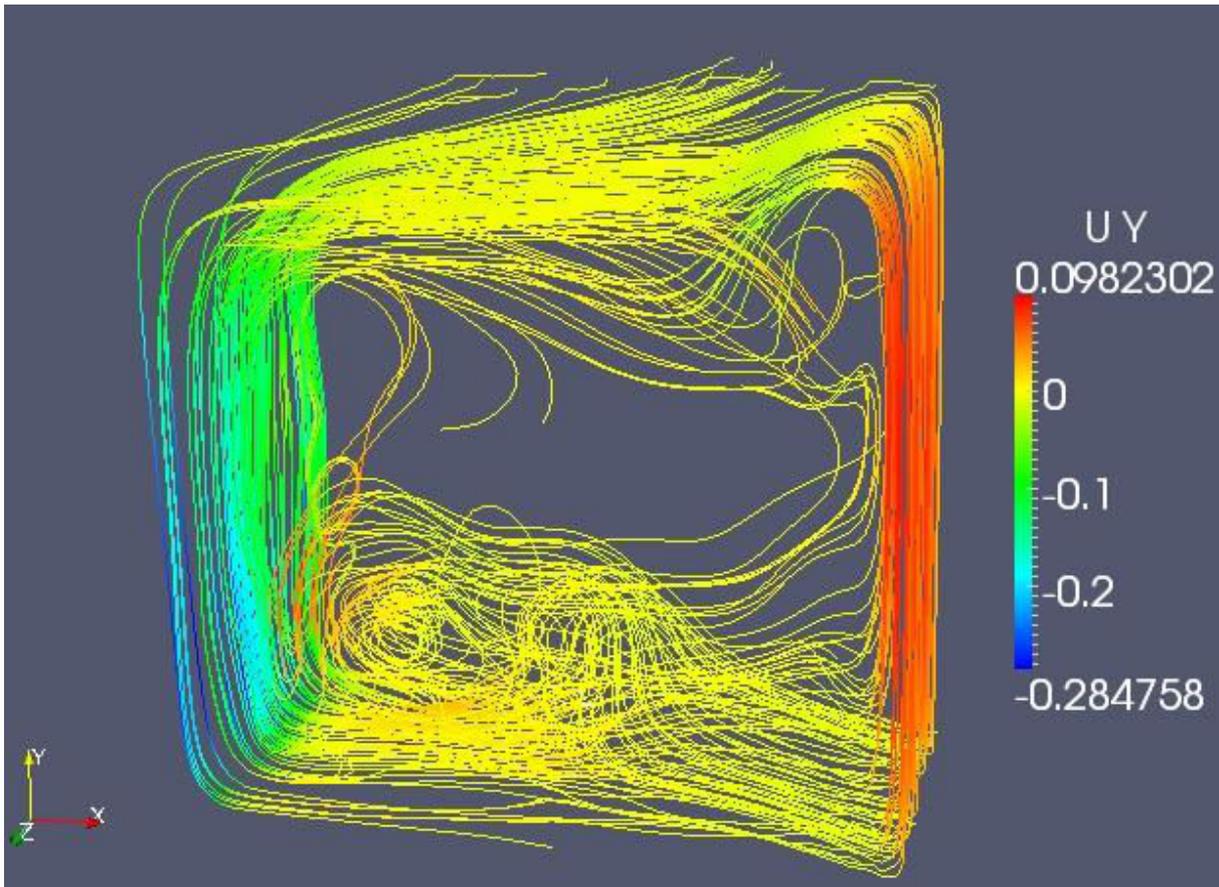


Abbildung 1: Momentaufnahme der Stromlinien in thermal getriebener Walze

ner vertikalen Orientierung entspricht die Konvektionsströmung einer Rayleigh-Bénard-Strömung, wozu in den letzten Jahren bereits umfangreiche Untersuchungen vorliegen. Des weiteren werden Strömungsergebnisse unter Berücksichtigung einer auf den Container wirkenden Corioliskraft simuliert und analysiert, um Aussagen über die Stabilität dieser modifizierten Strömung treffen zu können. Mit Hilfe der numerischen Ergebnisse im Vergleich zu experimentellen Daten [2],[3] könnten weitere Erkenntnisse über die thermale Grenzschicht an den Wänden gewonnen werden.

3. Y.S Tian and T.G. Karayiannis, Low turbulence natural convection in an air filled square cavity, Part II: the turbulence quantities, International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 43, pp. 867-884, 2000
4. O. Shishkina and C. Wagner, Analysis of sheet-like thermal plumes in turbulent Rayleigh - Bénard convection, J. Fluid Mech., vol. 599, pp. 383 - 404, Cambridge University Press, 2008

Förderung

Zentrale Forschungsförderung der Universität Bremen, Projekt TurboTherm

Mehr zum Thema

1. C. Fureby, On subgrid scale modeling in large eddy simulations of compressible fluid flow, Phys. Fluids, Vol. 8, No. 5, pp. 1301-1311
2. Y.S Tian and T.G. Karayiannis, Low turbulence natural convection in an air filled square cavity, Part I: the thermal and fluid flow fields, International Journal of Heat and Mass Transfer, vol. 43, pp. 849-866, 2000

Rollex

Bestimmung der Rolldämpfung moderner Schiffsformen mit Hilfe von experimentellen und numerischen Untersuchungen komplexer Strömungsvorgänge

M. Abdel-Maksoud, S. Handschel, J.P. Soproni,
 Institut für Fluidodynamik und Schiffstheorie,
 Technische Universität Hamburg-Harburg

Kurzgefasst

- Moderne Schiffsformen neigen im Seegang zu starken Rollbewegungen bei denen Ladung über Bord geht, das Schiff beschädigt wird oder Menschen zu Schaden kommen.
- Die existierenden und in der Praxis meist verwendeten empirische Verfahren zur Bestimmung der zähigkeitsbedingten Rolldämpfung bei potenzialtheoretischen Berechnungsverfahren versagen bei modernen Schiffsformen.
- Die Entwicklung von neuen Verfahren zur Berücksichtigung des zähigkeits- und wirbelbedingten Anteils der Rolldämpfung für moderne Rumpfformen ist notwendig.
- Aufwendige Rechenverfahren für viskose Strömungen ermöglichen die Berechnung der zähigkeitsbedingten Rolldämpfungsanteile und deren Wechselwirkungen.

Aufgrund steigender Anforderungen an die Transportkapazität in Verbindung mit minimalem Leistungsbedarf weisen moderne Schiffsrumppformen veränderte geometrische Eigenschaften auf. Hauptmerkmal ist der starke Spantausfall im Vor- und Hinterschiff, welcher vor allem bei Container- und Passagier- bzw. Kreuzfahrtschiffen zu sehen ist. Diese Spantformen haben jedoch einen großen und oft unterschätzten Einfluss auf das Seegangsverhalten eines Schiffes. Große Rollbewegungen (Drehung um die Längsachse), bei denen Ladung über Bord geht, Schiffe beschädigt werden oder Menschen zu Schaden kommen, können auftreten.

Für die Berechnung und Prognose der Seegangseigenschaften eines neuen Schiffsentwurfs werden in der Praxis kosten- und zeitgerechte Simulationsmethoden für potenzialtheoretische Strömungen eingesetzt. Effekte wie die Viskosität und Rotation der Strömung können mit diesen Verfahren per Definition nicht abgebildet werden. Für die maßgeblich durch Masseneffekte, wellenbedingter Dämpfung und Hydrostatik beeinflussten Bewegungsfreiheitsgrade eines Schiffes ist diese Vereinfachung zulässig. Bei der schwach gedämpften Rollbewegung nehmen zähigkeitsbedingte Dämpfungsanteile jedoch einen vergleichsweise großen Anteil an der Gesamtdämpfung an

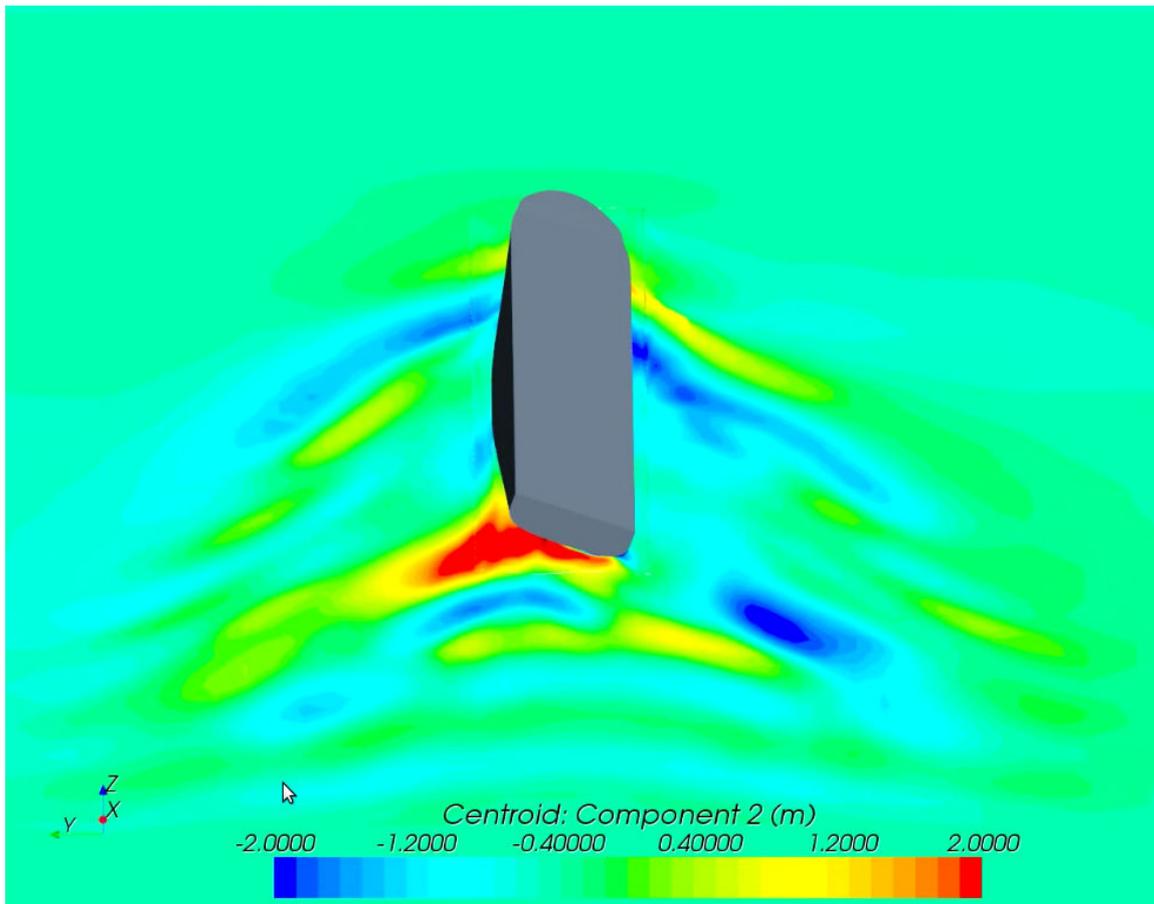
[1]. Es sind daher zusätzliche Rolldämpfungskoeffizienten für die zähigkeitsbedingten Effekte in der Simulation notwendig. Diese werden in der Praxis vorwiegend mit empirischen Methoden bestimmt, die maßgeblich aus Versuchen Mitte der siebziger Jahre von Blume und Ikeda [2] abgeleitet wurden. Diese liefern unzureichende Ergebnisse für moderne Schiffsformen.

Das Projekt *Rollex* aus dem BMWi-finanzierten Verbundvorhaben *Best-Rolldämpfung Entwicklung von numerischen und experimentellen Methoden zur Bestimmung der Rolldämpfung* befasst sich mit der Simulation der komplexen Strömungsvorgänge, die bei der Rollbewegung sowohl mit als auch ohne Vorausfahrt des Schiffes entstehen. Das Ziel des Verbundvorhabens ist die Analyse der Rolldämpfungsanteile sowie die Entwicklung neuer Verfahren zur Bestimmung viskoser Rolldämpfungskoeffizienten moderner Schiffsformen. Diese sollen bisherige empirische Verfahren basierend auf Modellversuchen älterer Schiffsgeometrien ersetzen. Daraus resultiert eine genauere Bestimmung des Seegangsverhaltens von Schiffen. Gerade bei großen Rollwinkeln eines Schiffes, bei denen deutliche Nichtlinearitäten auftreten, können die neu gewonnenen Ergebnisse Aufschluss bei sicherheitsrelevanten Fragen liefern.

Für die Lösung des Strömungsproblems wird eine Finite-Volumen-Methode zur Lösung der Reynolds-gemittelten inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichung (RANS) verwendet. Die über mehrere Perioden zwangsgeführte Rollbewegung des Schiffes wird mittels Fourieranalyse in einen beschleunigungs- und einen geschwindigkeitsabhängigen Term (den Dämpfungsanteil) zerlegt. Das verwendete Simulationswerkzeug STARCCM+ von CD-adapco [3] ist ein weltweit eingesetzter multicore-optimierter RANS-Löser.

Der numerische Aufwand zur Analyse der Rolldämpfungsanteile ist aufgrund der Vielfalt von zu untersuchenden Abhängigkeiten und Parametervariationen erheblich. Durch Abhängigkeitsstudien müssen Fragestellungen zur räumlichen und zeitlichen Diskretisierung des Strömungsproblems beantwortet werden. Besondere Aufmerksamkeit fordern dabei das *sliding interface* zur Umsetzung der erzwungenen Rollschwingung zwischen dem festen äußeren und dem rotierendem inneren Rechengebiet, die Schiffsanhänge und die Behandlung der freien Wasseroberfläche.

Um die Strömungsvorgänge und die Einflüsse der modernen Schiffsform und deren



Simulation der zwangsgeführten Rollbewegung eines Post-Panamax-Containerschiffes mit einem viskosen Rechenverfahren (RANS). Die Auswertung des auftretenden Rollmoments mittels Fourieranalyse gibt Aufschluss über die viskosen Anteile des Rolldämpfungsmoments. Die Komponenten des Schiffsrumpfs, der Schlingerkielen und Schiffsanhänge wie Ruder und Propeller werden dabei getrennt betrachtet und ihre Abhängigkeiten untersucht.

Anhänge auf die Rollbewegung zu untersuchen, werden Paramtervariationen an insgesamt fünf modernen Rumpfformen durchgeführt. Dies sind ein Post-Panamax-, Panamax-, und Feeder-Containerschiff, eine Ropax Fähre und ein Passagierschiff. Die Paramtervariationen beinhalten neben der Variation von Rollamplituden und -frequenzen auch geometrische Änderungen in: Breiten-Tiefgangsverhältnis, Völligkeit, Kimmradius und den damit einhergehenden Modifikationen an der Spantform des Schiffes. Weiter geben Berechnungen mit und ohne Schiffsanhänge wie Schlingerkielen, Ruder, Wellenanlage und Propeller Aufschluss über deren Wechselwirkung.

Mehr zum Thema

1. Robert V. Wilson, Pable M. Carrica, Fred Stern, 2004: Unsteady RANS method for ship motions with application to roll for a surface combatant; IIHR-Hydroscience and Engineering, The University of Iowa
2. Y. Himeno, 1981: Prediction of Ship Roll Damping - State of The Art; Nav Arch & Mar Engr, The Univ. of Michigan
3. <http://www.cd-adapco.com/>

Förderung

Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie

ShipLES - Berechnung der instationären turbulenten Schiffsumströmung

Entwicklung und Implementierung der hybriden RANS LES Modelle zur Berechnung der Strömung im Heckbereich von Schiffen

N. Kornev, A. Taranov, E. Shchukin, M. Walter,
Lehrstuhl für Modellierung und Simulation, Universität Rostock

Kurzgefasst

- ShipLES ist ein Verbundprojekt zwischen der Universität Rostock, der Schiffbauversuchsanstalt Potsdam und der Fa. Voith GmbH.
- Das Ziel des Projekts ist die Erschließung des Potentials von modernsten numerischen Methoden für maritime Anwendungen.
- Es ist geplant, eine neue numerische Methode zur Modellierung der instationären wirbelbehafteten Strömung auf der Basis der Grobstruktursimulation (LES) zu entwickeln, zu testen und für typische schiffbauliche Anwendungen der Industrie zur Verfügung zu stellen.

Am Schiffskörper wie auf allen sich in einem viskosen Medium bewegendem Körpern entsteht eine relativ dünne Schicht einer gebremsten Flüssigkeit. Diese Grenzschicht wird entlang des Schiffes dicker und erreicht im Heckbereich eine Dicke von etwa ein Prozent der Schiffslänge. Eine abfließende Grenzschicht bildet den Nachstrom hinter dem Schiff. Bei Schiffen mit einem großen Völligkeitsgrad (z.B. Frachtschiffe, Tanker) kann sich die Schicht im Heckbereich ablösen, was zu wesentlichen Verwirbelungen im Nachstrom führt. Der Nachstrom besteht aus mehreren konzentrierten Wirbelstrukturen, die wesentliche Ungleichförmigkeiten in der Propelleranströmung verursachen. Dieses Phänomen ist im Schiffbau zu vermeiden, da eine ungleichförmige Anströmung die Ursache für Propellerschwingungen, Geräuscherzeugung und Kavitation ist.

Um die durch Inhomogenität der Anströmung bedingten Schwierigkeiten zu überwinden, wurden die so genannten Skew Propeller mit den gegen der Drehrichtung versetzten Schnitten erfunden Abb. [1]. Diese Erfindung löst aber das Problem nicht vollständig. Die Gewährleistung einer homogenen Anströmung für Propeller bleibt nach wie vor die wichtigste Aufgabe beim Entwurf des Schiffsantriebs.

In den letzten Jahren hat sich die numerische Strömungsberechnung (CFD) zu einem unverzichtbaren Werkzeug bei der hydrodynamischen Bewertung, Auslegung und Optimierung von Schif-

fen und Unterwasserfahrzeugen entwickelt. Mathematische Modelle, numerische Rechenverfahren und Computertechnik ermöglichen zusammen die qualitative und quantitative Berechnung der Schiffsumströmung, was mittlerweile zu einer wertvollen Ergänzung der Modelluntersuchungen geworden ist.



Abbildung 1: Skew Propeller.

Als Basis der bisherigen Simulationsmethoden dienten die so genannten Reynolds gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (RANS), in denen die turbulenten Schwankungsgrößen zeitlich gemittelt werden. Die Ergebnisse von RANS-Rechnungen sind qualitativ hochwertig und anerkannt, wenn die Strömung nicht durch turbulente Erscheinungen dominiert ist. Die Simulation der schwingungserregenden Strömung um das Hinterschiff und den Propeller kann mit den zeitlich gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen nicht durchgeführt werden. Zur wirklichkeitsnahen Wiedergabe zeitlich aufgelöster turbulenter Strömungen sind diese Verfahren weitestgehend ungeeignet. Dafür sollen moderne Methoden, in denen die kohärenten Strukturen der Strömung zeitlich und räumlich aufgelöst werden, zum Einsatz kommen. Die direkte numerische Simulation (DNS) ermöglicht die Auflösung von allen Wirbelstrukturen der Strömung, beginnend von den kleinsten bis zu den größten Wirbeln. Leider ist die direkte Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen (DNS) aufgrund der notwendigen feinen räumlichen und zeitlichen Diskretisierung zurzeit weder im Maßstab des Modells noch für die Großausführungen möglich. Die Grobstruktursimulation (Large-Eddy-Simulation, LES), die auf räumlich gefilterten Na-

vier Stokes Gleichungen basiert, stellt eine gute Alternative zu RANS dar. Diese relativ neue Technologie ist in der Lage kleinskalige instationäre Wirbelstrukturen aufzulösen und viele für den Schiffbau wichtige Phänomene genauer vorherzusagen.

Die LES-Anwendung für ingenieurtechnische Probleme ist jedoch sehr problematisch. Aufgrund der für diesen Bereich typischen großen Reynolds-Zahlen sind Schwierigkeiten bei der Auflösung der auftretenden Wirbelstrukturen und bei der numerischen Behandlung der Strömung in der Nähe der Körperoberfläche, wo große Gradienten auftreten, vorprogrammiert. Die zur Lösung dieser Probleme notwendigen Computerressourcen sind sehr umfangreich, was die praktische Anwendung der LES unmöglich macht. Ein effizienter Ausweg ist die Kombination von LES- mit herkömmlichen RANS-Methoden. Ein wichtiges Problem besteht dabei in der Kopplung zwischen den numerischen Lösungen in den RANS- und LES-Gebieten. Die Entwicklung einer effizienten Kopplungsprozedur gehört zu den Kernaufgaben des vorliegenden Projektes.

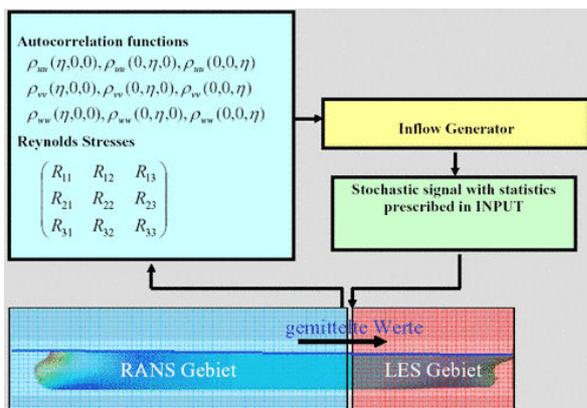


Abbildung 2: Übersicht hybride RANS-LES Methode.

Zu den konkreten Zielen gehören Entwicklung, Implementierung und Validierung einer neuen Generation von hybriden Methoden sowie ihr Einsatz zur Untersuchung von Schiffsumströmungen. Die Methode besteht aus einer Kombination des RANS-Verfahrens für den vorderen Teil des Schiffes, in dem die Strömung relativ ausgeglichen ist und der Grobstruktursimulation (LES) für den Heckbereich Abb. [2]. Die LES-Methode findet besonders dort Anwendung, wo eine zuverlässige Auflösung von starken instationären Wirbelstrukturen notwendig bzw. gewünscht wird. Gerade im Heckbereich eines Schiffes treten starke Turbulenzen auf, deren kleine Wirbelstrukturen nur mittels LES ausreichend aufgelöst und dargestellt werden können. Diese Wirbelstrukturen sind hauptsächlich verantwortlich für Lärmbelastung, Schwingungerscheinungen und Kavitation am Propeller. Eines

der wichtigsten Probleme bei der Implementierung des zu entwickelnden Ansatzes, der zu den so genannten hybriden RANSE-LES-Methoden gehört, besteht in der Entwicklung des Interfaces zwischen RANSE- und LES-Region. Für das Interface wird die von uns vorgeschlagene Methode benutzt. Von der RANS-Simulation werden gemittelte Werte entnommen, während die Schwankungen mit dem von uns entwickelten Inflowgenerator erzeugt werden.

Mit der Entwicklung der neuartigen Methode soll ein Durchbruch in der Erhöhung der Genauigkeit der numerischen Modellierung der Schiffshydrodynamik erzielt werden. Dadurch soll die Vorhersagesicherheit der Wechselwirkung zwischen dem Schiffsrumpf und dem Schiffsantrieb, der Vibration und der Kavitation am Propeller hinter dem Schiff wesentlich verbessert werden. Das zu entwickelnde Programm soll weiterhin genutzt werden, um einen wesentlichen Beitrag zur Lösung der für den Schiffbau wichtigen wissenschaftlichen Aufgabe zu leisten: Aufklärung der physikalischen Mechanismen zur Entstehung und Entwicklung der Wirbelstrukturen im Schiffsheckbereich.

Mehr zum Thema

1. N. Kornev und E. Hassel, „Synthesis of homogeneous anisotropic divergence free turbulent fields with prescribed second-order statistics by vortex dipoles“, *Physics of Fluids*, 19(5), 2007.
2. N. Kornev, A. Taranov, E. Shchukin und L. Kleinsorge, „Development of hybrid URANS-LES methods for flow simulation in the ship stern area“, *Ocean Engineering*, in review.

Förderung

BMW-Verbandvorhaben ShipLES im Rahmenprogramm „Schifffahrt und Meerestechnik für das 21. Jahrhundert“

Wärmeübergang auf Dellenoberflächen

Untersuchung der physikalischen Mechanismen zur Erhöhung des Wärmeüberganges auf Dellenoberflächen

J. Turnow, N. Kornev, E. Hassel, Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, Fakultät für Maschinenbau und Schiffstechnik, Universität Rostock

Kurzgefasst

- Die Energieeffizienz spielt derzeit eine fundamentale Rolle in vielen Bereichen der Wissenschaft und Industrie.
- Der Einsatz von Dellenoberflächen in z.B. Gasturbinen zeigt eine hohe Effizienz bzgl. der Wärmeabfuhr und des sich einstellenden Druckabfalls innerhalb von Wärmeübertragern.
- Es stellt sich eine wesentliche Intensivierung des Wärmeüberganges mit Dellen im Vergleich zum glatten Oberflächen sowie ein geringfügig erhöhter Druckverlust im Wärmeübertrager ein.
- Bisher wurde keine eindeutige physikalische Begründung für die hohe Energieeffizienz beim Einsatz von Dellenoberflächen gefunden.
- Hochaufgelöste Berechnungen basierend auf dem LES-Verfahren mit dem Framework OpenFOAM sollen einen detaillierten Einblick in Wirkmechanismen von Dellen geben.
- Ziel der Berechnungen ist es, ein fundamentales Verständnis über die komplexen Mechanismen der Wärmeübertragung an Dellenoberflächen zu erlangen.

Die numerischen Simulationen, die im Rahmen eines DFG Paketprojektes auf dem HLRN durchgeführt werden, gehören zu den Arbeiten am Projekt *Untersuchung der physikalischen Mechanismen zur Erhöhung des Wärmeüberganges auf Dellenoberflächen*. Es handelt sich um ein von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) gefördertes Projekt, das wiederum Teil eines Verbundprojektes in enger Kooperation mit den Gruppe der TU Hamburg-Harburg (H. Herwig) und der TU Darmstadt (P. Stephan) ist. Ziel des Forschungsvorhabens ist es, ein fundamentales Verständnis über die komplexen Mechanismen der Wärmeübertragung an spezifisch verformten Dellenoberflächen in Abhängigkeit von der Dellengeometrie und Strömungsbedingungen zu erlangen. Dellenoberflächen weisen im Gegensatz zu herkömmlichen Maßnahmen zur Erhöhung des Wärmeüberganges wesentliche Vorteile auf. Der bedeutendste Vorteil ist die Erhöhung der Wärmeabgabe bei gleichzeitiger geringer

Erhöhung des Druckverlustes, was z.B. in Gasturbinen entscheidend für dessen Wirkungsgrad ist.

Dellenförmige Oberflächenverformungen weisen zudem viele Vorteile im Vergleich zu den zurzeit eingesetzten *konventionellen* Verfahren wie z.B. Kühlrippen auf. Alle bisherigen Untersuchungen zeigen, dass weitere Optimierungen der Dellenform und der Geometrie der Kühlkanäle die Attraktivität dieser alternativen Kühlmethode wesentlich erhöhen können. Der theoretische Teil der Arbeiten beinhaltet hochaufgelöste RANS- und LES-Berechnungen der sich einstellenden Strömung und Wärmeübertragung. Die Untersuchungen werden sowohl für einzelne Dellen als auch für Dellenpakete in Kanälen verschiedener Höhe durchgeführt. Im Rahmen des Projektes sollen physikalische Wirkmechanismen der Wirbelbildung und ihr Einfluss auf die Wärmeübertragung auf Dellenoberflächen erforscht werden. Diese Erkenntnisse schaffen die Basis für die Optimierung der Dellengeometrien. Aufgrund bisheriger Berechnungen wurde eine große Anzahl von möglichen Wirbelstrukturen in Dellen aufgedeckt, die tornadoähnliche Wirbel, Wirbelringe u.s.w. enthalten. Es wurde numerisch gezeigt, dass sich die Wirbelstrukturen in Abhängigkeit von der Dellentiefe nicht nur quantitativ sondern auch qualitativ ändern. Die symmetrische Doppelwirbelstruktur wandelt sich unter bestimmten Bedingungen in eine asymmetrische Monostruktur innerhalb der Delle. Die erwünschten Monostrukturen können z.B. durch eine unsymmetrische Form der Dellen erzeugt werden. Der durch die Dellenwirbel intensivierte Wärmeübergang ist um den Faktor 1.8 bis 2.4 größer als der Wärmeübergang an einer ebenen glatten Platte. Es konnte bereits qualitativ gezeigt werden, dass die Form der Wirbelstrukturen einen wesentlichen Einfluss auf die thermische Effizienz des Wärmeübertragers hat [1].

Die Berechnung des Wärmeüberganges an Dellenoberflächen bei den technisch relevanten Reynoldszahlen $Re=5000$ bis $Re=60000$ erfolgt zumeist konventionell mit Hilfe der RANS- bzw. URANS-Methodik innerhalb der CFD. Allerdings zeigen bisherige Analysen, dass ein einheitliches Bild der inneren Strömung und der in der Delle entstehenden Wirbelstrukturen bis heute fehlt. Aufgrund von Experimenten wurde sichtbar, dass die Strömung sehr instabil aufgrund von Schwankungen der Wirbelstrukturen ist. Daher sind stationäre bzw. quasistationäre (RANS, URANS) CFD-Verfahren für diese Problemstellung eher ungeeig-

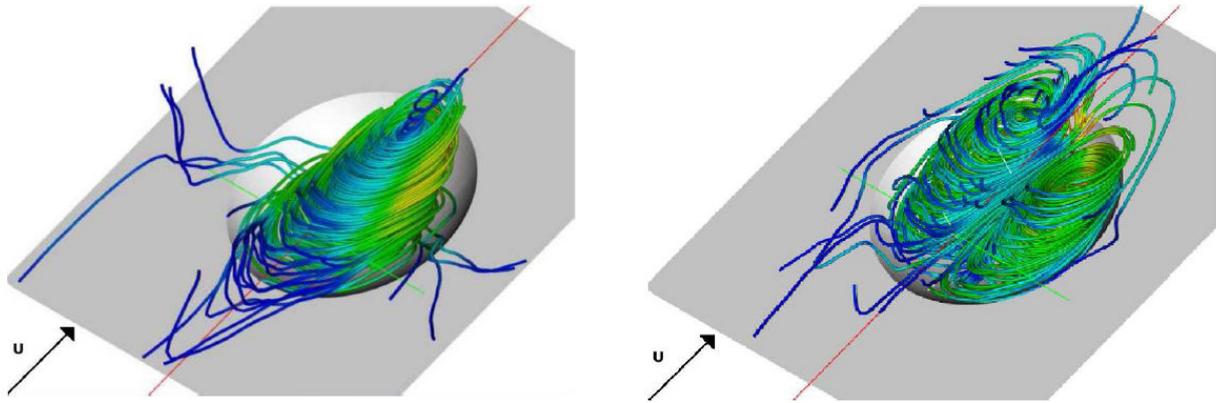


Abbildung 1: Stromlinienverläufe des ersten und zweiten POD Modes der Geschwindigkeit auf Dellenoberflächen. Diese energietragenden Strukturen sind verantwortlich für die hohe thermischen Effizienz von Dellenoberflächen in Wärmeübertragern.

net. Um die typischen Wirbelstrukturen zu identifizieren, wird mit den heutigen Rechenressourcen auf dem HLRN die LES (Large-Eddy Simulation) als moderne CFD-Technologie mit Hilfe des Frameworks OpenFOAM eingesetzt.

Mit Hilfe der LES wird die Strömung zeitlich und räumlich hoch aufgelöst, wodurch die Möglichkeit besteht, die Wirbelbildung bzw. den Wirbeltransport und deren Einfluss auf den lokalen Wärmeübergang zu analysieren. Wirbelzentren können mit Hilfe des Λ 2-Kriteriums oder des Q -Kriteriums visualisiert werden. Mit Hilfe der Frequenzanalyse und anschließender Phasenmittlung der Strömungsfelder lassen sich die Isoflächen der einzelnen großen und kleinen Wirbelstrukturen identifizieren. Weiterhin geben die phasengemittelten Stromlinien Einblick in die Geschwindigkeitsverläufe. Zur zusätzlichen Auswertung dieser Geschwindigkeitsfelder stehen verschiedene moderne Techniken und Verfahren, wie Fouriermodenzerlegung, Waveletanalyse bzw. die sogenannte Karhunen-Loève-Zerlegung (engl. Proper Orthogonal Decomposition, POD), zur Verfügung. Die POD Analyse nach Sirovich wurde im Rahmen des Projektes in den bestehenden Programmcode OpenFOAM implementiert. Die Bedeutung der Karhunen-Loève-Zerlegung als niederdimensionale Modenzerlegung hat in den letzten Jahren mit der ständig steigenden Rechnerleistung und dem damit verbundenen Anwachsen von numerisch ermittelten Daten stetig zugenommen. Die POD Analyse zerlegt eine turbulente periodische Strömung in kohärente Strukturen und lässt deren Entstehungsgeschichte, Entwicklung und Zerfallsprozess nachvollziehen. Eine in diskreten Daten in Raum und Zeit gegebene Strömung wird dazu in orthogonale geordnete Moden zerlegt, die nacheinander die zeitlich veränderliche

Strömung nach Energieanteilen beschreiben. Die entnommenen Strukturen aus der POD Analyse zeigen den Grundcharakter der Strömung entlang Dellenoberflächen und zeigen Strukturen auf, welche für die hohe thermische Effizienz von Dellen im Wärmeübertrager verantwortlich sind [2].

Mit den erzielten Ergebnissen wird ein detaillierter Einblick in die Dynamik der Strömung und des Wärmeüberganges auf Dellenoberflächen aufgezeigt. Es lassen sich folglich, basierend auf den Ergebnissen, neue Methoden zur Auslegung und Konstruktion optimierter Wärmeübertrager entwickeln, wodurch deren Effizienz zur Energieausbeute deutlich gesteigert werden kann.

Mehr zum Thema

1. N. Kornev, E. Hassel, H. Herwig, S. Isaev, P. Stephan, V. Zhdanov, *Erhöhung des Wärmeüberganges durch Wirbelinduktion in Oberflächendellen*, Forschung im Ingenieurwesen Vol.2 (2004).
2. J. Turnow, N. Kornev, S. Isaev, E. Hassel, *Vortex mechanism of heat transfer enhancement in a channel with spherical and oval dimples*, Heat and Mass Transfer, DOI: 10.1007/s00231-010-0720-5

Förderung

Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

Simulation von turbulenten Mischungsvorgängen in Flüssigkeiten

Untersuchung von reaktiven turbulenten Mischungsvorgängen bei hohen Schmidt-Zahlen mit besonderer Berücksichtigung der Mikromischung

M. Walter, N. Kornev, E. Hassel, Lehrstuhl für Technische Thermodynamik, Lehrstuhl für Modellierung und Simulation, Universität Rostock

Kurzgefasst

- Die numerische Simulation von turbulenten reaktiven Mischungsvorgängen in Flüssigkeiten ist mit komplexen Problemen verbunden, deren Lösung häufig den Einsatz von großen Rechenkapazitäten erfordert.
- Das Globalziel des Vorhabens ist die Verbesserung und Weiterentwicklung von LES-Feinstrukturmodellen zur genaueren Vorhersage der Mischungs- und Reaktionsraten bei turbulenten reaktiven Mischungsvorgängen in Flüssigkeiten.
- In diesem Projekt wird mittels LES vor allem die Mikromischung untersucht und die kleinskaligen Strukturen, welche für alle diffusiven Prozessen von großer Bedeutung sind, hinsichtlich Form und Verhalten analysiert.
- Bisherige Simulationen haben gezeigt, dass die etablierten LES-Feinstrukturmodelle bei großen Reynolds- und Schmidt-Zahlen nur unzureichende Ergebnisse liefern.
- Ein vielversprechender Ansatz zur Simulation von Strömungen bei großen Reynolds- und Schmidt-Zahlen und moderaten Auflösungen besteht in einem neuen nichtlinearen LES-Verfahren, das auf einem multifraktalen Modell basiert.

Turbulente Mischungsvorgänge sind für eine Vielzahl technischer Anwendungen von großer Relevanz. Insbesondere im Rahmen der chemischen Verfahrenstechnik kommt, aufgrund von komplexen Reaktionen zwischen den vermischten Stoffen, dem elementaren Verständnis über die physikalischen Vorgänge in turbulenten Mischungsvorgängen eine signifikante Bedeutung zu. Mischungsvorgänge in turbulenten reaktiven Strömungen werden vornehmlich durch konvektive Transportprozesse und molekulare Diffusion beeinflusst. Das Verhältnis daraus ist die dimensionslose Schmidt-Zahl, welche zur Charakterisierung des Stofftransports in der Strömung dient. Abhängig von den Zeitskalen der makroskopischen und mikroskopischen Mischung stellen sich dabei unterschiedliche Mischungszustände ein.

Mit Hilfe von numerischen Simulationen kann das Verhalten der Strömung bzw. der Mischung

vorhergesagt werden, so dass aufwändige experimentelle Untersuchungen entfallen können. Dazu ist es jedoch notwendig, das betrachtete Gebiet bis zu den kleinsten Wirbeln (Kolmogorov Länge) aufzulösen. Bei der Mischung von Stoffströmen, insbesondere unter Berücksichtigung von chemischen Reaktionen, müssen aufgrund von kleinskaligen diffusiven Prozessen weitere skalare Strukturen berücksichtigt werden, die abhängig vom Fluid bis zu mehrere Größenordnungen kleiner sein können als die Kolmogorov Länge (z.B. in Wasser bis zu 100 mal kleiner). Dieser kleinskalige Bereich wird auch als Batchelor Länge bezeichnet.

Mittels direkter numerischer Simulationen (DNS) können alle Strukturen während des turbulenten Mischungsvorganges erfasst werden. Von Vorteil ist hierbei die geschlossene Form des zu lösenden Gleichungssystems, so dass eine Modellierung einzelner Terme entfällt. Jedoch sind industrie-relevante Anwendungen in der Regel von starker Turbulenz und großen Reynolds-Zahlen geprägt, so dass eine DNS oftmals an den enormen Anforderungen an Rechenkapazität und Rechenzeit scheitert. Häufig werden deshalb Reynolds-gemittelte Simulationen (RANS) oder Grobstruktursimulationen (LES) zur Berechnung von turbulenten reaktiven Mischungsvorgängen eingesetzt, da diese Verfahren das Gebiet nur teilweise auflösen und somit geringere Rechenkapazitäten und Rechenzeiten benötigen. Die erforderliche Modellierung der Turbulenz sowie der Turbulenz-Chemie Interaktion muss dabei durch geeignete Verfahren erfolgen. Der Rechenaufwand im Rahmen einer RANS oder LES liegt jedoch unter dem einer DNS. Ein bisher ungelöstes Problem in der LES-Modellierung besteht in der Berücksichtigung hoher Schmidt-Zahlen. Die derzeitigen etablierten LES-Modelle sind nicht in der Lage den Einfluss großer Schmidt-Zahlen hinreichend genau abzubilden ohne das Rechengebiet extrem zu verfeinern.

Das Ziel des Projekts ist die Untersuchung der kleinskaligen turbulenten Strukturen, die sich bei der Mischung der zugeführten Stoffströme bilden. Es sollen dabei neue Erkenntnisse über das Verhalten sowie die Form und Größe der für diesen Bereich typischen Strukturen gewonnen werden, um die bisherige LES-Modellierung von Strömungen mit hohen Schmidt-Zahlen zu verbessern. Weiterer Gegenstand der Untersuchung ist auch die Auswirkung von chemischen Prozessen auf diese Strukturen sowie ihre gegenseitige Beeinflussung. Im Rahmen des Projekts

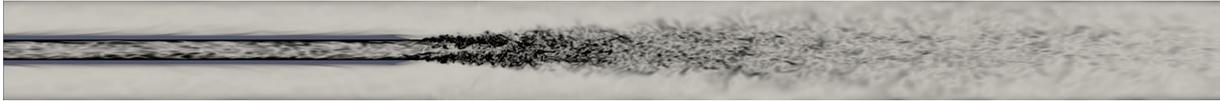


Abbildung 1: Darstellung der Wirbelstärke entlang der Mittelachse des Strahlmischers. Je dunkler die Region, desto intensiver ist die Turbulenz. Entlang des Scherschicht sind deutlich turbulente Bereiche zu erkennen, in denen sich starke Wirbel ausbilden.

wird ein neues vielversprechendes nichtlineares LES-Verfahren getestet, validiert und für reaktive Strömungen weiterentwickelt. Das LES-Modell basiert dabei auf einem multifraktalen Ansatz und zeigte in ersten Simulationen mit hohen Reynolds- und Schmidt-Zahlen sowie geringen Auflösungen bereits gute Ergebnisse.

Als Basis für die numerischen Simulationen dient ein klassischer coaxialer Strahlmischer [2] bestehend aus einer Düse, welche coaxial in einem durchströmten Rohr angeordnet ist.

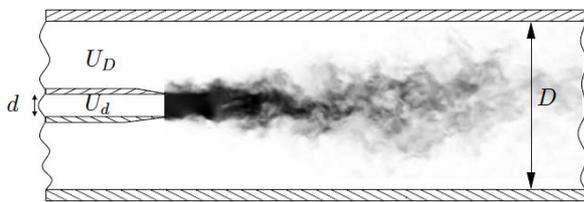


Abbildung 2: Coaxialer Strahlmischer entlang der Mittelachse.

Der Strahlmischer bietet exzellente Mischungseigenschaften aufgrund von starken Verwirbelungen am Rand des inneren Strahls [1]). Diese Wirbel resultieren aus der Instabilität der Scherschicht zwischen beiden Stoffströmen ($Re_d \sim 12000$). Die zugrunde liegende Reaktionskinetik beschränkt sich im ersten Schritt auf eine schnelle irreversible Neutralisationsreaktion von Natriumchlorid und Salzsäure in wässriger Lösung ($Sc \sim 1000$). Anhand von experimentellen Daten werden die Ergebnisse der numerischen Simulationen validiert. Eine adäquate Simulation der Mischung hängt vor allem von der Genauigkeit des verwendeten LES-Turbulenzmodells (auch Feinstrukturmodell bzw. subgrid-space model) ab sowie von der korrekten Abbildung der Einstromrandbedingungen. Zur Überprüfung, ob der verwendete Modellansatz auch zur Simulation der kleinskaligen Effekten geeignet ist, besteht die Möglichkeit, das Energiespektrum der turbulenten Schwankungen des jeweiligen Stoffstroms zu analysieren. Nach der Theorie von Batchelor wird für hohe Schmidt-Zahlen ein Anstieg von k^{-1} in einem speziellen Bereich des Energiespektrums vorhergesagt.

Alle bisher durchgeführten numerischen Simulationen mit den etablierten Feinstruktur-

modellen konnten die Theorie jedoch nicht bestätigen, was vor allem auf die unzureichende Berücksichtigung der hohen Schmidt-Zahlen in den Feinstrukturmodellen und auf eine zu geringe Zellanzahl zurückzuführen ist [3]. Die vollständige Auflösung des Rechenggebietes würde für die vorliegende Konfiguration eine Gesamtanzahl von $1,2 \cdot 10^{15}$ Zellen bedeuten.

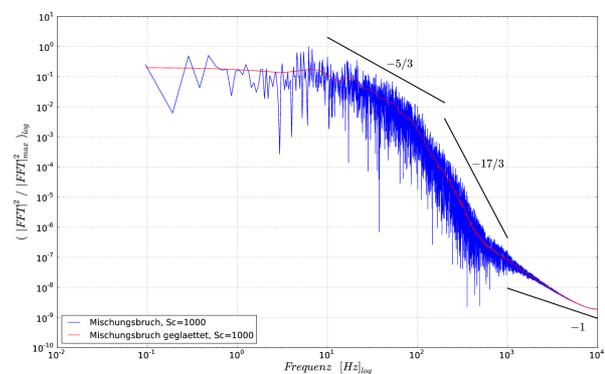


Abbildung 3: Energiespektrum des Mischungsgrads der beiden zugeführten Stoffströme.

Mehr zum Thema

1. M. Walter, N. Kornev, E. Hassel, „Turbulent mixing with chemical reaction in a coaxial jet mixer“, Proceedings in Turbulence Heat and Mass Transfer, 2009, Rom.
2. E. Hassel, N. Kornev, Z. Zhdanov, A. Chorny, M. Walter „Analysis of mixing processes in jet mixers using LES under consideration of heat transfer and chemical reaction“, Mixing and chemical reactions, Springer, 2009.

Förderung

Universität Rostock

Luftwirbel im Flugantrieb

Simulation des Überziehens von Triebwerkseinlaufströmungen mit fortschrittlichen Turbulenzmodellen

R. Radespiel, A. Probst, Institut für Strömungsmechanik, TU Braunschweig

Kurzgefasst

- Strömungsablösungen im Einlauf von Triebwerken können den sicheren Betrieb der Flugantriebe gefährden.
- Zur Vorhersage solcher Phänomene eignet sich die numerische Strömungssimulation, die mit Hilfe hochwertiger Reynolds-Spannungsturbulenzmodelle weiter verbessert werden kann.
- Die Auflösung der zeitlich veränderlichen, dreidimensionalen Strömungsstrukturen erfordert einen hohen Rechenaufwand mit mehr als 100 parallelisierten CPU.

Trotz der hohen Sicherheitsstandards im Flugreiseverkehr bestehen auch heute noch schwer berechenbare Problemstellungen, die Gegenstand aktueller Forschung in der Luftfahrt sind. Ein häufiges Phänomen sind unerwartete Windböen, die das Flugzeug erfassen und die Insassen kräftig durchschütteln können. Noch problematischer als das Wohlbefinden der Passagiere ist die Tatsache, dass die zusätzlich angreifenden Luftströme den so genannten Anstellwinkel des Flugzeugs kurzzeitig erheblich vergrößern können. Wird hierbei ein gewisses zulässiges Maß überschritten, so löst die normalerweise an der Wand gebundene Strömung von der Oberfläche ab. Dadurch entstehen starke Luftverwirbelungen, die die Flugeigenschaften beeinträchtigen können. Das Einsetzen von Ablösungen infolge einer Anstellwinkelhöhung wird auch als Überziehen bezeichnet.

Strömungsablösungen treten nicht nur an den Tragflügeln auf, sondern auch im vorderen Einlauf der Flugtriebwerke, die für den notwendigen Antrieb des Flugzeugs sorgen. Dort stören die Luftwirbel die Zuströmung zu den rotierenden Schaufelblättern im Inneren des Triebwerks und vermindern seine Schubleistung. Im Extremfall kann es sogar zum Ausfall des gesamten Triebwerks kommen. Aus diesen Gründen ist es wichtig, das Auftreten und die Auswirkungen von Strömungsablösungen in Einläufen möglichst genau zu kennen und vorhersagen zu können. So lassen sich bereits in der Entwurfsphase neuer Flugzeuge und Triebwerke Verbesserungen vornehmen, um die Flugsicherheit weiter zu erhöhen.

In dem hier vorgestellten Projekt wird die Methode der numerischen Strömungssimulation zur Vorhersage von Einlaufablösungen verwendet und durch den Einsatz von fortschrittlichen Berechnungsansätzen verbessert. Dabei stellt die Wiedergabe der Turbulenz einen Schlüsselaspekt für die Genauigkeit der Simulationsergebnisse dar, da die turbulenten Schwankungsbewegungen der Strömung einen wesentlichen Einfluss auf den Ort und die Ausdehnung von Ablösungen haben. Um den andernfalls enormen Rechenaufwand zu begrenzen, werden die turbulenten Schwankungen in der Regel mit Hilfe so genannter Turbulenzmodelle nur angenähert berechnet. Dadurch kann die Genauigkeit der Simulationsergebnisse stark leiden. Mit neuartigen Reynolds-Spannungsmodellen (RSM), wie sie in diesem Projekt verwendet werden, sind gegenüber herkömmlichen Ansätzen jedoch deutliche Verbesserungen zu erzielen.

Um die Genauigkeit und die Anwendbarkeit solcher Modelle zu erforschen, wurde am Institut für Strömungsmechanik ein Reynolds-Spannungsmodell in den DLR-TAU Code implementiert [1], [2], der in diesem Projekt als primäres Werkzeug für die Strömungssimulation eingesetzt wird. Zur Beurteilung neuer Simulationsverfahren greift man üblicherweise auf experimentelle Untersuchungen im Windkanal zurück und vergleicht die Rechenergebnisse mit den Messdaten. Zum Zwecke dieser so genannten Validierung werden an der UniBW München begleitende Experimente durchgeführt, in denen eine Triebwerksgondel bei hohen Anstellwinkeln im Windkanal untersucht wird. Die dabei auftretenden Strömungsablösungen werden u.a. durch optische Verfahren genau vermessen und dienen den Simulationsrechnungen als Vergleichsbasis.

Zur Vorbereitung der Simulationen wird ein Rechenetz erzeugt, das das Strömungsgebiet um die Gondeloberfläche in eine Vielzahl kleiner Zellen unterteilt. Das numerische Verfahren kann die Strömungsgrößen nämlich nur in diskreten Punkten des Raumes berechnen, die durch den Aufbau des Rechenetzes vorgegeben sind. Dabei muss sichergestellt werden, dass die räumliche Auflösung überall ausreicht, um die jeweils auftretenden Strömungsstrukturen erfassen zu können. Bei der vergleichsweise einfachen Geometrie einer Triebwerksgondel genügt hierfür ein Rechenetz mit etwa 5 Mio. Knotenpunkten. Um damit das zeitliche Verhalten der häufig stark schwankenden

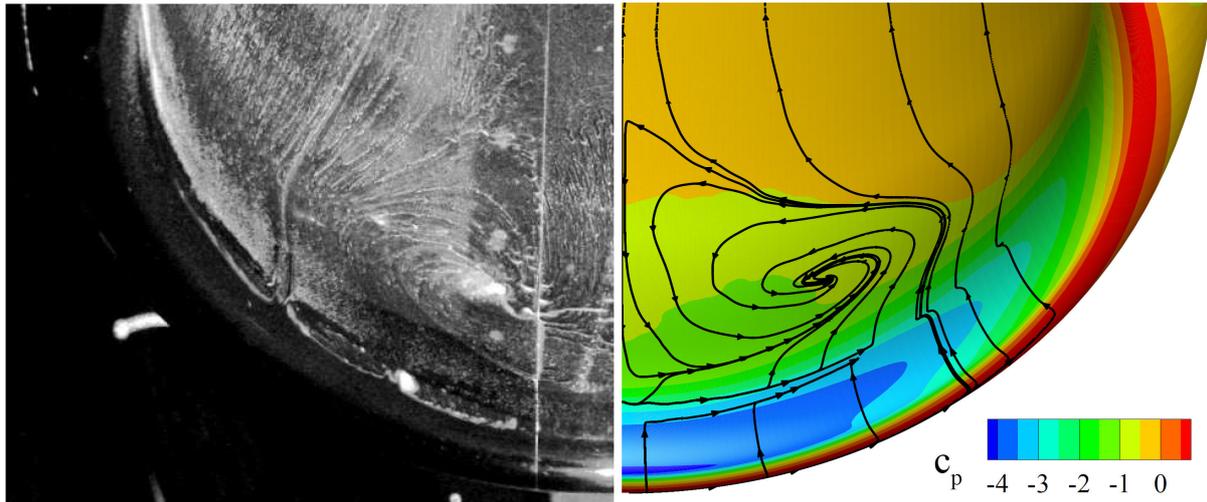


Abbildung 1: 3D Wirbelstruktur infolge einer Strömungsablösung im Einlauf einer Triebwerksgondel. Links: Anstrichbild aus einem Windkanalexperiment, rechts: Ergebnis einer numerischen Simulation mit einem Reynolds-Stressmodell, farblich dargestellt ist der Oberflächendruck.

Strömungsablösungen zu simulieren, sind etwa 4 Tage Rechenzeit auf 128 CPU-Kernen des HLRN erforderlich. Für eine aussagekräftige Beurteilung des Verfahrens muss jedoch eine größere Anzahl solcher Rechnungen für einen Bereich von Anstellwinkeln und unterschiedlichen Turbulenzmodellen durchgeführt werden.

Mit den verwendeten Methoden konnten bereits gute Simulationsergebnisse des Überziehens der Triebwerksgondel erzielt werden. Während herkömmliche Vergleichsmodelle deutlich zu frühe und zu große Bereiche mit abgelöster Strömung berechnen, zeigt das Reynolds-Stressmodell eine nur leicht verfrühte Ablösung, die sich zudem sehr ähnlich wie im Windkanalexperiment verhält. Dies ist beispielhaft in Abbildung 1 zu sehen: In dem links dargestellten Anstrichbild aus dem Experiment zeigt sich eine dreidimensionale, Eulenaugen-artige Wirbelstruktur, die in der rechts dargestellten Simulationsrechnung mit dem Reynolds-Stressmodell gut getroffen wird. Auch die Verteilungen des Oberflächendrucks stimmen bis auf einen kleinen Versatz im Anstellwinkel gut mit den Messungen überein [3].

Im weiteren Projektverlauf wird das Berechnungsverfahren so erweitert, dass ein Teil der turbulenten Schwankungen in der abgelösten Strömung direkt aufgelöst werden kann. Diese auch Detached-Eddy-Simulation (DES) genannte Methode erfordert ein nochmals feineres Rechenetz und erhöht damit den Berechnungsaufwand erheblich. Andererseits kann damit der zeitliche Charakter der wirbelhaften Strömung im Triebwerkseinlauf wesentlich genauer erfasst werden.

Mehr zum Thema

1. Schwamborn, D., Gerhold, T., Heinrich, R.: The DLR TAU-Code: recent applications in research and industry. In: Wesseling, P., Onate, E., Periaux, J., (ed.). European conference on computational fluid dynamics, ECCOMAS CFD, 2006.
2. Probst, A., Radespiel, R.: Implementation and Extension of a Near-Wall Reynolds-Stress Model for Application to Aerodynamic Flows on Unstructured Meshes. AIAA-2008-770, 2008.
3. Probst, A., Schulze, S., Radespiel, R., Kähler, C.: Numerical and Experimental Investigation of a Stalling Flow-Through Nacelle. In: Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design, Vol. 112, 2010.

Förderung

DFG-Forschergruppe FOR 1066, Numerische Simulation des Überziehens von Triebwerkseinläufen

Zustandsbeurteilung eines Triebwerks durch Abgasstrahlanalyse Dreidimensionale Strömungssimulation einer gesamten Flugzeugturbine zur Untersuchung der Einflüsse von Temperaturunregelmäßigkeiten am Eintritt auf den Abgasstrahl

J. Seume, R. Adamczuk, Institut für Turbomaschinen und Fluid-Dynamik, Universität Hannover

Kurzgefasst

- Bestimmung der Auswirkung lokaler Temperaturunregelmäßigkeiten am Eintritt einer Turbine auf den Abgasstrahl eines Triebwerks
- Instationäre CFD-Simulation einer gesamten Turbine
- CFD-Simulation und Auswertung mit Netzen mit bis zu 100 Millionen Knoten

Im Rahmen des SFB 871 - Regeneration komplexer Investitionsgüter - werden wissenschaftliche Grundlagen für die Instandsetzung komplexer Investitionsgüter mit dem Ziel erarbeitet, möglichst viele Komponenten des betreffenden Gesamtsystems so zu erhalten oder aufzuarbeiten, dass die funktionalen Eigenschaften des Investitionsguts wiederhergestellt (regeneriert) und wo möglich sogar verbessert werden. Durch die stetig wachsenden Anforderungen an moderne Triebwerke hinsichtlich Wirtschaftlichkeit und Zuverlässigkeit wurden diese als Modellbeispiel verwendet. Hierbei ist die Steigerung der Lebensdauer und eine zielgerichtete Wartung erforderlich, bei der kleinere Schäden detektiert und im Falle des weiteren Betriebes sonst verursachte schwerwiegendere Fehler vermieden werden. Ein modernes Triebwerk besteht aus den drei Hauptkomponenten Verdichter, Brennkammer und Turbine. Die im Verdichter auf ein Dichteverhältnis von bis zu 40:1 verdichtete Luft wird in der Brennkammer auf Temperaturen von über 2000°C erhitzt und anschließend in der Turbine entspannt. Die Leistung, die dadurch in der Turbine generiert wird, reicht aus, um den Verdichter anzutreiben und den notwendigen Schub zu erzeugen.

Im Rahmen des Teilprojektes A3 des SFB 871 soll mit optischen Messungen des Abgasstrahls und detaillierten numerischen Berechnungen eine Methodik entwickelt werden, die es ermöglicht, durch eine Auswertung von integralen Informationen eine Schadensanalyse vorzunehmen, die den Ort und die Art bestimmter Fehler im Heißgaspfad (ab der Brennkammer des Triebwerks) erschließt. Ein nützliches Analyse- und Diagnoseverfahren für den heißen Teil des Triebwerkes ist dabei die Hintergrund-Schlieren Methode (kurz BOS

- engl. Background Oriented Schlieren Method) in Verbindung mit numerischen Simulationen. Bei der BOS-Methode wird die scheinbare Verzerrung eines im Hintergrund angebrachten Musters aufgrund von Dichteunterschieden im Abgasstrahl ermittelt. Mit Hilfe der BOS-Methode ist es daher möglich, das Dichtefeld zu messen und daraus Rückschlüsse auf die Temperaturverteilung im Abgasstrahl zu ziehen. Die dreidimensionale Dichteverteilung kann mit tomographischen Ansätzen ermittelt werden. Dazu wird eine Reihe von Messungen aus verschiedenen Richtungen durch den Abgasstrahl durchgeführt, um die räumlichen Ungleichmäßigkeiten in der Dichteverteilung detektieren zu können. Die Dichteverteilung eines Abgasstrahls, das mit der BOS-Methode vermessen und aus dem die Temperaturverteilung bestimmt wurde, ist in Abbildung 1 dargestellt.

Durch die Entwicklung einer Kopplung der BOS-Methode mit numerische Simulationen, soll nun eine detaillierte Auswertung des Temperaturprofils im Abgasstrahl ermöglicht, und damit für die Fehleranalyse an defekten Triebwerken eine Hilfestellung geboten werden. Prinzipiell können mit Hilfe der BOS-Methode Informationen über Defekte und Störungen in Brennkammer, Hochdruckturbine und Niederdruckturbine aus einer Messung der Dichtefeldverteilung hinter dem Triebwerk gewonnen werden. Weil die Auswirkungen der Schäden im Triebwerk auf die lokale Temperatur und damit auch auf den Abgasstrahl noch unbekannt sind und weil darüber hinaus Versuche am komplexen Bauteil (in diesem Fall Untersuchungen am realen Triebwerk) sehr aufwendig und teuer sind, wird vom Projektbeginn an mit Hilfe der CFD-Rechnungen (engl. computational fluid dynamics - numerische Strömungsmechanik) eine numerische Datenbasis geschaffen, mit dem Ziel die Vielzahl möglicher Defekte zukünftig simulativ handhaben zu können. Ist einmal ein bestimmter Schadensfall, ein Defekt oder eine Störung klassifiziert, lassen sich bei weiteren Messungen an anderen Triebwerken des gleichen Typs Rückschlüsse auf ähnliche Defekte ziehen. Für den praxisnahen Einsatz der zu entwickelnden Methode ist es erforderlich, das Verfahren flexibel an einer Vielzahl an verschiedenen Triebwerkstypen einsetzbar zu machen. Unterschiedliche Triebwerksmodelle besitzen zwar das gleiche Funktionsprinzip, weisen jedoch untereinander unterschiedliche Geometrien auf, die zu individuellen Fehlerausprägungen führen. Mit Hilfe

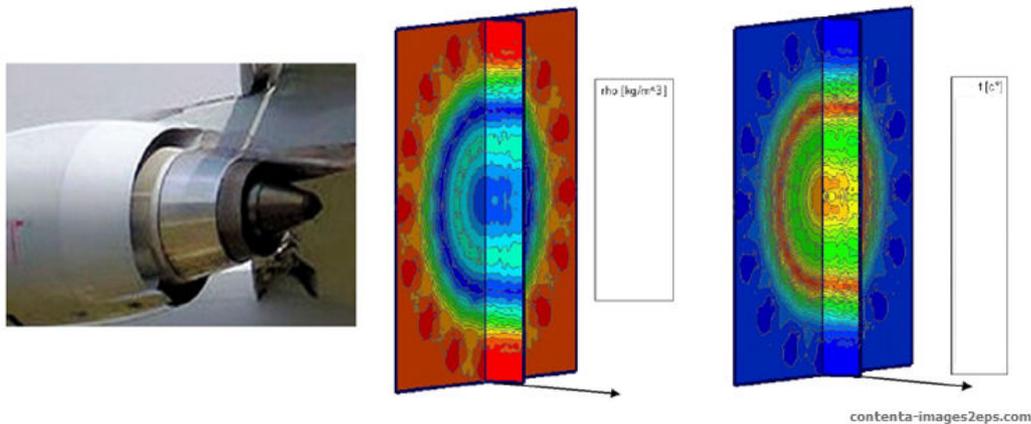


Abbildung 1: Dichte- und Temperaturverteilung eines mit der BOS-Methode untersuchten Abgasstrahls

der Simulationen wird es möglich, einmal erarbeitete Mechanismen und Analysen rechnerisch auf verschiedene Triebwerkstypen zu übertragen, so dass nicht für alle Triebwerkstypen aufwendige Messungen zur Klassifizierung typenspezifischer Schäden, Defekte oder Störungen durchgeführt werden müssen.

Im ersten Schritt werden hierzu instationäre 360°-Rechnungen einer Flugzeugturbine durchgeführt. Das bedeutet, dass hier nicht nur eine Simulation zu einem bestimmten Zeitpunkt durchgeführt wird sondern eine gesamte Drehung des Triebwerks simuliert wird. Dabei wird untersucht inwieweit sich unterschiedliche lokale Temperaturänderungen am Eintritt der Turbine, auf den Abgasstrahl auswirken. Für die Simulation wird das Programm TRACE verwendet. Dieses wird am Institut für Antriebstechnik des Deutschen Luft- und Raumfahrtzentrums (DLR) entwickelt und in Kooperation mit dem Triebwerkshersteller MTU Aero Engines sowie Hochschulen, u.a. dem Institut für Turbomaschinen und Fluid-Dynamik der Universität Hannover, fortlaufend weiterentwickelt.

Die durchzuführenden Simulationen sind aus verschiedenen Gründen sehr anspruchsvoll. Bisher wurde keine volle 360°-Simulation einer gesamten Turbine durchgeführt, so dass man sich hier nicht auf Erfahrungswerte stützen kann. Bei den üblichen CFD-Simulationen werden generell nur Ausschnitte gerechnet und unter der Annahme der Periodizität kann dann auf die gesamte Turbine bzw. Verdichter geschlossen werden. In dem hier präsentierten Projekt werden lokale Temperaturänderungen am Eintritt der Turbine integriert, so dass keine Periodizität mehr gegeben ist. Darüber hinaus ist noch nicht bekannt inwieweit sich die Temperaturunterschiede bis zum Austritt durchmischen. Somit ist es nicht möglich die Tur-

bine auf einen bestimmten Ausschnitt einzugrenzen, was eine Simulation der gesamten Turbine notwendig macht. Bei CFD-Simulationen werden die Strömungsmechanischen Gleichungen immer nur an bestimmten Punkten gelöst, die durch sogenannte Netze definiert werden. Da die gesamte Turbine simuliert wird, muss die Netzfeinheit vergrößert und damit die Anzahl der Punkte verkleinert werden. Dabei muss darauf geachtet werden, dass auf der einen Seite der Informationsverlust vernachlässigbar bleibt auf der anderen das Netz aber klein genug wird, so dass eine Simulation durchführbar ist. Daher muss in Voruntersuchungen nicht nur die notwendige Netzfeinheit sondern auch die, für die Simulation notwendigen, Randbedingungen erprobt und bestimmt werden. Die hier verwendeten Netze haben bis zu 100 Millionen Knoten, was insbesondere in Anbetracht der instationären Rechnungen, eine ressourcenintensive Simulation und Auswertung mit sich bringt.

Mehr zum Thema

1. www.sfb871.de
2. Goldhahn, E.; Seume, J.R. (2007): The Background oriented schlieren technique: sensitivity, accuracy, resolution and application to a three-dimensional density field. *Experiments in Fluids*, Vol. 43, Issue 2-3, pp. 241-249
3. Alhaj, O.; Seume, J.R. (2010): Optical Investigation of Profile Losses in a Linear Turbine Cascade. *Proceedings of the ASME Turbo Expo*, 14-18 June 2010, Glasgow, UK, GT2010-230166

Förderung

DFG-Sonderforschungsbereich 871 "Regeneration komplexer Investitionsgüter"

Die Wandlung von Energie ist eine Frage der Zeit Unsteady Work Optimized Turbine

J. Seume, M. Biester, M. Henke, Institut für Turbomaschinen und Fluid-Dynamik

Kurzgefasst

- Die Verminderung von Triebwerksemissionen ist eng mit der Verbesserung des Triebwerkswirkungsgrades verbunden.
- Das Verständnis von zeitabhängigen, verlustgenerierenden Effekten ist bislang gering.
- Das Projekt dient der Klärung der Interaktion von zeitabhängigen, verlustgenerierenden Effekten und deren Auswirkung auf die Emissionsraten.

Eine Minderung der Emissionen im Triebwerks- und Turbinenbau lässt sich in erster Linie durch eine Verbesserung des Wirkungsgrades realisieren. Die diesbezüglich existierenden Konzepte sehen eine Optimierung der Schaufelgeometrien in Hinblick auf die verlustgenerierenden Effekte vor. Die Identifizierung dieser Effekte ist Basis für effizientere Turbomaschinen. Der Großteil bisheriger Untersuchungen vernachlässigt jedoch die zeitliche Änderung des Strömungsfeldes. Dieser Bereich soll in diesem Projekt weiter untersucht werden.

Im Rahmen des durch das Luftfahrtforschungsprogramm des Bundesministeriums für Wirtschaft und Technologie geförderten Projektes LuFo IV werden am Institut für Turbomaschinen und Fluid-Dynamik (TFD) in Zusammenarbeit mit MTU Aero Engines GmbH Simulationen und später auch experimentelle Untersuchungen zur zeitlich veränderlichen Interaktion von rotierenden und stehenden Schaufelreihen in einer 1,5 stufigen Luftturbine durchgeführt. Die im Versuch verwendete Turbine besteht aus einer rotierenden Schaufelreihe (Rotor) sowie zwei stehenden Reihen (Statoren). Am Eintritt der Turbine steht Luft unter Druck zur Verfügung, am Austritt herrscht Umgebungsdruck. Durch diesen Druckunterschied kommt es zur Strömung, welche durch die Statoren und den Rotor strömt. In den Schaufelreihen wird die Luft so gerichtet, dass der Rotor eine Drehbewegung durchführt. Unmittelbar hinter den Schaufeln des Rotors kommt es zur Ausbildung eines Totwassergebietes. Die Geschwindigkeit der Strömung im Schatten der Schaufel ist daher langsamer als jene, welche ungestört zwischen zwei Schaufeln hindurch strömt. Dieser Effekt wird als Nachlauf einer Schaufel bezeichnet. Da der Rotor rotiert, bewegt sich die verlangsamte Strömung im

Nachlauf relativ zu dem stromab liegenden Stator und trifft an unterschiedlichen Positionen auf denselben auf. Ähnlich verhält es sich mit den Nachläufen des ersten Stators, welche auf die rotierende Beschauflung des Rotors treffen. Damit sind die Schaufeln wechselnden mechanischen aber auch aerodynamischen Belastungen ausgesetzt. Der Nachlauf bzw. der diesen charakterisierenden Geschwindigkeitsdefekt nimmt mit steigendem Abstand vom Verursacher ab, man spricht vom Ausmischen. Dieser Prozess ist stets verlustbehaftet. Durch die Umlenkung und Expansion des Fluids in den Schaufeln wird der Prozess des Ausmischens beeinflusst. Gleiches gilt für die Bewegung des Nachlauffluids. Dieses wird innerhalb der Schaufeln gestreckt und gestaucht, was zur Ausbildung überlagernder Störungen führt.

Neben den beschriebenen Nachlaufeffekten wird die Strömung in Turbomaschinen zusätzlich durch potentialtheoretische Effekte beeinflusst. Dieser Mechanismus beruht auf der Verdrängungswirkung der Schaufeln. Die zeitliche Varianz entsteht durch die relative Bewegung der Schaufelreihen zueinander. Während die Nachlaufeffekte ausschließlich in Strömungsrichtung wirken, beeinflussen potentialtheoretische Effekte sowohl stromauf als auch stromab das Druck- und Geschwindigkeitsfeld in einer Turbomaschine. Nachlauf- und Potentialeffekte überlagern sich und sind nicht direkt voneinander trennbar. Bei großen axialen Abständen zwischen den Schaufeln und niedrigen Strömungsgeschwindigkeiten können die Potentialeffekte oft gegenüber den Nachlaufeffekten näherungsweise vernachlässigt werden.

Ziel des Projektes ist das tiefgreifende Verständnis der räumlichen und zeitlichen Änderung der Ausmisch- und Potentialeffekte, deren Einfluss auf die Arbeitsleistung, die Verluste und den Wirkungsgrad. Durch intensive stationäre und instationäre Vermessung der Turbine mit Sonden und instrumentierten Schaufeln soll die Wirkung wesentlicher Einflussgrößen (Axialabstand, Betriebspunkt, Beschauflungstyp) detailliert erfasst werden.

Die optimale Nutzung messtechnischer Ressourcen soll durch numerische Untersuchungen, welche dem Experiment vorausgehen und dieses begleiten, gewährleistet werden. Weiter werden umfangreiche Datensätze für die Validierung und Weiterentwicklung des vom DLR entwickelte und in diesem Projekt verwendeten Strömungslöser TRACE geschaffen, um auf dem untersuchten Gebiet die Designfähigkeit zu erlangen. Die begleitenden numerischen Simulationen ermöglichen

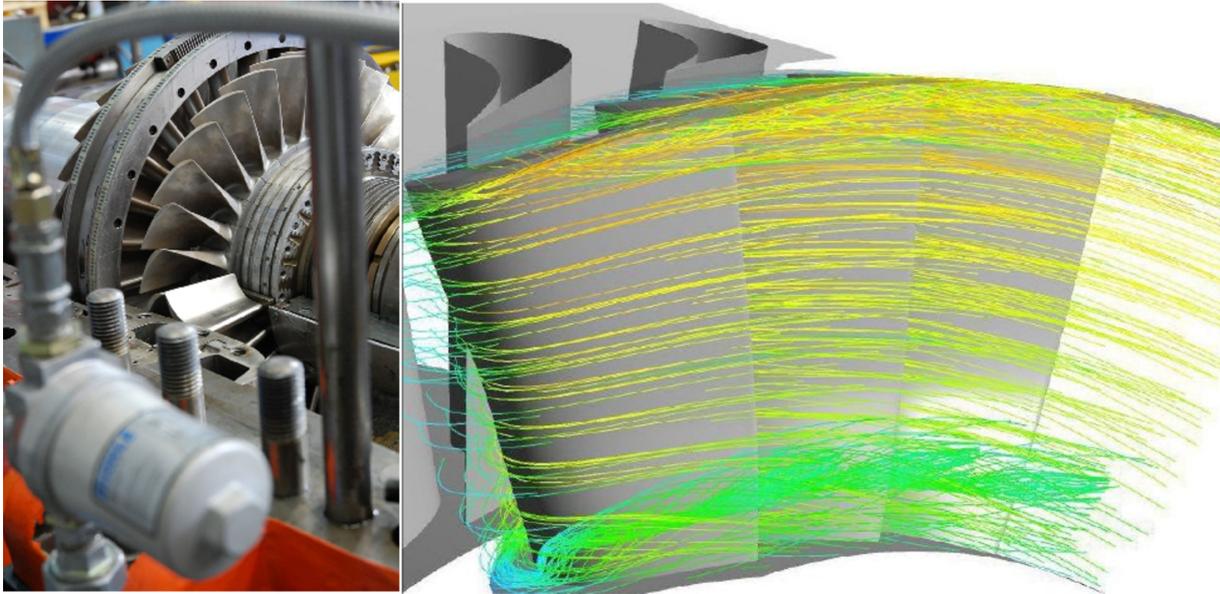


Abbildung 1: Versuchsturbine am Institut für Turbomaschinen und Fluid-Dynamik (TFD) der Leibniz Universität Hannover und berechnete Stromlinien innerhalb derselben. Die Färbung der Stromlinien entspricht der Höhe der Strömungsgeschwindigkeit. Rötliche Töne deuten auf hohe Geschwindigkeiten hin, bläuliche Töne auf niedrige.

im Zusammenspiel mit den Messergebnissen ferner die intensive Analyse der physikalischen Zusammenhänge bei der Interaktion von Nachlauf- und Potentialeffekten, z.B. hinsichtlich nachlaufinduzierter Transition.

Um alle Mechanismen ausreichend zu erfassen und möglichst wenig zu Idealisieren, ist eine hohe räumliche und zeitliche Auflösung des Rechengebietes notwendig. So werden die Grenzschichten sowohl auf den Schaufeloberflächen als auch an Nabe und Gehäuse voll aufgelöst (Low-Reynolds Modell). Dies ergibt bei einer Grenzschichtdicke im Mikro-Meter-Bereich in Kombination mit den hohen Reynolds-Zahlen des Betriebspunktes von $Re \approx 600\,000$ und der schrittweisen Annäherung an die Zellweite in Grenzschichtnähe ein sehr feinmaschiges Netz. Hierdurch steigt der entsprechende Bedarf an Speicher und Rechenzeit stark an.

Mehr zum Thema

1. Korakianitis, T.: On the Propagation of Viscous Wakes and Potential Flow in Axial-Turbine Cascades. *Journal of Turbomachinery*, Vol.115, 1993.
2. Yu, W.-S. und Lakshminarayana, B.: Numerical Simulation of the Effects of Rotor-Stator Spacing and Wake/Blade Count Ratio on Turbomachinery Unsteady flows. *Unsteady Flows in Aeropulsion*, Vol 40, 1994.

Förderung

Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie

Fortschrittliche Simulation turbulenter Strömungen an Verkehrsflugzeugen

Reynolds-Spannungs-Modellierung für komplexe 3D-Strömungsprobleme in der Flugzeug-Aerodynamik

R. Radespiel, R.-D. Cécora, Institut für Strömungsmechanik, TU Braunschweig

Kurzgefasst

- Reynolds-Spannungs-Turbulenzmodelle (RSM) gelten als vielversprechend für die Verbesserung numerischer Simulationen von komplexen Strömungen.
- Bei der im Projekt geplanten Weiterentwicklung eines RSM werden verschiedene Testfälle gerechnet, die einen großen Bedarf an Parallel-Rechenleistung enthalten.
- Insbesondere die subsonische Umströmung von Tragflügeln nahe des Maximalauftriebs konnte im bisherigen Projektverlauf durch ein RSM besser simuliert werden.

Die numerische Strömungssimulation spielt bei der Entwicklung neuer Flugzeuge eine wichtige Rolle. Um den Einfluss technischer Änderungen auf ein Flugzeug genau untersuchen zu können, sind bisher teure Flugversuche sowie Messungen in Windkanälen unerlässlich. Durch die zunehmende Qualität der numerischen Strömungssimulation können inzwischen am Anfang der Entwicklungsphase kostengünstig Parameter variiert werden. So kann eine Weiterentwicklung der numerischen Strömungssimulation beitragen, Kosten und Zeitspannen innovativer Entwicklungen zu reduzieren.

Die numerische Strömungssimulation in der Aerodynamik basiert zu einem großen Anteil auf der Lösung der Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (RANS) [1]. Bei der numerischen Lösung dieser Gleichungen müssen Annahmen über die turbulenten Schwankungen, die in technisch relevanten Strömungen auftreten, getroffen werden, da der Rechenaufwand einer direkten numerischen Simulation der Strömung zu hoch ist. Aus diesem Grund werden turbulente Schwankungen nur statistisch über den sogenannten Reynolds-Spannungstensor erfasst. Für die Ermittlung des Tensors werden Turbulenzmodelle verwendet, deren Qualität maßgeblich die Güte der erzielten Strömungslösung beeinflussen.

Ein viel verwendeter Ansatz von Turbulenzmodellen ist die Boussinesq-Hypothese, nach der die Elemente des Reynolds-Spannungstensors als proportional zur Scherrate der mittleren Strömung angenommen werden. Dieser von den sogenann-

ten Wirbelviskositätsmodellen (EVM) genutzte Ansatz liefert bei überschaubarem Rechenaufwand häufig robuste Ergebnisse. So können im Allgemeinen einfache anliegende Strömungen bereits sehr gut simuliert werden. Durch starke Vereinfachungen bei der Bestimmung der Reynolds-Spannungen kommt es jedoch bei komplexeren Strömungsproblemen zu Fehlbestimmungen, etwa bei der Vorhersage von Strömungsablösungen.

Bei einer Strömungsablösung kann die Luft der Kontur des umströmten Körpers nicht mehr folgen, so dass sich ein "Totwasser"-Gebiet bildet. Tritt dieses Phänomen auf der Oberseite eines Tragflügels auf, wird der erzielte Auftrieb drastisch reduziert, was den Bereich des sicheren Fliegens eines Flugzeuges einschränkt. Aus diesem Grund ist die Vorhersagegenauigkeit von Strömungsablösungen ein wichtiger Faktor im Entwicklungsprozess von Flugzeugen.

Eine größere Genauigkeit weisen die sogenannten Reynolds-Spannungsmodelle (RSM) auf, die wegen ihres erhöhten Rechenaufwandes industriell bisher wenig genutzt wurden. Ein RSM verzichtet auf die Boussinesq-Hypothese und löst stattdessen für jede Reynolds-Spannung eine eigene Transportgleichung. So werden Effekte wie beispielsweise die Anisotropie des Reynolds-Spannungstensors berücksichtigt. Dieser Gewinn wird allerdings durch einen steigenden Bedarf an Rechenkapazitäten erkauft, da neben den eingangs erwähnten Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen zusätzlich sieben Differentialgleichungen (bei Wirbelviskositäts-Modellen sind es lediglich zwei) für die Turbulenzmodellierung gelöst werden müssen. Durch die steigenden Rechenleistungen der letzten Jahre wächst daher das Interesse an Reynolds-Spannungsmodellen.

Am Institut für Strömungsmechanik wurde ein Reynolds-Spannungsmodell in den Strömungslöser DLR-TAU implementiert, das im hier beschriebenen Projekt getestet und verbessert wird. Zu diesem Zweck werden verschiedene Testfälle gerechnet und mit experimentellen Daten verglichen, um Aussagen über die Qualität der Simulation treffen zu können. Beispielsweise wurde die Umströmung des Höhenleitwerk-Profiles HGR-01 bei Anströmbedingungen simuliert, bei denen eine kleine Strömungsablösung nahe der Hinterkante auftritt. An diesem Testfall kann die erwähnte Vorhersagegenauigkeit von Strömungsablösungen

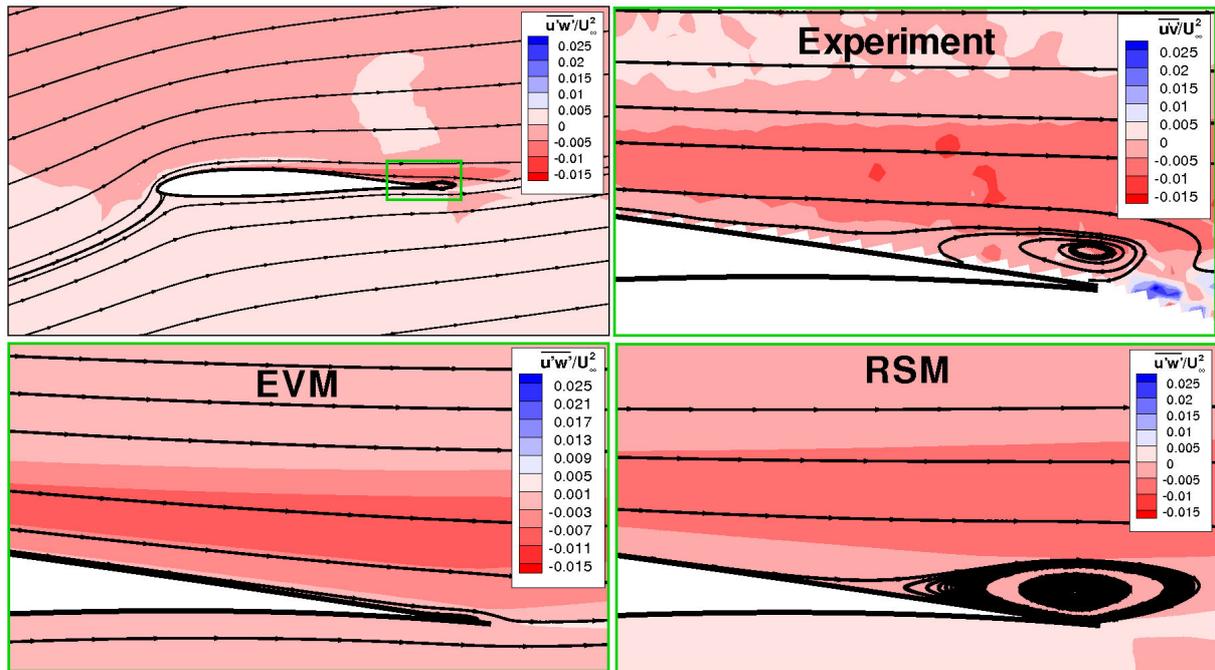


Abbildung 1: Umströmung des Höhenleitwerk-Profiles HGR-01; oben links: gesamtes Profil; oben rechts: experimentelles Ergebnis; unten links: Wirbelviskositätsmodell; unten rechts: Reynolds-Spannungsmodell

untersucht werden. Die Ergebnisse sind in Abbildung 1 zu sehen.

Verglichen werden hier Simulationen mit verschiedenen Turbulenzmodellen (unten links ein Wirbelviskositätsmodell, unten rechts ein Reynolds-Spannungsmodell) mit experimentellen Daten (oben rechts Geschwindigkeitsfelder aus der Particle Image Velocimetry). Es zeigt sich, dass die Hinterkanten-Ablösung nur von dem RSM korrekt dargestellt wird, während das Wirbelviskositätsmodell eine anliegende Strömung vorhersagt.

Nicht nur bei Strömungen mit Ablösung verspricht man sich Vorteile aus Reynolds-Spannungs-Modellen, so dass in diesem Projekt beispielsweise auch schallnahe Strömungen sowie komplexere 3D-Geometrien untersucht werden müssen. Weitere Ergebnisse sind zu finden bei Cécora et al. [2].

Mehr zum Thema

1. Wilcox, D. C.: *Turbulence Modelling for CFD.*, DCW Industries, La Canada, USA, 1998.
2. Cécora, R.-D., Probst, A. and Radespiel, R.: *Advanced Reynolds stress turbulence modeling of subsonic and transonic flows.*, International Symposium "Simulation of Wing and Nacelle Stall", Braunschweig, Germany, 2010.

Förderung

BMW-Verbandvorhaben LuFo IV "Computational Flight Testing - ComFliTe", Teilprojekt "Turbulenzmodellierung und reduzierte Modelle für aeroelastische Analysen und zur Lastenberechnung bei komplexen Flugzeugkonfigurationen"

Energieeffiziente Aggregate für die Eindampftechnik Berechnung von instationären Strömungen in Hochleistungsradialventilatoren

G. Brenner, Y. Yang, A. Lucius, Institut für Technische Mechanik, Technische Universität Clausthal

Kurzgefasst

- Radialventilatoren werden in der Brüdenkompression und in Eindampfanlagen zunehmend im Leistungsgrenzbereich zu Turboverdichtern eingesetzt.
- Daraus resultieren extreme Anforderungen an die Auslegung der Ventilatoren die mit klassischen Auslegungsmethoden nicht mehr zuverlässig realisierbar ist.
- Instationäre Berechnungen der turbulenten Strömung im Ventilator mittels CFD ermöglichen es, Einblicke in die relevanten Phänomene zu gewähren und das Betriebsverhalten sowie dynamische Lasten zuverlässig vorherzusagen.

Moderne Radialventilatoren werden zunehmend in Leistungsbereichen eingesetzt, die bislang den Turboverdichtern vorbehalten sind. Einsatzgebiete für diese Hochleistungsventilatoren finden sich in der Verfahrenstechnik, insbesondere der Eindampftechnik und Brüdenkompression, wenn Prozessgase komprimiert werden müssen. Das vornehmliche Ziel ist hier die Erhöhung des Druckverhältnisses, welches nur durch eine Steigerung der Umfangsgeschwindigkeit zu erreichen ist. Da die erforderliche Druckerhöhung den ventilatortypischen Grenzleistungsbereich überschreitet, ist die traditionelle Auslegung eines Hochleistungsventilators mit empirischen Korrekturfaktoren und Erfahrungswerten mit erheblichen Unsicherheiten behaftet. In Ventilatoren werden fast alle Bauteile aus geschweißten Blechen gefertigt. Diese Fertigungsverfahren bieten einen deutlichen Kostenvorteil gegenüber anderen Bauformen, sind aber anfälliger für Schwingung. Unter hoher Umfangsgeschwindigkeiten werden die Bauteile stark vorbelastet. Dazu wirken dynamische Lasten des Betriebsmediums, welche die Betriebssicherheit der Maschine gefährden.

Bei der Strömung in einem Radialventilator ändert sich die Strömungsrichtung im Laufrad von axial zu radial. Der Schaufelkanal wird in der Radialrichtung weiter gekrümmt, um einen angepassten Geschwindigkeitsverlauf im Laufrad zu realisieren. Durch die Geometrie des Laufrads und des Gehäuses resultiert ein Druck- und Geschwindigkeitsunterschied auf den Kanalseiten und es bildet sich ein Wirbel im Schaufelkanal aus. Weiterhin wirken die Coriolis- und Fliehkraft auf die

Strömung und führen zu einer weitergehenden Ungleichverteilung der Geschwindigkeit und des Druckes, was zu einer Verstärkung der Wirbelstruktur führt. Durch die Interaktion der Strömung zwischen Laufrad und Gehäuse ist diese prinzipbedingt instationär, bedingt durch die hohen Reynoldszahlen ist die Strömung im Ventilator hochgradig turbulent. Abhängig von Betriebsbedingungen, z.B. durch Drosselung, können weitere Strömungsinstabilitäten entstehen. Mit geeigneten numerischen Methoden können diese Phänomene wiedergegeben werden. Im Vergleich zu experimentellen Untersuchungen bietet die numerische Simulation den Vorteil, dass detailliertere Informationen über das Strömungsfeld verfügbar gemacht werden können.

Für die vorliegenden Simulationen wird ein dreidimensionales Rechengebiet definiert und vernetzt. Das Berechnungsgitter des kompletten Ventilators umfasst typischerweise 20 Millionen Elemente. Um die Instabilität des Strömungsfeldes erfassen zu können, sind instationäre Berechnungen erforderlich. Daraus resultieren extrem hohe Anforderungen an die Rechnerkapazität und die Notwendigkeit des parallelen Rechnens. Im Rahmen der vorliegenden Studie werden Berechnungen mit bis zu 128 Prozessoren durchgeführt. Die Turbulenzmodellierung basiert auf dem bewährten SST-URANS-(unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes) und dem SAS-(Scale-Adaptive Simulation)-Turbulenzmodell. Die beiden Modelle lösen die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen und geben eine zeitliche Lösung des Strömungsfeldes wider. Das SAS-Modell kann aus einem traditionellen Zweigleichungs-Modell entwickelt werden. Weil es die turbulente Struktur teilweise auflösen kann [1], ist das SAS-Modell im Vergleich zu URANS ein hochwertiges Turbulenzmodell. Ein Vergleich der beiden Modelle zur Vorhersage von Teillastinstabilitäten in einer Kreiselpumpe zeigt die Überlegenheit des SAS-Modells bei der Bestimmung der Anregungsfrequenzen [2].

In diesem Projekt wird das SST-SAS-Modell und das klassische SST-Modell von ANSYS CFX verwendet. Beide Modelle geben in guter Übereinstimmung mit Messungen die integralen Kennwerte des Ventilators (Druck- und Temperaturerhöhung) wider. Deutliche Unterschiede werden erkennbar, betrachtet man die Strömung im Detail. Hierzu ist in der Abbildung das λ_2 -Kriterium für die Detektion von Wirbelkernen ausgewertet. Man erkennt, dass das SST-Modell die grobe

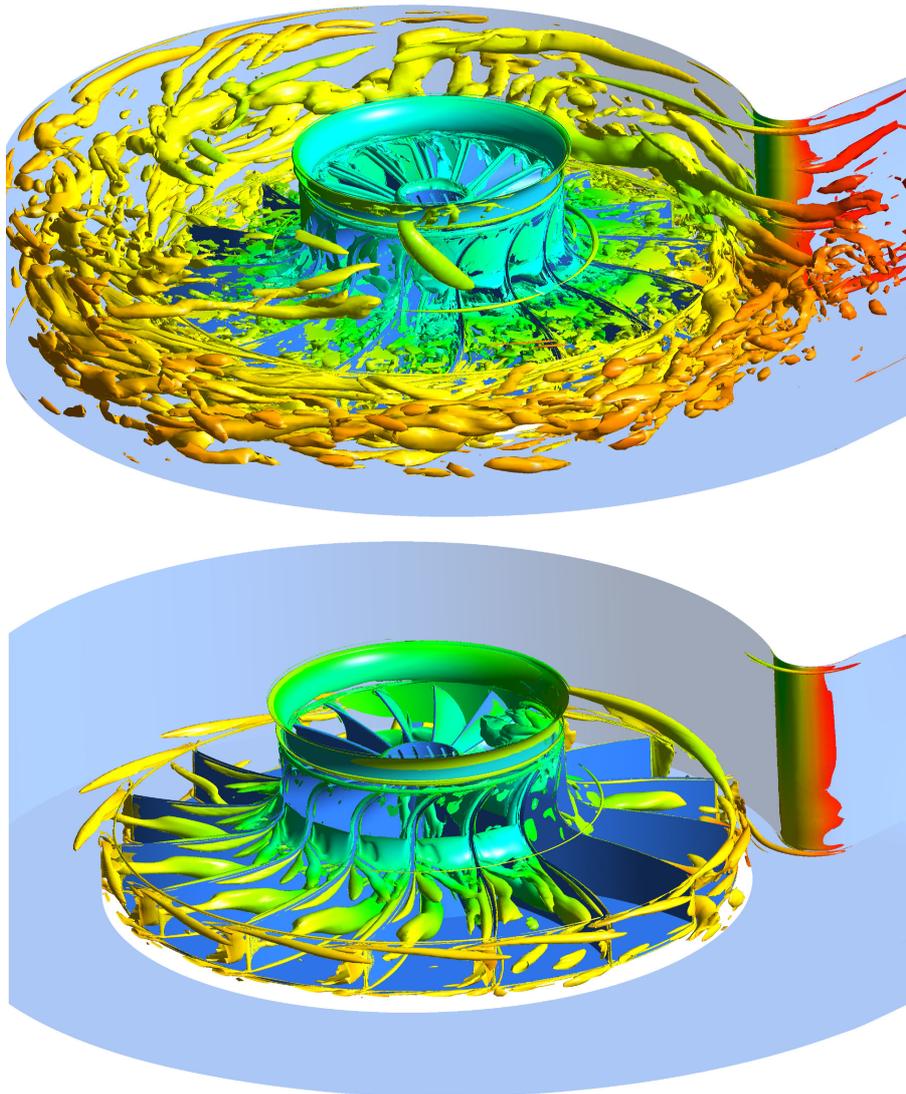


Abbildung 1: Vergleich der berechneten Wirbelstrukturen in einem Hochleistungsradialverdichter mit dem SAS-Modell (Oben) und dem SST-Modell (Unten), $\lambda_2 = -2,4 \cdot 10^6$.

Struktur der Wirbelentwicklung wiedergeben kann. Es ist aber nicht in der Lage, die kleinskaligeren Strukturen aufzulösen. Daraus resultiert, dass Anregungen des Laufrads durch dynamische Lasten nicht richtig beschrieben werden. Im Vergleich mit dem URANS-Modell benötigt das SAS-Modell allerdings ein deutlich feineres Gitter, woraus ein erheblicher Anstieg des Rechenbedarfs resultiert.

Mehr zum Thema

1. Menter, F.R., Kuntz, M., Vender, R., 2003: A Scale-Adaptive Simulation Model for Turbulent Flow Predictions, AIAA Paper 2003-0767.
2. Lucius, A., Brenner, G. 2010, Unsteady CFD Simulations Of A Pump In Part Load Conditions Using Scale-Adaptive Simulation, International Journal of Heat and Fluid Flow, 31, pp. 1113-1118.

Förderung

Zentrales Innovationsprogramm Mittelstand (ZIM)

Design of Leading and Trailing Edge Flow Control Numerical Simulation of Jet Actuation over Swept High Lift Airfoil

R. Radespiel, S. Mahmood, Institut für Strömungsmechanik, Technische Universität Braunschweig

Abstract

- Numerical design of leading and trailing edge flow control over swept arrangement of high lift airfoil.
- The design process involves variation of flow control parameters along with the optimum location of the jet actuators and use of the numerically optimized flow control settings to perform new experiments in a wind tunnel.
- The Reynolds-averaged Navier-Stokes equations are computed using DLR TAU Code on 512 to 1024 CPU's.

The use of flow control devices like pneumatic jet actuators have been studied quite often in the past to delay the stalling of an airfoil. One concept is to exploit the interaction between turbulent boundary layers and longitudinal vortices generated with the device. The current work addresses the use of jet actuators for leading and trailing edge flow control over the swept arrangement of a high lift airfoil. To date there have been no detailed numerical studies of the interaction of a longitudinal vortex with such an arrangement. This is the first time that these flow actuators are designed for a swept high-lift wing and this task is clearly at the edge of current computational capabilities.

The current status of project covers the numerical design of leading edge flow control over the swept airfoil. This activity is of challenging nature due to difficulties to compute leading edge type stall. The actuator geometries for actuation at leading edge of swept airfoil have been evaluated in terms of the variation of spanwise distance between the actuators, favorable and unfavorable rotation of the vortices with reference to the sweep angle β and optimum size of the actuator relative to the boundary layer.

The RANS computations for the present activity have been performed by the DLR TAU code. The numerical efficiency of the DLR TAU code has been thoroughly tested with success on the HLRN parallel computing centre. The DLR TAU code [1],[2] calculates the three-dimensional compressible Reynolds-averaged Navier-Stokes equations on unstructured or hybrid grids. The code solves different types of grids ranging from hybrid meshes to fully hexahedral cells. It also provides

the option to accelerate convergence using multi-grid algorithm accompanied by low Mach number preconditioning.

The numerical setup involves the use of 2D grids to simulate the infinite swept airfoil for the baseline (no flow control) case by imposing spanwise periodic boundary condition along with the sweep angle β to account for the swept airfoil. For leading edge flow control cases fully structured hexahedral 3D grids composed of $13.0 \cdot 10^6$ million grid points have been used to simulate the effect of varying jet actuator parameters. The flow control cases resolve a single actuator with spanwise periodicity to evaluate the effect of jet actuators. The flow control used steady state blowing via a special actuation boundary condition available in the solver. The numerical computations used 512 to 1024 CPU's to analyze the jet actuators. Turbulence transport was simulated using the Menter's Shear Stress turbulence model [3] as it gives better prediction of maximum lift coefficient and proved to be quite useful in vortical flows [4],[5].

The current numerical simulation with baseline flow predicted leading edge type stall. The flow control simulations with leading edge actuation proved to be useful in suppressing the leading edge type stall. Fig. 1 shows numerical representation of the leading edge flow control with favorable rotation resulting in longitudinal vortices over the upper surface of the swept airfoil. The upper part of the figure shows the hexahedral grid in the periodic plane along with the numerical display of the favorable longitudinal vortices colored by normalized u-velocity component using vorticity criteria. The lower part of the figure shows the leading edge type stall with baseline flow and stall suppression obtained with the leading edge flow control. The future work of this project involves the numerical design of jet actuator for trailing edge flow control that is of less complex nature, since the boundary layer is thicker in this region. These computations will involve the variation of skew angle, optimum size relative to the boundary layer and optimum orientation. Final phase of this activity will include coupling of Unsteady RANS computations for the leading and trailing edge flow control to validate the results with the experiments.

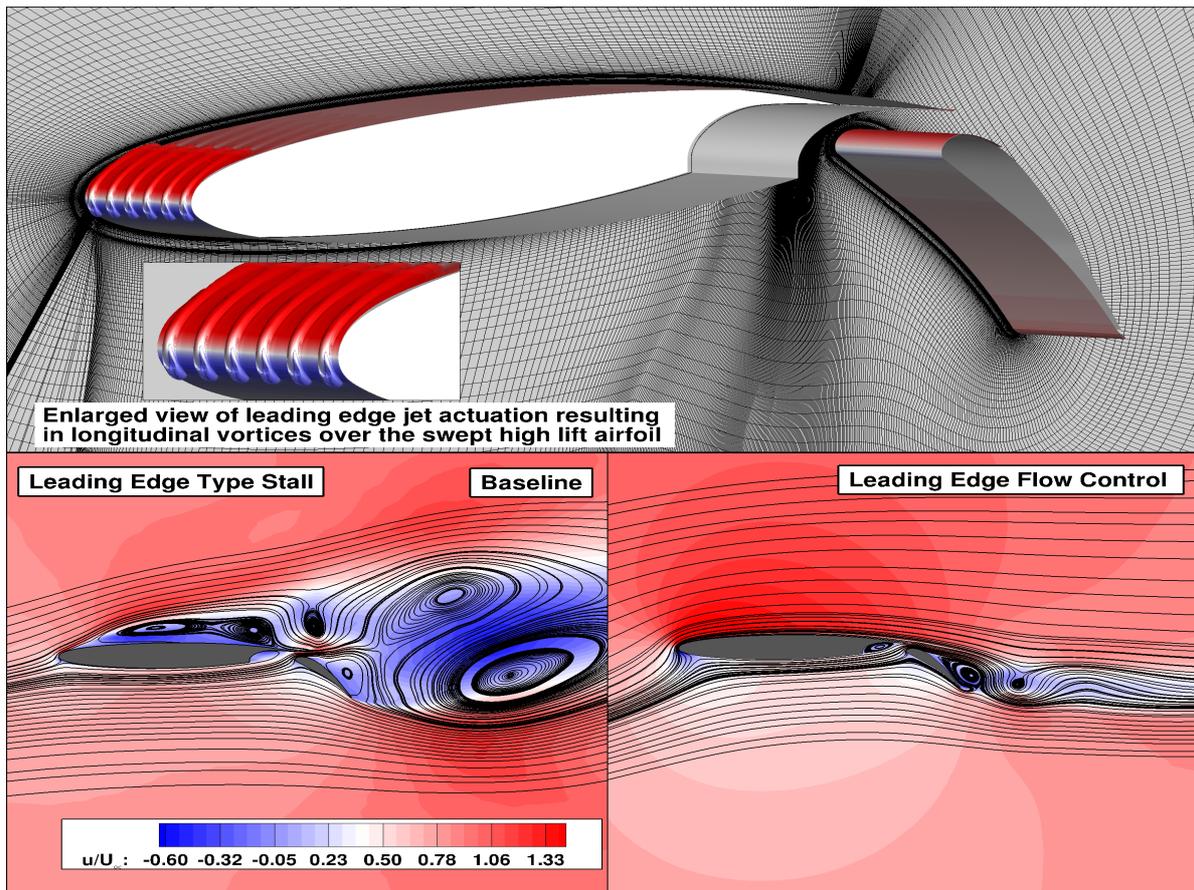


Figure 1: Top figure shows the identification of longitudinal vortices using vorticity criteria colored by normalized u -velocity component due to leading edge perturbation. Two bottom figures show the effect of stall suppression due to leading edge flow control in comparison with the baseline flow producing leading edge type stall at an angle of attack of 9.5° .

More Information

1. KROLL, N., ROSSOW, C.-C., SCHWAMBORN, D., BECKER, K., HELLER, G.: *MEGAFLOW - A Numerical Flow Simulation Tool for Transport Aircraft Design*. ICAS Congress 2002, Toronto, 09.-13.09.2002, ICAS, CD-Rom, S. 1.105.1-1.105.20, 2002.
2. SCHWAMBORN, D., GERHOLD, T., HEINRICH, R.: *The DLR TAU-Code: Recent Applications in Research and Industry*. In: P. Wesseling, E. Oate, J. Piaux (Eds), ECCOMAS CFD, Egmond aan Zee, The Netherlands, 2006.
3. MENTER, F.R.: *Zonal two-equation $k-\omega$ turbulence models for aerodynamic flows*. AIAA Paper, AIAA – 93 – 2906 (1993).
4. MAHMOOD, S.; RADESPIEL, R.: *RANS simulation of jet actuation in a boundary layer flow using Chimera grids*. Deutscher Luft- und Raumfahrtkongress, 08 – 10 September 2009, Aachen, Germany.
5. PETER SCHOLZ, SAQIB S. MAHMOOD, MARCUS CASPER, ROLF RADESPIEL: *Experimental and Numerical Investigations on the control of Airfoil Stall using Vortex Generator Jets*. AIAA 2010-4250, 5th Flow Control Conference 28 June - 1 July 2010, Chicago, Illinois.

Funding

European Union LEBBox-JTI-CS-SFWA-01-003(CLEANSKY), Joint Technical Initiative for Aeronautics and Air Transport

Ablösungen aufgelöst - Einblicke in instabile Strömungen in Kreiselpumpen

Zeitaufgelöste Simulation von abgelösten Strömungen in Strömungsmaschinen mit Turbulenz auflösenden Modellen

G. Brenner, A. Lucius, Institut für Technische Mechanik, TU Clausthal

Kurzgefasst

- Instabile Strömungszustände, besonders im Teillastbereich von Strömungsmaschinen, führen zu Fluktuation von Druck und Geschwindigkeit.
- Diese Fluktuationen können Schwingungen an der Pumpe auslösen, wodurch es zu starker Geräuschbildung sowie zu Schäden an der Maschine kommen kann.
- Die zeitliche und räumliche Entwicklung der instabilen Strömung in der Maschine wird durch ein Rechnermodell abgebildet und untersucht. Dadurch werden Einblicke in die Natur des Phänomens möglich.
- Viele Modelle zur Beschreibung turbulenter Strömungen sind für diesen Anwendungsfall nicht geeignet. In unserem Projekt wird das Potential von turbulenzauflösenden Modellen im Vergleich zu Standard-URANS-Modellen zur Erfassung sensitiver Größen im Teillastbereich dargestellt.

Strömungsmaschinen zur Förderung von Flüssigkeiten oder Gasen sind aus dem täglichen Leben nicht wegzudenken. Eingesetzt werden die Maschinen zur Wasserversorgung, Heizung, Klimatisierung u.v.m. Damit die Maschinen optimal arbeiten können, werden sie für einen bestimmten Betriebspunkt d.h. Fördermenge ausgelegt. Die meisten Anwendungen erfordern aber eine Regelung der Fördermenge, z.B. eine Umwälzpumpe für die Heizungsanlage. Die Pumpe muss an sehr kalten Wintertagen ein Vielfaches der Wassermenge im Vergleich zum milden Frühling bewegen. Daher wird die Pumpe in ca. 75 % der Einsatzzeit mit niedrigen Fördermengen deutlich unterhalb des optimalen Betriebspunktes gefahren [1]. In diesem sogenannten Teillastbetrieb kommt es zur starken Verwirbelungen der Strömung im Schaukelkanal der Pumpe, die Strömung löst ab. Bei sehr niedriger Fördermenge ist das Ablösegebiet nicht mehr stabil, sondern läuft mit einer klar messbaren Umlaufgeschwindigkeit relativ zum Lauf rad um. Man nennt dieses Phänomen daher auch „rotating stall“ bzw. rotierendes Abreißen. Es ist vergleichbar mit dem Strömungsabriss

an einem Tragflügel bei hohem Anstellwinkel, das Abrissgebiet bewegt sich allerdings von einer Schaufel zur nächsten. Durch das Umlaufen der abgerissenen Strömung wirken auf die Beschaukelung stark schwankende Strömungskräfte, strömungsinduzierte Schwingungen sind die Folge. Zudem kann sich die instabile Strömung durch eine verstärkte Lärmbelastung bemerkbar machen.

Das Ziel dieser Arbeit ist es, diese komplexe Strömung möglichst genau vorherzusagen. Ein Vergleich mit hochwertigen experimentellen Daten zeigt, ob das Rechenmodell in der Lage ist, die Strömung mit ausreichender Genauigkeit abzubilden. Eine Schlüsselrolle spielt dabei die Modellierung der turbulenten Strömung. Es sind zwar eine Vielzahl von Turbulenzmodellen entwickelt worden und z.T. seit Jahrzehnten im Einsatz, aber nur wenige sind für diesen Anwendungsfall geeignet. Es ist im Prinzip möglich, komplett auf Modellierung zu verzichten, und jeden Wirbel der sich bildet mit einem Rechengitter aufzulösen. Die Gitterweite ist dann allerdings im μ m Bereich, und die Zahl der Gitterpunkte wäre für die heute verfügbaren Großrechner bei weitem zu groß. Es hat sich aber herausgestellt, dass nicht alle, sondern nur die großen Wirbel, welche die meiste kinetische Energie in sich tragen, für eine genaue Simulation mit dem Gitter aufgelöst werden müssen. Man nennt diese Technik daher auch „Large Eddy Simulation“ (LES). Welche Abmessungen diese „großen“ Wirbel aufweisen, ist von vielen Parametern wie z.B. Strömungsgeschwindigkeit, Fluideigenschaften und Abmessungen der Pumpe abhängig und beträgt im vorliegenden Fall die Größenordnung von einigen Millimetern in der freien Strömung, in der Nähe fester Wände sind die Wirbel allerdings deutlich kleiner. Um die Anzahl der Gitterpunkte weiter zu reduzieren, wird daher ein etwas anderer Ansatz gewählt: die Strömung an der Wand wird komplett modelliert, im wandfernen Bereich werden große Teile der turbulenten Bewegung mit den Gitter aufgelöst. Man spricht daher auch von einem Turbulenz auflösendem Modell. Vergleiche mit einfacheren Standard Modellen werden durchgeführt. Die im Rahmen dieses Projektes verwendeten Gitter haben 5 - 15 Millionen Gitterpunkte, damit ist die parallele Simulation mit einer großen Anzahl von Prozessoren unerlässlich. Bei der Verwendung von 96 Prozessoren dauert die Simulation eines Falles immer noch mehrere Wochen.

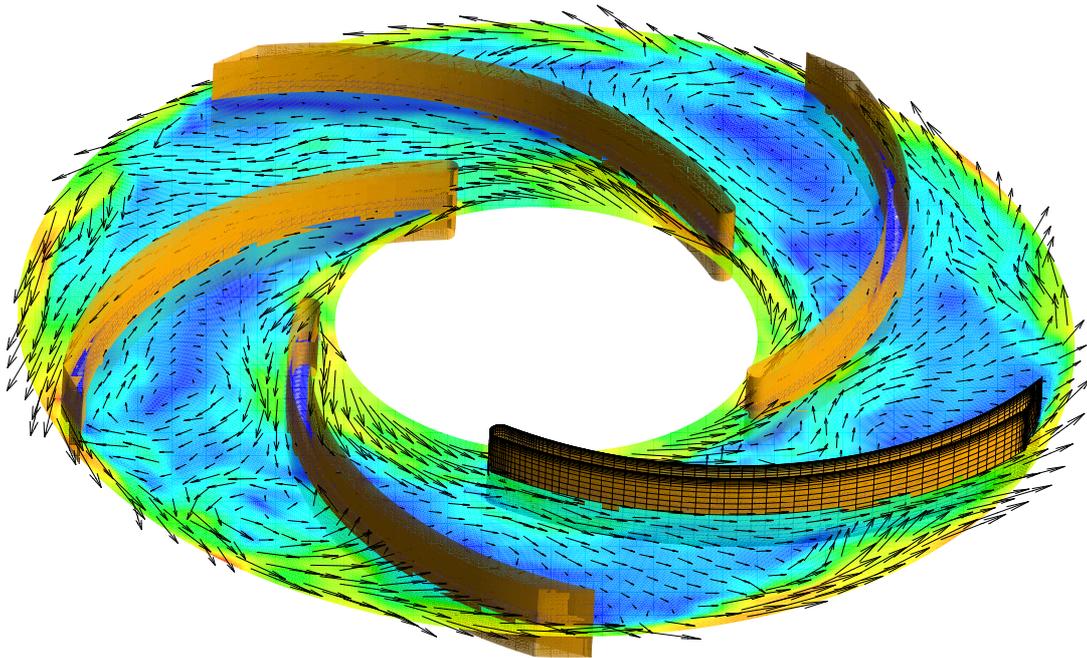


Abbildung 1: Das Bild zeigt das Strömungsfeld nach 10 Umdrehungen des Rotors. Die Visualisierung zeigt den Betrag der Geschwindigkeit in der Mitte der Beschauelung, die Richtung der Strömung ist durch Vektorpfeile dargestellt. Man erkennt die großskaligen Wirbelgebiete in mehreren Schaufelkanälen. Auf einer Schaufel ist die Größe der Gitterzellen angedeutet.

Erste Ergebnisse zeigen die Überlegenheit von Turbulenz auflösenden Modellen gegenüber Standard Modellen insbesondere im Hinblick auf die Berechnung der Umlaufgeschwindigkeit des rotating stall [2]. Die genaue Kenntniss der Umlauffrequenz ist wiederum bei der Auslegung von großer Bedeutung. Damit können bereits während des Designprozesses Schwingungsprobleme im späteren Betrieb vermieden werden. Die Methode ist daher gut geeignet, einen Entwurf vor dem Bau eines Prototypen zu überprüfen. Für weitreichende Variationen von geometrischen Parametern z.B. im Sinne der Optimierung des Wirkungsgrades ist die Methode auf Grund der langen Rechenzeit nicht geeignet.

Eine genaue Berechnung der instationären Strömung gewährt außerdem tiefe Einblicke in die Entwicklung der Abreißzonen und deren Bewegung. Es zeigt sich z.B. dass die Ablösung stark von der Spaltströmung zwischen Laufrad und stehendem Gehäuse beeinflusst wird. Hier liegt großes Potential zur aktiven Beeinflussung der Stabilität der Strömung in der Maschine.

Mehr zum Thema

1. F.-H. Wurm: Systemintegration von Pumpen, Internationales Pumpenanwenderforum Karlsruhe, 2004.
2. A. Lucius, G. Brenner: Unsteady CFD simulations of a pump in part load condition using scale adaptive simulation, International Journal of Heat and Fluid Flow Vol 31, 2010, pp 1113 - 1118.

Förderung

Arbeitsgemeinschaft industrieller Forschungsvereinigungen (AiF), Projekt 16406 BG/1

Numerisches Störfeuer

Numerische Simulationen zur Wirkungsweise laserinduzierter Beeinflussungsmethoden für Hochgeschwindigkeitsgrenzschichten

R. Radespiel, D. Heitmann, Institut für Strömungsmechanik, TU Braunschweig

Kurzgefasst

- Beim Wiedereintritt treten große Wärmelasten an Raumfahrzeugen auf.
- Diese lassen sich nicht genau abschätzen und ein Teil der Unsicherheit resultiert aus ungenauen Vorhersagen des Grenzschichtumschlages von laminar zu turbulent. Daher werden hier die zur Transition führenden Mechanismen an einem generischen Modell untersucht.
- Die Transition ist Folge des Anwachsens und der Entwicklung von Instabilitätswellen in der Grenzschicht.
- Derartige Wellen können durch Einbringen künstlicher Störungen numerisch und experimentell erzeugt werden. Hier werden kleine Explosionen im Strömungsfeld generiert.
- Die Simulationen dieses Vorgangs sind aufgrund der vielen beteiligten kleinskaligen Einflussgrößen sehr rechenaufwendig.

Das Strömungsfeld eines umströmten Körpers läßt sich in zwei Bereiche einteilen, den Bereich der Außenströmung, in dem die Viskosität des Gases vernachlässigbar ist, und einen dünnen, wandnahen Bereich, genannt Grenzschicht, in dem der viskose Austausch von Impuls und Energie eine wesentliche Rolle spielt. In der Grenzschicht fällt die Geschwindigkeit der Strömung von dem Wert der Außenströmung steil auf den Wert Null an der Wand ab. Ferner führt bei einer Hyperschallströmung die viskose Dissipation zur Bildung einer Temperaturgrenzschicht und unter realen Flugbedingungen zu einer starken Aufheizung, weshalb ein Hitzeschutz vorgesehen werden muss. Wird die Wand turbulent umströmt ist der Wärmeeintrag wesentlich größer als bei einer laminar umströmten Wand und die ungenauen Vorhersagen des Umschlagpunktes laminar/turbulent bedingen ein überdimensioniertes und damit schwereres Hitzeschutzsystem. Trotz jahrzehntelanger Bemühungen kann der Umschlagpunkt nur ungenau vorhergesagt werden und die zur Transition führenden Mechanismen sind insbesondere für Strömungen im hohen Überschallbereich bis heute nicht geklärt. Daher werden in diesem Projekt an einem generischen Kegelmodell diese Mechanismen untersucht.

Das Transitionsszenario besteht aus drei Schritten: 1) Rezeptivität, in diesem Schritt gelangen kleine Störungen der Anströmung in die Grenzschicht 2) dem exponentiellen Anwachsen einzelner Moden in der Grenzschicht. Dieser Abschnitt kann mit einer vereinfachenden Stabilitätstheorie beschrieben werden. 3) dem nicht-linearen Zusammenbruch der Störung zu einem turbulenten Gebiet. Alle drei Schritte sind für eine Hochgeschwindigkeitsgrenzschicht komplizierter als für den Niedergeschwindigkeitsbereich, wo die Fluidichte näherungsweise konstant ist. Insbesondere treten im Hyperschall zusätzliche Instabilitäten, sogenannte Mack'sche Moden auf, und die Zahl freier Parameter in den Stabilitätsbetrachtungen ist ungleich größer als bei Unterschallströmungen.

Insbesondere die ersten beiden Schritte der Transition werden in diesem Vorhaben sowohl experimentell als auch numerisch untersucht. Dazu werden künstliche Störungen in das Strömungsfeld eingebracht. In den Experimenten wird ein gepulster Laser auf einen Punkt oberhalb des Modells fokussiert. Wenn während des Laserpulses eine bestimmte Energiedichte überschritten wird, ist die Luft nicht länger transparent und die Laserstrahlung wird absorbiert. Dies führt zur Bildung eines Plasmas, welches in kurzer Zeit wieder rekombiniert, so daß nach wenigen Mikrosekunden lediglich ein erhitztes Gasvolumen und eine sich ausbreitende Stoßwelle übrig bleiben. Diese Stoßwelle trifft auf die Grenzschicht und stellt hier eine pulsförmige Anregung dar, welche im weiteren Verlauf zur Bildung einer Instabilitätswelle führt, siehe [1].

In den Experimenten sind allerdings nur Messungen an diskreten Positionen auf der Modelloberfläche möglich. Somit läßt sich beispielsweise der Rezeptivitätsprozess nur indirekt beobachten. Aus diesem Grund wird das Experiment zusätzlich mittels direkter numerischer Simulationen (DNS) nachgestellt. Unter einer DNS versteht man die numerische Lösung der vollständigen Navier-Stokes-Gleichungen. Dies geschieht bei dem verwendeten Strömungslöser [2] auf einem Rechnernetz, bei dem die einzelnen Punkte diskrete Abstände zu ihren Nachbarpunkten haben. Um auch kleinskalige Strömungsstrukturen aufzulösen sind sehr kleine Zellgrößen und Zeitschrittweiten erforderlich, so dass ein sehr hoher Rechenaufwand erforderlich ist. Die Simulationen ermöglichen zum einen genauere Einblicke als die Messungen an einzelnen Punkten im Experiment und zum anderem erlaubt

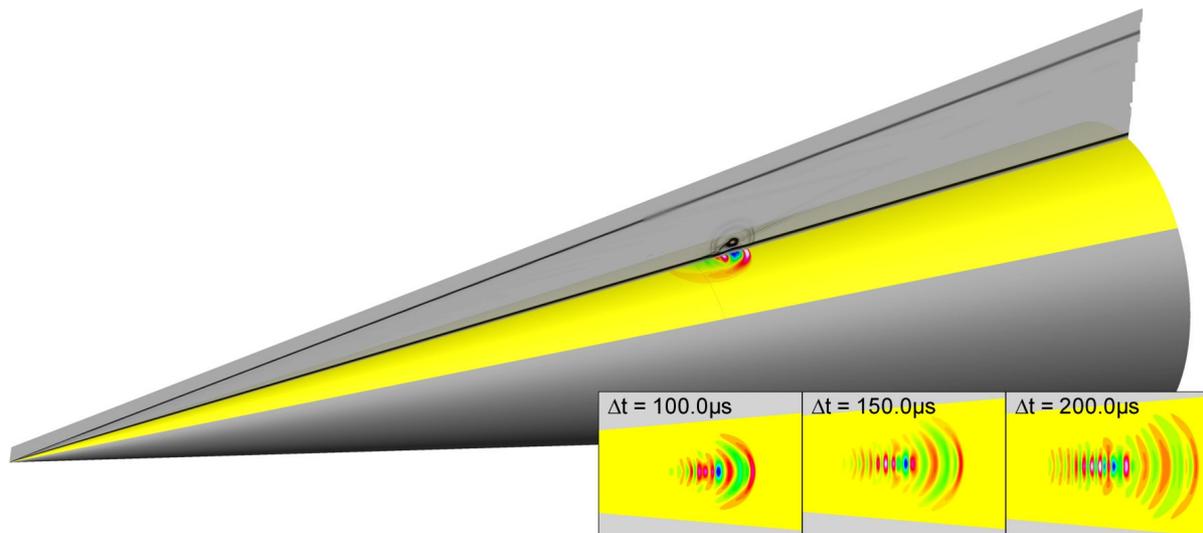


Abbildung 1: Umströmung eines 7°-Halbwinkelkegels mit Mach 6. Berechnet wurde ein 90° Segment. Dargestellt ist zum einen der Dichtegradient und zum anderen die Schwankungen des Oberflächendrucks. Aus der pulsartigen Anregung entwickeln sich im späteren Verlauf 2D Strukturen, welche die Grenzschichtinstabilität der zweiten Mode darstellen.

es dieser Ansatz, verschiedene Parametervariationen effizienter durchzuführen.

Eine Simulation besteht aus drei Schritten. Zunächst wird das stationäre Strömungsfeld um das Modell berechnet. In diese Lösung wird im zweiten Schritt eine sehr kleine Störung eingefügt. Diese wurde mittels einer gasdynamischen Ähnlichkeitslösung für Explosionen bestimmt und entspricht sehr genau einer Laser-generierten Störung. Als letzter Schritt folgt eine instationäre Rechnung, aus der die Interaktion der Stoßwelle mit der konischen Grenzschicht und die Entwicklung der induzierten Störung und Grenzschichtinstabilität folgt.

Die Abbildung zeigt einige Ergebnisse einer solchen Rechnung. Dargestellt ist der Dichtegradient in einer wandnormalen Ebene. Sichtbar ist zum einen der von der Kegelspitze ausgehende Verdichtungsstoß. Der Rand der Grenzschicht stellt sich als dunkler Streifen in Wandnähe dar. Ferner sind die sphärische Stoßwelle, die Reflektion an der Wand und das heiße Zentrum der Störung sichtbar. Die Druckfluktuationen an der Wand sind als farbige Kontur dargestellt. Das große Bild entspricht einem Zeitpunkt von 40 μs nach dem Laserpuls. Auf der Oberfläche stellt sich die ursprünglich sphärische Störung durch die Überlagerung mit der Mach 6 Strömung als elliptische Form dar. Die in Strömungsrichtung laufende Stoßwelle ist dabei deutlich stärker als die stromauf laufende. Bereits hier haben sich durch die Reflektion an der Wand neben der Stoßwelle weitere Strukturen im Zentrum gebildet. Im weiteren Ver-

lauf schwächt sich die Stoßwelle immer mehr ab und es entwickeln sich 2D Strukturen, welche den in diesem Projekt betrachteten Instabilitätswellen der Mack'schen Mode entsprechen. Die Amplitude dieser Strukturen steigt dabei immer weiter an und die räumliche Erstreckung nimmt im Einklang mit natürlichen Wellenpaketen zu. Wir hoffen, die künstlichen Störungen so weit zu charakterisieren, daß wir sie zukünftig in komplexe Grenzschichten einbringen und die Wechselwirkungen mit anderen Moden untersuchen können.

Mehr zum Thema

1. Heitmann D., Radespiel R., Kähler C.: Investigation of the response of a hypersonic 2D boundary layer to controlled acoustic disturbances, AIAA-2010-536, 48th AIAA Aerospace Sciences Meeting Including the New Horizons Forum and Aerospace Exposition, Orlando, Florida, Jan. 2010.
2. Schwamborn D., Gerhold T., Heinrich R.: The DLR TAU-Code: Recent Applications in Research and Industry, In: P. Wesseling, E. Oate, J. Piaux (Eds), ECCOMAS CFD, Egmond aan Zee, The Netherlands, 2006.

Förderung

Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

Systemspezifische Turbolader-Schmierfilmdissipation

Systemspezifische Schmierfilmdissipation in den radialen und axialen Lagerstellen von Abgasturboladern unter realen Betriebsbedingungen mit unterschiedlichen Ölzuführungsrandbedingungen

J. Seume, H. Rätz, Institut für Turbomaschinen und Fluid-Dynamik-TFD, Leibniz Universität Hannover

Kurzgefasst

- Der Gesamtwirkungsgrad thermischer Turbomaschinen, auch z.B. Abgasturboladern (ATL) wird aufgeteilt in die Komponentenwirkungsgrade für Turbine, Verdichter und den mechanischen Wirkungsgrad.
- Die aerodynamischen Wirkungsgrade der Turbine und des Verdichters lassen sich hinreichend genau aus thermodynamischen Messgrößen bestimmen.
- Eine exakte Vorausberechnung der mechanischen Verluste ist zurzeit noch nicht möglich. Weiterhin ist die Aufteilung der in den Gleitstellen der Rotorlagerung umgesetzten Verlustleistung nicht bekannt.
- Es besteht erheblicher Forschungsbedarf, da zurzeit weder systemspezifische Einflüsse auf das Reibungsverhalten der Rotorlagerung noch für den Energieumsatz relevante Schmierfilmeffekte berücksichtigt werden können.
- Bestimmung der strömungsbedingten Rotorkräfte als eine Randbedingung durch numerische Simulationen (CFD) zur Ermittlung der Belastungskräfte in den Lagerstellen.
- Experimentelle Ermittlung der thermophysikalischen Randbedingungen an den Lagerstellen des Turboladers auf einem Turboladerprüfstand sowie Experimentelle Untersuchungen der Schmierfilmdissipation zur Ermittlung von Daten zur Validierung und Verifikation der neuentwickelten Berechnungsverfahren.

Thermische Turbomaschinen kleiner Bauweise, z.B. Abgasturbolader (ATL), müssen zum Erreichen eines guten Wirkungsgrades mit sehr hohen Drehzahlen betrieben werden. Die Rotoren werden häufig, insbesondere bei hohen Drehzahlen, in Gleitlagern gelagert. Gleitlager besitzen gegenüber Wälzlagern aufgrund ihrer Steifigkeits- und Dämpfungseigenschaften ein besseres Stabilitätsverhalten, das bei Wälzlagern nur über aufwändige konstruktive Maßnahmen (z.B. Quetschöldämpfer) zu erreichen ist. Oberhalb einer bestimmten Grenzdrehzahl, die von Lager-

und Systemparametern abhängt, werden die Rotoren instabil, d.h. es kommt zu selbsterregten Schwingungen, die zu einem Versagen des Systems führen.

Zum Erreichen des Forschungsziels sollen theoretische und experimentelle Untersuchungen durchgeführt werden. Hierzu ist eine detaillierte theoretische Prozessanalyse zur Formulierung neuer Systemrandbedingungen erforderlich. Mit den so entstehenden Berechnungsmodulen können die maßgebenden Kennwerte der Lagerung wie z.B. die Schmierfilmdissipation ermittelt werden. Mit den gewonnen Erkenntnissen soll ein geeignetes Nährungsverfahren abgeleitet werden. Das Institut für Turbomaschinen und Fluid-Dynamik-TFD der Leibniz Universität Hannover liefert auf Basis numerischer Simulationen (CFD=Computational Fluid Dynamics, deutsch Numerische Strömungssimulation) zweier ausgeführter Turbolader ein theoretisches Modell für die Belastungskräfte der Lagerstellen. Zudem werden am TFD eine experimentelle Prozessanalyse zur genauen Bestimmung der thermophysikalischen Randbedingungen auf dem bestehenden Heißgasprüfstand, sowie Messungen zur Validierung und Verifikation der neuentwickelten Berechnungsalgorithmen auf einem geplanten, neuen Prüfstand durchgeführt.

Das Ziel der numerischen Untersuchung ist die Berechnung der Rotorkräfte, die aufgrund der Druckgradienten des strömenden Fluids auf der Rotoroberfläche hervorgerufen werden. Zu diesem Zweck sind stationäre sowie instationäre Simulationen notwendig. Dabei erfordert insbesondere die instationäre Simulation einen erhöhten Rechenaufwand. Zur optimalen Darstellung der Strömungsphänomene im Turbolader, ist eine hohe räumliche Auflösung des Rechengebiets erforderlich. Insbesondere die Strömungsuntersuchung in den Bauteilen Volute, Stator und Rotor des Turboladers erfordern eine ausreichend hohe Auflösung und damit sehr große Knotenanzahlen. Dabei hat die Auflösung der Grenzschicht einen großen Einfluss auf die Berechnung der Strömung. Die Netze der unterschiedlichen Geometrien bestehen jeweils aus etwa 6 bis 18 Millionen Knoten. Die erforderliche Rechenleistung einer instationären Simulation ist im Gegensatz zu einer stationären Simulation um ein Vielfaches höher. Eine hohe Stabilität der instationären Rechnungen und die Unabhängigkeit vom

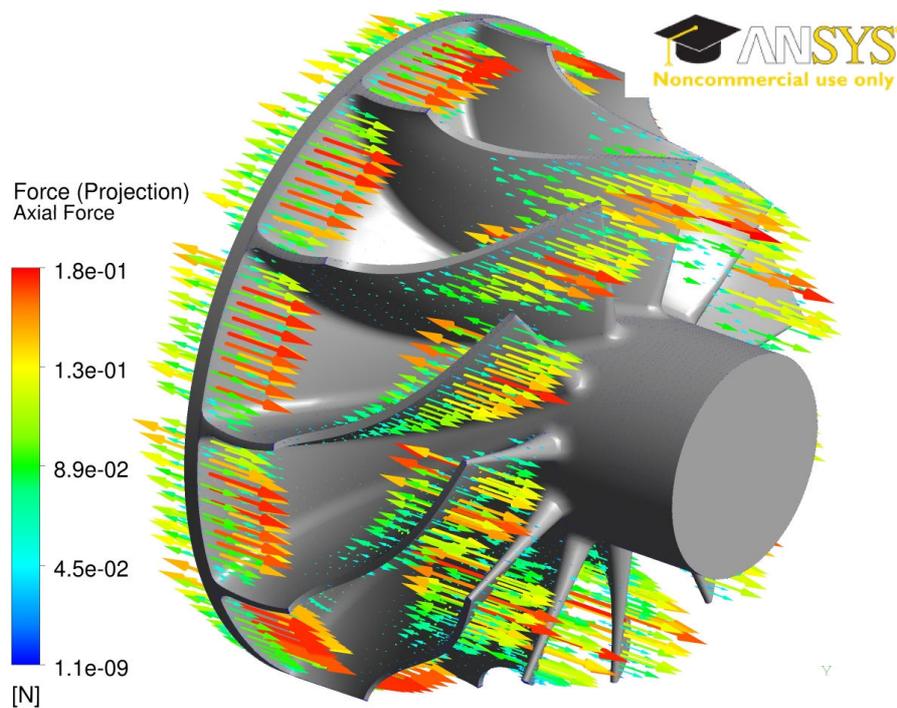


Abbildung 1: Kraftvektoren an einer Turbolader Turbine

Zeitschritt kann mit der impliziten Euler Methode erreicht werden. Für die implizite Euler Methode ist es notwendig, eine große Anzahl gekoppelter Gleichungen zu jedem Zeitschritt zu lösen. Damit erfordert dieses Lösungsverfahren eine große Kapazität an Arbeitsspeicher und Rechenleistung. Bei der instationären Simulation wird für jeden Iterationsschritt die Gitterposition des Rotors angepasst. Damit ist es möglich die Wechselwirkungen und Strömungsphänomene darzustellen. Dieser Vorgang erfordert ebenfalls einen erhöhten Rechenaufwand. Für die Untersuchungen werden die kommerziellen CFD-Programmpaketes Ansys CFX, Ansys Mechanical verwendet (vollständig MPI-parallel). Die Entwicklung von zuverlässigen Auslegungsgrundlagen für schnell laufende Gleitlager kleiner Baugröße trägt wesentlich zur Erhöhung der effektiven Betriebssicherheit hochtouriger Abgasturbolader bei. Dadurch lässt sich einerseits bereits in der Konstruktionsphase die Gefahr von Betriebsstörungen und Schäden verhindern. Andererseits können durch die verbesserte Gesamtlagerung optimierte Rotoren gebaut und damit Leistung, Leistungsdichte und Wirkungsgrad derartiger Maschinen wesentlich gesteigert werden. Darüber hinaus kann mit den wesentlich erweiterten Berechnungsgrundlagen für schnell laufende Axial- und Radiallager kleiner Baugröße auch der Umfang der für den Sicherheitsnachweis von Serienprodukten erforder-

lichen teuren Versuche wesentlich reduziert werden. Somit werden die Ergebnisse des Vorhabens vor allem durch die kleineren und mittleren Unternehmen genutzt und umgesetzt, die sich mit der Herstellung von Abgasturboladern bzw. deren Lagerkomponenten, sowie der Berechnung und Beratung beschäftigen.

Mehr zum Thema

1. Schmitt, S.: Untersuchungen zum Reibleistungsverhalten von Wellenlagerungen für Pkw-Abgasturbolader. Dissertation, Verlag dissertation.de, 28. Dezember 2007.
2. H. Schwarze, Ü. Mermertas, T. Hagemann, M. Müller: Berechnung thermischer und elastischer Verformungen bei Mehrflächenlagern unter erhöhten Lasten und hohen Umfangsgeschwindigkeiten; 47. Tribologie-Fachtagung, Göttingen 2006.
3. A. Vorreiter, B. Ziesenis, J. Seume: Untersuchung des Reibmomentes einer Turboladerlagerung. TC-Lagerreibung (Studie), Vorhaben Nr. 908, FVV-Abschlussbericht, Frankfurt am Main, 2007.

Förderung

Forschungsvereinigung Verbrennungskraftmaschinen (FVV), Projekt 819

Tail plane aerodynamics of aircraft

Numerical Investigation of Interference Effects of the Horizontal and the Vertical Tail Planes on Transport Aircraft

R. Radespiel, V. Nallapula, Institut für Strömungsmechanik, Technische Universität Braunschweig

Abstract

- The project aims at assessing the influence of the interference effects caused by the horizontal tail plane (HTP) and the vertical tail plane (VTP) on the aerodynamic performance of the complete aircraft.
- An important aim of this project is to predict the maximum lift coefficient, $C_{l_{max}}$ and its corresponding angle of attack, α .
- A further aim is to identify the effects caused by the tail plane on the flight performance of an aircraft during stall manoeuvres.

The present project is a sub-project of HINVA (High Lift In Flight Investigation), which aims at predicting the maximum lift of an aircraft configuration ($C_{l_{max}}$) in design phase. The HINVA project is led by the Deutsche Zentrum für Luft und Raumfahrt (DLR). The project follows a strategy, which is based on comparing numerically simulated results with that of experiments performed in the European transonic wind tunnel (ETW) and finally evaluating the predicted flight performances with flight tests. Hence, new validation data bases are generated that lead to new numerical design capabilities.

The maximum lift performance of an aircraft is detected by performing stall manoeuvres during flight testing, the obtained maximum lift coefficient is one of the most important parameters for the landing configuration of an aircraft. The present project concentrates on analyzing the interference effects caused by the tail plane on the flight performance of the aircraft and in particular on the influence of the HTP on the maximum lift coefficient during stall with the help of numerical simulations. In order to study the HTP and its influence, a comprehensive understanding of the flight physics of the tail plane is required which is obtained by performing various sensitivity analyses. The sensitivity analyses include changing of the angle of incidence of the HTP (i_H), angle of attack (α), influence of various turbulence models and also studies of the downwash of the wing.

In order to proceed with the aforementioned tasks an efficient numerical simulation strategy is important. This can be achieved by the state of

the art numerical flow solver DLR-TAU code [1],[2]. In aerodynamics the lift coefficient increases with increasing angle of attack. The critical angle of attack beyond which the lift coefficient decreases is said to be the stalling point of an aircraft (this is depicted in the top of figure 1).

The numerical approach for this study involves computing the half model of the complete aircraft, symmetrically split along the axis of the fuselage. The numerical grid for this setup is generated using the commercial grid generator Centaur [3]. A hybrid unstructured grid is generated for the geometry with either prismatic/hexahedral elements in the boundary layer (region of high solution gradients) coupled with unstructured tetrahedral elements away from the boundary layer. Turbulent transport in the boundary layers is taken into account in the so called eddy viscosity models [4] and advanced Reynolds Stress Models [6]. To this end, 3-D flow simulations are envisaged for the geometry at a Mach number, $Ma = 0.2$ with a Reynolds number of 15×10^6 at high angles of attack (at aircraft stall). In aerodynamics, Mach number (Ma) is defined as the ratio of the flight speed to that of the speed of sound, Reynolds number (Re) is defined as the ratio of inertial forces to viscous forces. Re plays an important role in characterising the flow regime as well as providing the basis for aerodynamic similitude of models.

Figure 1 (top) shows the computed variation of coefficient of lift with that of the angle of attack. It can be seen that the lift coefficient increases linearly with increase in angle of attack until a critical angle is reached. At this critical angle of attack (α_c), the value of the lift coefficient is said to be at its maximum ($C_{l_{max}}$). A similar phenomenon is observed with the drag coefficient (C_d) where after the (α_c) a rapid increase in the drag coefficient can be observed from figure 1 (top).

Figure 1 (bottom) shows the pressure coefficient with stream traces based on skin-friction represented by black lines depicting the path of the fluid molecules close to the wall. Low pressure regions can be observed over the wing which are responsible for providing the lift required to overcome the weight of an aircraft. It appears that meaningful simulations of the flow over the aircraft make the resolution of a great variety of flow scales necessary and this justifies the usage of the HLRN supercomputer for this project.

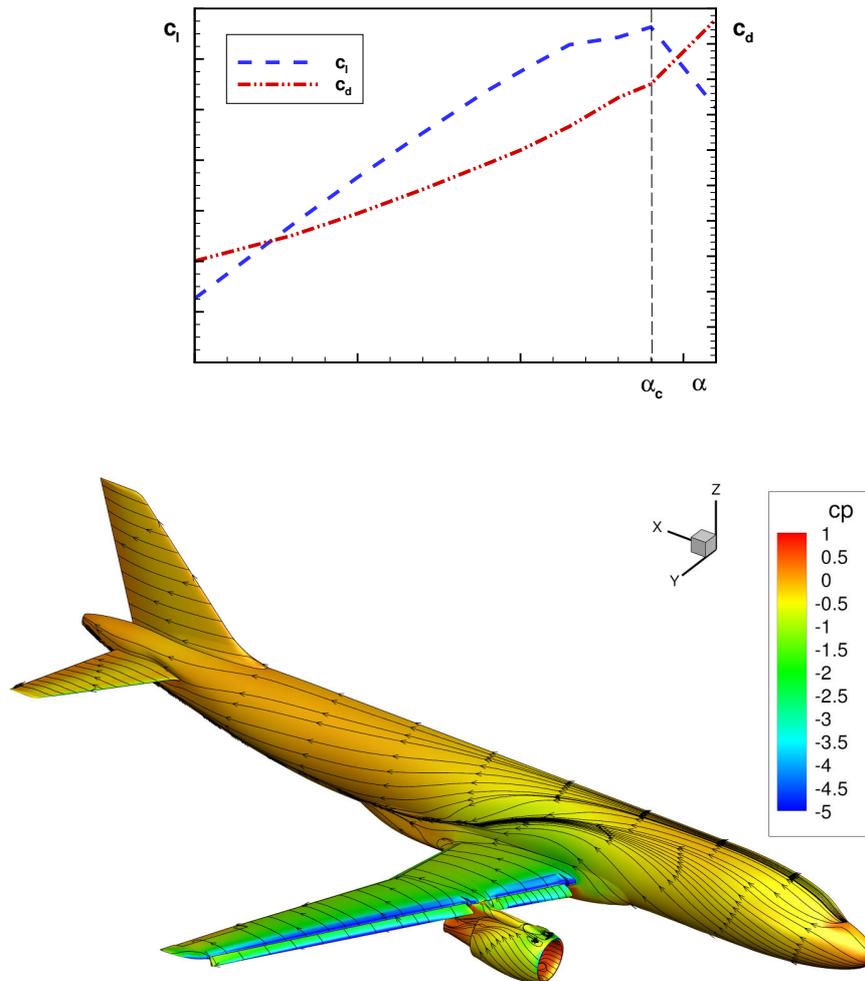


Figure 1: Lift polar (top) and contour plot of pressure coefficient with stream traces based on skin-friction (bottom).

More Information

1. KROLL, N., ROSSOW, C.-C., SCHWAMBORN, D., BECKER, K. AND HELLER, G: *MEGAFLOW - A Numerical Flow Simulation Tool for Transport Aircraft Design*. ICAS Congress 2002, Toronto, 09.-13.09.2002, ICAS
2. SCHWAMBORN, D., GERHOLD, T., AND HEINRICH, R.: *The DLR TAU-Code: Recent applications in Research and Industry*. In: P. Wesseling, E. Oate, J. Piau (Eds), ECCOMAS CFD, Egmond aan Zee, The Netherlands, 2006
3. <http://www.centaursoft.com/>
4. MENTER, F. R.: *Zonal two-equation $k-\omega$ turbulence models for aerodynamic flows*. In: AIAA Paper, AIAA - 93 -2906 (1993)
5. GROTE, A. AND RADESPIEL, R: *Studies on Tailplane Stall for a Generic Transport Aircraft Wind Tunnel Model*. In: Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design, Vol. 96; C. Tropea, S. Jakirlic, H.-J. Heinemann, R. Henke, H. Hönlinger; Springer, Berlin Heidelberg New York, 2007.
6. EISFELD, B. : *Numerical Simulation of Aerodynamic Problems with SSG/LRR- ω Reynolds Stress Turbulence Model Using the Unstructured TAU Code*. Notes on Numerical Fluid Mechanics and Multidisciplinary Design, Vol. 96, Springer, Berlin, 2007.

Funding

Federal Ministry of Economics and Technology

Physik

Der Infrarotlimes der Quantenchromodynamik

Berechnung eichvarianter Greenscher Funktionen in der Gitter-QCD mit Hilfe von Monte-Carlo-Simulationen

M. Müller-Preussker, E.-M. Ilgenfritz, A. Sternbeck, Institut für Physik, Humboldt-Universität zu Berlin; Fakultät für Physik, Universität Regensburg

Kurzgefasst

- Quarks und Gluonen sind die elementaren Bausteine der Hadronen, d.h. der der starken Wechselwirkung unterliegenden Elementarteilchen wie Proton, Neutron, Pion,...
- Eichvariante Greensche Funktionen der Gluon-, Quark- und der sogenannten Ghost-Felder stellen wichtige Konstrukte der zugrundeliegenden Quantenfeldtheorie – der Quantenchromodynamik (QCD) – im Rahmen des Standardmodells der Elementarteilchen dar.
- Diese Greenschen Funktionen (“Propagatoren”) nutzt man als Input für phänomenologisch interessante Berechnungen von Eigenschaften der Hadronen. Ihr Verhalten im Grenzfall kleiner Impulse (Infrarotlimes) sagt uns etwas darüber, warum Quarks und Gluonen in der Natur als freie Teilchen nicht beobachtet werden (“Confinement”).
- Im Rahmen des vorliegenden Projekts wurden und werden die Propagatoren im Sinne von ab-initio-Rechnungen für die Landau- oder Coulomb-Eichung aus der auf einem raumzeitlichen Gitter diskretisierten QCD berechnet. Der Infrarotlimes verlangt sehr große Gitter, die sich nur auf modernen Parallelrechnern implementieren lassen.
- Aus den Propagatoren wurden phänomenologisch interessante Parameter extrahiert, wie die laufende QCD-Kopplung $\alpha_s(q)$ bzw. der QCD-Skalenparameter Λ .

Das Phänomen des Eingeschlossenseins der Quarks in Hadronen (sogenanntes “Confinement”) in der Quantenchromodynamik (QCD) ist eng mit dem Infrarotverhalten der eichabhängigen Propagatoren der Gluon-, Geist- und Quark-Felder verknüpft. Deren Berechnung verlangt nichtstörungstheoretische Methoden. Dazu werden in der Literatur zwei theoretische Zugänge verfolgt. Einerseits werden im Raum-Zeit-Kontinuum auf eine endliche Zahl von Gleichungen begrenzte Systeme von Dyson-Schwinger- (DS) und von funktionalen Renormierungsgruppen- (FR) Gleichungen gelöst. Andererseits werden Simulationsrechnungen der auf einem raumzeitlichen Gitter dis-

cretisierten QCD (kurz “Gitter-QCD”) durchgeführt. Der Berechnung liegt in der Regel die Landau-Eichung für die Gluonfelder zugrunde. Für einige, auch phänomenologische Anwendungen ist die Coulomb-Eichung von Interesse. Dabei ist in jedem Fall ein entsprechendes Eichfunktional zu minimieren, das aber mit wachsendem Systemvolumen eine wachsende Zahl von lokalen Minima besitzt (Gribov-Problem). Der Eindeutigkeit wegen ist man am globalen Extremum oder wenigstens an Extrema in dessen “Nähe” interessiert. Im vorliegenden Projekt wird dies mit der numerischen Methode des “simulated annealing” erreicht.

Die Konsistenz der Aussagen beider Zugänge ist ein zentrales theoretisches Anliegen, zumal die gewonnenen Greenschen Funktionen als Input in Bethe-Salpeter-Gleichungen für Quark-Antiquark-Zustände (Mesonen) oder in Faddeev-Gleichungen für Drei-Quark-Zustände (Baryonen) dienen können. Das Verhalten der Greenschen Funktionen, im Ultraviolett-Limes betrachtet, erlaubt es aber auch, bestimmte Parameter zu fixieren, die in der Analyse hochenergetischer hadronischer Streuprozesse benötigt werden. Ferner ist das Verhalten der Greenschen Funktionen unter thermodynamischen Bedingungen, d.h. bei nichtverschwindender Temperatur, von Interesse. Dabei geht es um das Studium des Phasenübergangs von einer Quark-Gluon-Plasmaphase in die gegenwärtige Phase von Hadronzuständen, wie er in frühen Stadien des Universums bei dessen Abkühlung durchlaufen wurde. Wir untersuchen, inwieweit der longitudinale Anteil des Gluon-Propagators die Definition eines geeigneten Ordnungsparameters für den Phasenübergang in der QCD erlaubt.

Im Verlaufe des mehrjährigen Projekts waren wir in der Lage, eine führende Position bei der Gitterberechnung der Gluon- und Ghost-Propagatoren im Falle der realistischen QCD-Eichgruppe $SU(3)$ einzunehmen. Die Aufklärung der Rolle der Gribov-Kopien gelang insbesondere für die Coulomb-Eichung [1]. Mit Hilfe von Gittern bis zur extremen Größe 96^4 , ein Volumen von ca. $(16\text{fm})^4$ repräsentierend, gelang es uns nachzuweisen, dass die Gitter-QCD auf ein Infrarotverhalten führt, das im Einklang mit der asymptotischen “Entkopplungslösung” der DS- bzw. FR-Gleichungen steht [2]. Damit wurde eine lange geführte Kontroverse verschiedener Autorengruppen darüber, welche der theoretisch möglichen Lösungen im Einklang mit Gitterrechnungen steht,

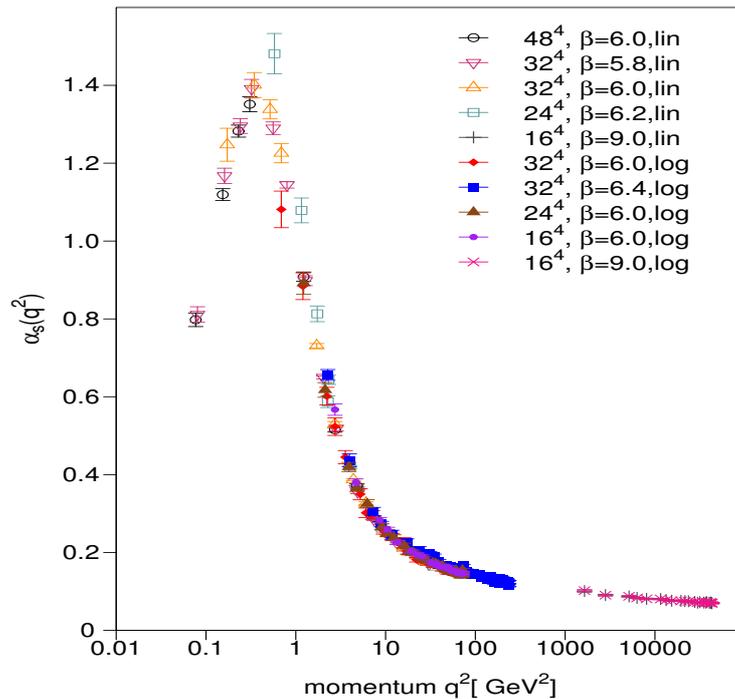


Abbildung 1: Ergebnisse für die laufende QCD-Kopplung, berechnet mit zwei Definitionen für das nichtabelsche Eichfeld der QCD und bei verschiedenen Gittergrößen und Werten für die unrenormierte Kopplung g_0 bzw. $\beta = 6/g_0^2$.

zu einem wesentlichen Teil geklärt. Die Technologie der Berechnung der Gluon-, Ghost- und Quarkpropagatoren beherrschend, waren wir auch in der Lage, erste Untersuchungen im Ultraviolett-Limes (d.h. bei hohen Impulsen) durchzuführen, um aus der laufenden QCD-Kopplung durch Vergleich mit Ergebnissen der Kontinuumsstörungstheorie bis zur 4-Loop-Ordnung den QCD-Skalenparameter Λ im sogenannten \overline{MS} -Schema zu bestimmen [3]. Ähnliche Untersuchungen zum Quark-Propagator stehen kurz vor ihrem Abschluss. Um sicher zu gehen, dass die auf großen Volumina berechneten Propagatoren dem Kontinuumslikes entsprechen, sind Untersuchungen bei variierenden Gitterkonstanten und mit verschiedenen Definitionen für die gitterdiskretisierten Eichpotentiale notwendig. Derartige Rechnungen wurden im Jahre 2010 abgeschlossen [4]. Fig. 1 zeigt die entsprechende Berechnung der laufenden QCD-Kopplung $\alpha_s(q)$. In der aktuellen Projektphase steht die Berechnung der Gluon- und Ghost-Propagatoren bei endlichen Temperaturen im Mittelpunkt der Betrachtungen. Erste Ergebnisse zeigen, dass sich im Falle der reinen $SU(3)$ -Eichtheorie der longitudinale Gluon-Propagator im Infrarotlimes signifikant als Funktion der Temperatur am Phasenübergang erster Ordnung verhält. Im Falle der Gitter-QCD in Anwesenheit dynamischer Fermion-Freiheitsgrade

der leichten u-, d-Quarks, in dem lediglich ein stetiges "Crossover"-Verhalten erwartet wird, variiert der Propagator weitaus weniger. Er sollte es aber – im Verbund mit anderen Observablen – erlauben, den Temperaturbereich dieses Verhaltens besser abzuschätzen.

Mehr zum Thema

1. A. Voigt, E.-M. Ilgenfritz, M. Müller-Preussker, A. Sternbeck, Phys. Rev. **D78**, 014501 (2008), arXiv:0803.2307 [hep-lat].
2. I.L. Bogolubsky, E.-M. Ilgenfritz, M. Müller-Preussker, A. Sternbeck, Phys. Lett. **B676**, 69 (2009), arXiv:0901.0736 [hep-lat].
3. A. Sternbeck, E.-M. Ilgenfritz, K. Maltman, M. Müller-Preussker, L. von Smekal, A.G. Williams, PoS **LAT2009**, 210 (2009), arXiv:1003.1585 [hep-lat].
4. E.-M. Ilgenfritz, C. Menz, M. Müller-Preussker, A. Schiller, A. Sternbeck, arXiv:1010.5120 [hep-lat], submitted to Phys. Rev. D.

Förderung

Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

The Higgs boson

Determination of upper and lower Higgs boson mass bounds from a chirally invariant lattice Higgs-Yukawa model

M. Müller-Preussker, K. Jansen, Institut für Physik, Humboldt-Universität zu Berlin; NIC, DESY Zeuthen

Abstract

- The Higgs boson is a cornerstone of particle physics, providing masses to all quarks, leptons and the electroweak gauge bosons.
- The search for the so far undetected Higgs boson is the main target for the Large Hadron Collider at CERN.
- Theoretically, lower and upper Higgs boson mass bounds can be computed but this must be carried out in a non-perturbative fashion.
- We compute such Higgs boson mass bounds by means of numerical simulations with lattice field theory techniques.
- Our results provide also the energy scale where new physics beyond the standard model of particle interactions has to appear.

The standard model of particle physics comprises the electroweak and the strong interactions. The electroweak theory, which unifies the electromagnetic and the weak interactions within a chiral gauge theory, exploits the concept of spontaneous symmetry breaking (here known as the Higgs mechanism) to provide masses for all quarks, leptons and the weak gauge bosons (W, Z), postulating the existence of the Higgs boson. However, despite of the great success of the electroweak model, the existence of the Higgs boson has not yet been confirmed. Thus, there is presently a large experimental effort at the Large Hadron Collider (LHC) at CERN which is dedicated to the discovery of the Higgs boson as an essential cornerstone of the electroweak model. On the theoretical side, a prediction of the Higgs boson mass is not possible, but at least lower and upper bounds can be derived. These bounds are, in principle, of non-perturbative nature. Our work focuses therefore on the Higgs boson mass bounds which we determine non-perturbatively employing techniques of lattice field theory, in particular Monte-Carlo simulations. To this end, we neglect the gauge fields, which can be treated perturbatively, and study a Higgs-Yukawa model, which describes the interaction between the scalar and the quark fields. Such studies

have already been performed in the past but these works were lacking the aforementioned most important chiral symmetry (the interchange of massless left- and right-handed quarks) and no consistent Higgs-Yukawa theory could be established on the lattice.

However, recent developments in lattice field theory have led to a realization of chiral symmetry on the lattice. We consider a chirally invariant lattice Higgs-Yukawa model based on the so-called Neuberger overlap operator. With this setup, we were able to provide fully non-perturbatively determined upper and lower Higgs boson mass bounds which are of direct LHC importance for the Higgs boson search at the LHC.

Our work concerning the Higgs boson mass bounds have appeared in a number of publications, [1],[2],[3],[4] and contributions to international conferences. Besides the physical results, described below, it needs to be stressed that a large effort has been undertaken by us to improve the performance of the algorithm employed for the numerical simulation of the model. It goes beyond the scope of this article to discuss these improvements in detail, they can be found in the Ph.D. work of P. Gerhold, ref. [3], but it should be mentioned that they led to a factor of 10-100 acceleration of the simulations. This has been an essential step to derive the desired Higgs boson mass bounds.

A most important role in determining the lower and upper bounds of the Higgs boson mass is played by the self-interaction of the Higgs field. It is described by a 4-point interaction multiplied by a quartic coupling λ . The value of λ has to be positive in order to have a stable theory. This leads to a lower bound of the Higgs boson mass at a value of $\lambda = 0$. On the other hand, the quartic coupling cannot exceed a value of $\lambda = \infty$ which then leads to an upper bound on the Higgs boson mass. Computing the Higgs boson mass at $\lambda = 0$ and $\lambda = \infty$ were, in fact, the strategies for deriving the desired Higgs boson mass bounds¹.

In quantum field theories, a cut-off has to be introduced in order to render the calculations in a given theory finite. Of course, in the end, such an unphysical cut-off has to be removed from the theory. In the here considered Higgs-Yukawa model, the removal of the cut-off leads to a peculiarity: with increasing cut-off, the strength of the Higgs self-interaction diminishes and when the cut-off is

¹It has to be remarked that the actual arguments are more involved and are usually referred to as *vacuum instability* for the lower and as *triviality* for the upper mass bound.

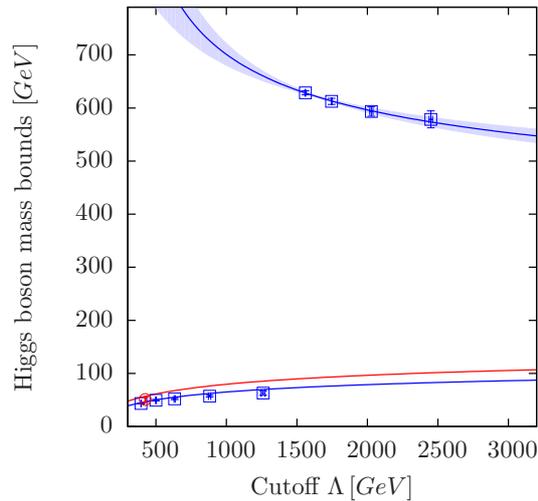


Figure 1: The final result on the Higgs boson mass bounds. The solid lines are predictions from perturbation theory; the red curve denotes the effect of three fermion generations with a physical top quark mass of 175 GeV and a physical bottom quark mass of 4.2 GeV.

removed (it assumes an infinitely large value) the self-interaction vanishes completely and leaves a trivial, non-interacting theory behind. Therefore, it only makes sense to study the theory with a cut-off in place and to investigate the dependence of the Higgs boson mass bounds as a function of the cut-off. This cut-off dependence is the main result of our work and it is shown in fig. 1.

In our model, there are mass-less modes which lead to large finite size effects of physical quantities. We have therefore performed a careful analysis of these effects by performing simulations on various size lattices up to 40^4 number of points. Hence we have about $O(10 \text{ Million})$ degrees of freedom in the problem. The data shown in fig. 1 are then obtained after an extrapolation to an infinite volume is performed.

In fig. 1, the area between the lower and the upper Higgs boson mass bounds gives directly the allowed range of Higgs boson masses consistent with the electroweak standard model. However, the graph can also be interpreted in an alternative way: if we assume that the Higgs boson mass has been determined experimentally at the LHC, we can directly read off the maximal value of the cut-off up to which the standard model is valid. For example, if the Higgs boson mass would be found at around 600 GeV, the maximal cut-off is about 1.5 TeV. Realizing that the value of the cut-off is just a measure for the scale where new physics beyond the standard model has to appear, such a scenario would lead then to the exciting conclusion that a new kind of physics will be detected at the LHC.

We conclude this contribution by mentioning that we presently investigate the resonance parameters

of the Higgs boson which will provide additional information on the Higgs sector and which is another important information for Higgs boson searches at the LHC. In addition, we are looking at effects of a possible heavy 4th quark generation on the Higgs boson mass bounds. First results [4] indicate that while the upper Higgs boson mass bound is only shifted by about 20%, the lower mass bound is shifted almost by a factor of ten. This can provide very stringent bounds on the mass of such a heavy new fermion generation.

More Information

1. P. Gerhold, K. Jansen, Lower Higgs boson mass bounds from a chirally invariant lattice Higgs-Yukawa model with overlap fermions, JHEP **0907** (2009) 025.
2. P. Gerhold, K. Jansen, Upper Higgs boson mass bounds from a chirally invariant lattice Higgs-Yukawa model, JHEP **1004** (2010) 094.
3. P. Gerhold, Upper and lower Higgs boson mass bounds from a chirally invariant lattice Higgs-Yukawa model, PhD Thesis, HU Berlin, [arXiv:1002.2569 [hep-lat]].
4. P. Gerhold, K. Jansen, J. Kallarackal, Higgs boson mass bounds in the presence of a very heavy fourth quark generation, [arXiv:1011.1648 [hep-lat]], to appear in JHEP.

Funding

German Research Foundation (DFG), Telekom Foundation

Der Quark-Gluon-Phasenübergang der hadronischen Materie Twisted Mass-Gitter-QCD bei endlicher Temperatur

M. Müller-Preussker (für die tmfT-Kollaboration),
Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Physik

Kurzgefasst

- Das Verhalten hadronischer Materie unter extremen Bedingungen, bei hoher Temperatur oder hoher Baryondichte, stellt weltweit einen wichtigen Forschungsschwerpunkt der Elementarteilchenphysik dar. Entsprechende experimentelle Untersuchungen werden an den großen Beschleuniger- bzw. Detektoranlagen – RHIC am Brookhaven National Laboratory, LHC am CERN, Genf und zukünftig FAIR bei der GSI Darmstadt – durchgeführt.
- Man geht davon aus, dass der Übergang von einem Quark-Gluon-Plasma in Zustände, bei denen die Quarks und Gluonen in Hadronen (Proton, Neutron,...) gebunden sind, in frühen Stadien des Universums durchlaufen wurde. Quark-Gluon-Zustände sollten auch in kosmischen Objekten extrem hoher Massendichte wie in Neutronensternen "eingefroren" sein.
- Für hadronische Materie unter experimentell bisher nicht erreichten Bedingungen gibt es eine Reihe von Modellaussagen. Rechnungen *from first principles* erlaubt allein die auf einem raum-zeitlichen Gitter diskretisierte Quantenchromodynamik (QCD) als Theorie der starken Wechselwirkungen zwischen Quarks und Gluonen. Sie gestattet es, die (pseudo-) kritische Übergangstemperatur T_c und die Zustandsgleichung im thermodynamischen Gleichgewicht vorherzusagen. Die dafür notwendigen Simulationen sind extrem aufwändig und verlangen meist eine Extrapolation zu physikalisch-realistischen Werten, insbesondere der Massen der up- und down-Quarks.
- Im vorliegenden Projekt werden die Temperatur T_c für den Übergang und die Zustandsgleichung im Rahmen einer speziellen Gitterdiskretisierung der QCD – der *Wilson-twisted mass* (tm)-Formulierung der fermionischen Freiheitsgrade – bestimmt. Diese Formulierung zeichnet sich durch eine automatische Verbesserung hinsichtlich der Unterdrückung der Diskretisierungsfehler aus.
- Als erster Schritt der Untersuchungen war das komplizierte Phasendiagramm der tm-Gitter-QCD aufzuklären. Inzwischen konnte T_c für drei Werte der Pionmasse bestimmt werden.

Die tmfT-Kollaboration ("twisted mass at finite temperature" – Mitglieder sind derzeit F. Burger, E.-M. Ilgenfritz, M. Kirchner und M. Müller-Preussker, Humboldt-Universität zu Berlin; C. Urbach, Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn; O. Philipsen und L. Zeidlewicz, Goethe-Universität Frankfurt und M.-P. Lombardo, Laboratori Nazionali di Frascati dell' INFN, Italien) untersucht das thermische Verhalten der hadronischen Materie unter voller Berücksichtigung der dynamischen Fermion-Freiheitsgrade im Rahmen der gitter-diskretisierten Quantenchromodynamik. Dazu werden Simulationen mit Hilfe der Hybrid-Monte-Carlo-Methode durchgeführt. Das Ziel ist die Berechnung verschiedener physikalischer Größen wie Polyakov-Loop, Quark-Kondensat, Pionnorm, pseudo-skalare Abschirmlänge als Funktion der Temperatur, um die Temperatur des Übergangs bzw. Crossover und letztlich die thermodynamischen Zustandsgleichungen bestimmen zu können. Dabei sind möglichst realistisch kleine Werte der Pion- bzw. der up- und down-Quarkmassen zu erreichen. Die tmfT-Kollaboration hat zur Diskretisierung der fermionischen Felder die sogenannte Wilson-tm-Formulierung gewählt. Diese Diskretisierung des QCD-Wirkungsfunktionals stellt einen alternativen Zugang zu anderen bislang untersuchten Formulierungen dar, die vor allem verbesserte Staggered- und Wilson-clover improved-Fermion-Wirkungen benutzen. Die Wilson-tm-Formulierung ist in Simulationen der European Twisted Mass Collaboration (ETMC) bei der Temperatur $T = 0$ seit längerem erfolgreich im Einsatz und gut verstanden. Die tmfT-Kollaboration kann auf Ergebnissen der ETMC zur Kalibrierung der verwendeten Parameter aufbauen.

Detaillierte Voraussagen über die Crossover-Natur des Übergangs sowie zur Temperaturabhängigkeit von Druck und Energiedichte für den Fall von zwei und drei leichten Quark-Flavour-Freiheitsgraden konnten von anderen Autoren mit Hilfe der Staggered- und der clover improved-Fermionen gewonnen werden. Die Resultate erwiesen sich dabei als quantitativ wie auch qualitativ stark abhängig von Gitterdiskretisierungseffekten und den erreichten Werten der Pionmasse.

Hieraus leitet sich die Notwendigkeit ab, zum einen bei möglichst kleinen Quark- und Mesonmassen sowie bei hinreichend großen Gittervolumina zu simulieren, und zum anderen aber auch eine Gitter-Formulierung zu verwenden, die es erlaubt, physikalische Observablen ohne Diskretisierungsfehler niedrigster Ordnung in der Gitterkon-

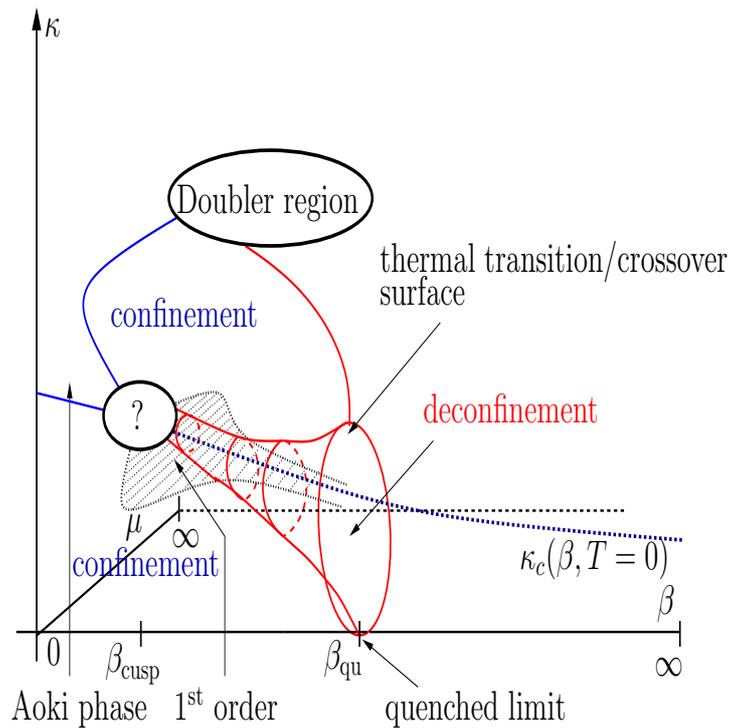


Abbildung 1: Phasendiagramm der Gitter-QCD bei endlicher Temperatur für eine Gitterapproximation mit twisted mass-Fermionen

stanten a zu bestimmen. Während das Erfüllen der ersten Bedingung unumgänglich einen hohen Rechenaufwand bedeutet, kann die zweite durch die Verwendung der Wilson-tm-Fermionen effizient umgesetzt werden (sogenannte automatische $O(a)$ -Verbesserung).

Die erforderlichen explorativen Studien [1] des relativ komplizierten Phasendiagramms der tm-Gitter-QCD mit zwei flavour-Freiheitsgraden ($N_f = 2$) bildeten den ersten Teil des Projektes (siehe Abb. 1 und [2]).

Aufbauend auf diesen Ergebnissen, gewonnen auf Gittern der Ausdehnung $N_s^3 \times N_t$ mit $N_s = 16, 24$ und $N_t \equiv 1/(aT) = 8$, haben wir Simulationen bei kleineren up-, down-Quarkmassen und somit notwendigerweise auf größeren Gittern ($N_s = 32, N_t = 10, 12$) durchgeführt. Auf diese Weise waren wir nach ersten Machbarkeitsstudien und einem Nachweis der automatischen $O(a)$ -Verbesserung [3] in der Lage, die Temperatur des Übergangs für drei verschiedene Werte der Pionmasse zwischen 300 MeV und 500 MeV zu bestimmen. Dies erlaubt eine Extrapolation zum physikalischen Punkt bei 140 MeV. Der Einfluss der Gitterdiskretisierung erwies sich dabei als relativ klein. Erste Ergebnisse wurden in [4] publiziert.

Es besteht im weiteren die Absicht, die Simulationen auf den realistischen Fall der $N_f = 2 + 1 + 1$ dynamischen Fermionfreiheitsgrade der

up-, down-, strange- und charm-Quarks auszudehnen, mit dem Ziel, auch dafür die Temperaturabhängigkeit physikalischer Größen wie z.B. der Energiedichte und des Druckes zu berechnen.

Mehr zum Thema

1. E. M. Ilgenfritz, K. Jansen, M.P. Lombardo, M. Müller-Preussker, M. Petschlies, O. Philipsen, L. Zeidlewicz, PoS **LAT2008**, 206 (2008), arXiv:0809.5228 [hep-lat].
2. E.-M. Ilgenfritz, K. Jansen, M.P. Lombardo, M. Müller-Preussker, M. Petschlies, O. Philipsen, L. Zeidlewicz, Phys. Rev. **D80**, 094502 (2009), arXiv:0905.3112 [hep-lat].
3. M. Müller-Preussker, E.-M. Ilgenfritz, K. Jansen, M.P. Lombardo, O. Philipsen, L. Zeidlewicz, M. Kirchner, M. Petschlies, D. Schulze, C. Urbach, PoS **LAT2009**, 266 (2009), arXiv:0912.0919 [hep-lat].
4. F. Burger, E.-M. Ilgenfritz, M. Kirchner, M.P. Lombardo, M. Müller-Preussker, O. Philipsen, C. Urbach, L. Zeidlewicz, arXiv:1009.3758 [hep-lat], to appear in PoS **LAT2010**, (2010).

Förderung

Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

Fundamental Constants of Quantum Chromo Dynamics: a multiscale problem.

Precision charm physics with $N_f = 2$ dynamical quarks

R. Sommer, U. Wolff, NIC, DESY; Humboldt-Universität zu Berlin, Institut für Physik

Abstract

- The Standard Model is our theory of subatomic physics, validated down to very small distances. It comprises Quantum Chromo Dynamics (QCD) describing the strong interaction.
- Some of the fundamental constants of Nature are associated with QCD: the strong coupling constant α_s and the masses of the quarks, m_u, \dots, m_t , indicated in the Figure.
- We simulate QCD using a finite size technique to cover the multiple scales of the theory and relate its fundamental constants to experimental observables, such as the mass of the proton.
- Our project is part of the international ALPHA collaboration programme and the data sets are coordinated within the CLS consortium [1].

Over the last few decades, particle physicists have explored the fundamental forces down to distance scales of $\approx 10^{-18}$ m. It was found that the experimental observations are described to very high accuracy by a theory which is known as the Standard Model of particle physics.

The Standard Model describes the interactions of the fundamental constituents of matter through electromagnetic, weak and strong forces in terms of three different quantum gauge theories. It does so very accurately and in terms of very few *fundamental constants of Nature*. Apart from the mathematical simplicity of its basic equations it was essential for the success of the Standard Model that the forces involved are mostly relatively weak at the typical energy transfers in particle physics scattering experiments of about 10 – 100 GeV.² The strengths of the interactions are characterized by so-called coupling constants. When the forces are weak, the predictions of the theory can be worked out in terms of an expansion in powers of these coupling constants, a procedure known as perturbation theory. For instance, in Quantum Electrodynamics (QED), the quantum gauge theory describing the interactions between electrons and photons, the coupling constant is the well-known fine structure constant $\alpha \approx 1/137$. Its smallness guarantees that only a few terms in a power series are

sufficient in order to predict physical quantities with high precision.

The gauge theory for the strong force is QCD, where quarks and gluons assume the rôles of the electrons and photons of QED. Quarks are the constituents of the more familiar proton and neutron. The coupling constant of QCD, α_s , then characterizes the strength of the interaction between quarks and gluons. One important property of all coupling “constants” in the Standard Model is that they depend on the energy transfer μ in the interaction process. In this sense they are not really constant, and one usually refers to them as couplings that “run” with the energy scale. At $\mu \approx 100$ GeV the strong coupling constant has been determined as $\alpha_s \approx 0.12$. Although this is much larger than the fine structure constant of QED, perturbation theory still works well. However, if the energy scale μ is decreased from 100 GeV the value of α_s increases. In fact, at $\mu \approx 1$ GeV it becomes so large that perturbation theory cannot be relied upon any more. It is then obvious that particle theorists require a tool which is able to deal with large values of α_s . A *non-perturbative* method is needed to work out the predictions of QCD in this situation.

The simple and elegant theory of QCD is formulated in terms of quarks and gluons. Yet what is observed in experiments at low energies, say, $\mu \lesssim 1$ GeV are protons, neutrons, π -mesons and many other particles, all known as hadrons. In fact, a striking property of QCD is “confinement”, which means that quarks and gluons cannot be produced in experiments.

Computer simulations of QCD formulated on a discrete lattice of space-time points allow for a non-perturbative treatment of the theory in the low-energy regime. As usual when compute grids come into play, one must extrapolate the answers to the continuum limit by studying sequences of progressively finer discretizations. In addition computers demand the enclosure of space-time into a finite region which is an approximation that has to be controlled. In such simulations it is natural to use a few hadron masses as input to tune the free parameters in lattice QCD and to then predict the rest.

To establish a unified description for all energies we need to relate the input parameters of perturbative QCD and of lattice QCD to each other.

²In particle physics it is customary to use “natural units” where the speed of light c and Planck’s constant \hbar are set to one, and energies as well as masses are given in GeV. As an orientation note that $m_{\text{proton}} \approx 1$ GeV, where $1 \text{ GeV} = 1.602 \cdot 10^{-7} \text{ J}$.

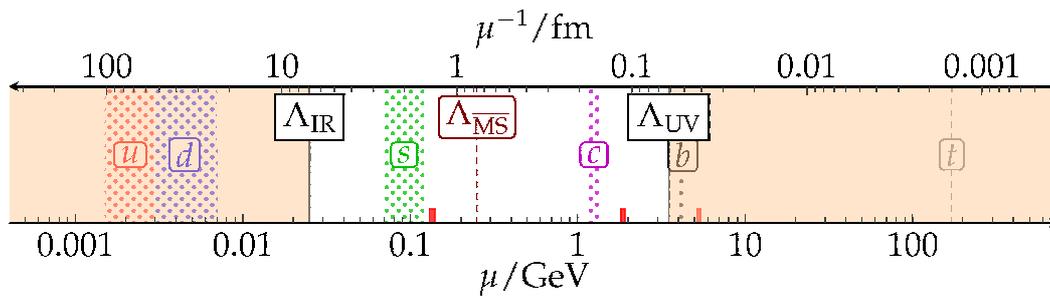


Figure 1: Large range of energy (μ) scales in lattice QCD, where shaded areas refer to quark mass values (in the so-called $\overline{\text{MS}}$ scheme) quoted by the Particle Data Group. Red marks indicate the pion, the D- and the B-meson mass. The perturbative domain is above $\mu = 10$ GeV. It is distinct from the white region covered by typical grids used to describe hadrons.

This is a difficult problem, because it requires non-perturbative control and the simultaneous handling of a hadronic and a much higher energy scale with both of them discretized finely enough. The ALPHA-collaboration is devoted to an uncompromising solution of this issue with innovative methods. To this end we have developed a by now well-known recursive finite size scaling technique.

The decisive idea of that method is to consider a sequence of deliberately finite sized and partially even small boxes (‘femto universe’) with QCD inside. The smallest system is such that — due to Heisenberg’s uncertainty relation — it can be related by perturbative QCD to high energy scattering in an infinite volume. Then successive boxes differ by scale factors of two only and are related to each other by taking the continuum limit of simulations. Eventually one arrives at a large box which is related with hadrons in lattice QCD. In this way the multi-scale problem is circumvented and a physical scale ratio is implemented that grows exponentially with the number of steps. In terms of the Figure, one starts with a high energy from the right, and then moves recursively to the left by factor two rescaling steps, until a scale suitable for hadrons is reached. This method is clearly involved, but in contrast to simpler approaches which typically compromise with the multiple scales handled on single lattices it is more amenable to systematic improvement and error control. Its application to QCD is now far advanced [3],[2], for instance a systematic improvement of the discretization has been implemented.

In this particular project we focus on a precision determination of the mass m_c of the charm quark and, in a first stage, only the lightest of the quarks are fully incorporated in the simulations ($N_f = 2$). The other quarks are treated in the so-called valence approximation. A special challenge has to be faced when simulating the charm quark. Its

mass around 1 GeV puts it close to the upper end of the white area in the Figure given by the ultra-violet cutoff $\Lambda_{UV} = a^{-1}$. Cutoff effects of order $m^2 a^2$ are then relevant and have to be carefully extrapolated away. We therefore studied lattices with as small a discretization length as possible. In this effort we encountered unforeseen algorithmic problems, which required a dedicated study. They are now understood to be no major hurdle on the way to precise answers [4]. We are thus ready to determine m_c in the $N_f = 2$ theory and we will also investigate the decay $D_s \rightarrow l \nu_l$. In this decay a tension has existed between the experimentally observed rate and the Standard Model prediction. The latter depends on the so-called decay constant F_{D_s} , which we will compute precisely through lattice QCD simulations.

The result will be either another precision test of the Standard Model or a hint for particles or interactions not discovered directly as yet.

More Information

1. <http://www-zeuthen.desy.de/alpha>
<https://twiki.cern.ch/twiki/bin/view/CLS>
2. F. Tekin, R. Sommer and U. Wolff “The Running coupling of QCD with four flavors,” Nucl. Phys. **B840**, 114-128 (2010).
3. ALPHA collaboration, “Non-perturbative quark mass renormalization in two-flavor QCD,” Nucl. Phys. **B729**, 117-134 (2005).
4. S. Schaefer, R. Sommer and F. Viotto, “Critical slowing down and error analysis in lattice QCD simulations,” Nucl. Phys. **B845**, 93-119 (2011).

Funding

DFG Collaborative Research Centre TR 09-03, European Union project “FLAVIANet”

The beauty of particle physics

B-physics from lattice QCD

A. Shindler (for the European Twisted Mass Collaboration), Humboldt Universität zu Berlin, Institut für Physik

Abstract

- Weak decays of hadrons containing heavy quarks are important sources of information to investigate the nature of elementary particle interactions.
- The simple structure of the weak interactions is obfuscated by the high complexity of strong interactions that need a non-perturbative treatment.
- A Euclidean space-time lattice is the only framework in order to address these issues and to study the theory of strong interaction: Quantum Chromodynamics (QCD).
- These simulations are computationally very demanding and require several thousands of CPU cores.

In nature there are four fundamental forces or interactions. Three of them (strong, weak and electromagnetic) are described by the Standard Model (SM). Within the SM there are six flavours of quarks (u, d, s, c, b, t), which interact among themselves. The nature of elementary particle interactions has always been investigated studying the rich phenomenology of weak decays and nowadays important sources of informations are weak decays of hadrons, composite particles made of quarks, containing the b quark. In the SM, the Cabibbo-Kobayashi-Maskawa (CKM) matrix is a unitary matrix which contains information on the strength of flavour-changing weak decays. Technically, it specifies the mismatch of quantum states of quarks when they propagate freely and when they take part in the weak interactions. It is of utmost importance in the understanding of CP violation. The study of weak decays of hadrons containing the b quark allows to test the unitarity of the Cabibbo-Kobayashi-Maskawa (CKM) matrix and to determine directly the weak mixing angles. Hopefully, this will provide some hints about New Physics beyond the Standard Model.

The structure of weak interactions in the Standard Model is rather simple. According to the structure of the interaction, weak decays of hadrons can be divided into three classes: leptonic decays, in which the quarks of the decaying hadron annihilate each other and only leptons appear in the final state; semi-leptonic decays, in which both leptons

and hadrons appear in the final state; and non-leptonic decays, in which the final state consists of hadrons only. Representative examples of these three types of decays are shown in the left plot of fig. 1.

In hadrons quarks interact among themselves also exchanging the mediator of the strong interaction, the gluon. At the moment there is a huge body of experimental evidence that the theory which describes the interaction between quarks and gluons is Quantum Chromodynamics (abbreviated as QCD). QCD enjoys two peculiar and counter-intuitive properties: asymptotic freedom and confinement. Confinement is the phenomenon for which at very large distances the strength of the interaction between the quarks increases. As a consequence the quarks are bound in composite particles called hadrons, which are classified into baryons (e.g. the proton or the neutron), and the unstable mesons (e.g. pions, kaons, D or B mesons). This confinement property of the strong interaction is the reason why quarks in nature have never been observed in isolation.

In fact the simple quark-line graphs shown in the left plot of fig. 1 are a gross oversimplification of the real situation. As an example, a more realistic picture of a non-leptonic decay is shown in the right plot of fig. 1. The complexity of strong interactions renders the study of these processes highly non-trivial, and not suitable to a perturbative treatment. The only known way to deal with strong interactions at low energies is to study QCD on a Euclidean space-time lattice: lattice QCD. Lattice QCD is a technique which allows to access a whole set of physically relevant quantities in a region where confinement is at work, and which would be inaccessible by any other theoretical mean. The lattice can be naturally mapped on a grid of CPUs and the local nature of the interaction is suitable to be simulated with stochastic methods on supercomputers containing thousands of CPU cores.

From the experimental side, over the last decade, a lot of information on heavy-quark decays has been collected in B-factories and in the years ahead LHC will continue to provide a wealth of new results. The experimental progress in heavy-flavour physics has been accompanied by a significant progress in theory, which was related to the discovery of heavy-quark symmetry, the development of the Heavy-Quark Effective Theory (HQET). In recent years different ideas have been proposed in order to combine HQET with lattice QCD. This project deals with one of these proposals. More

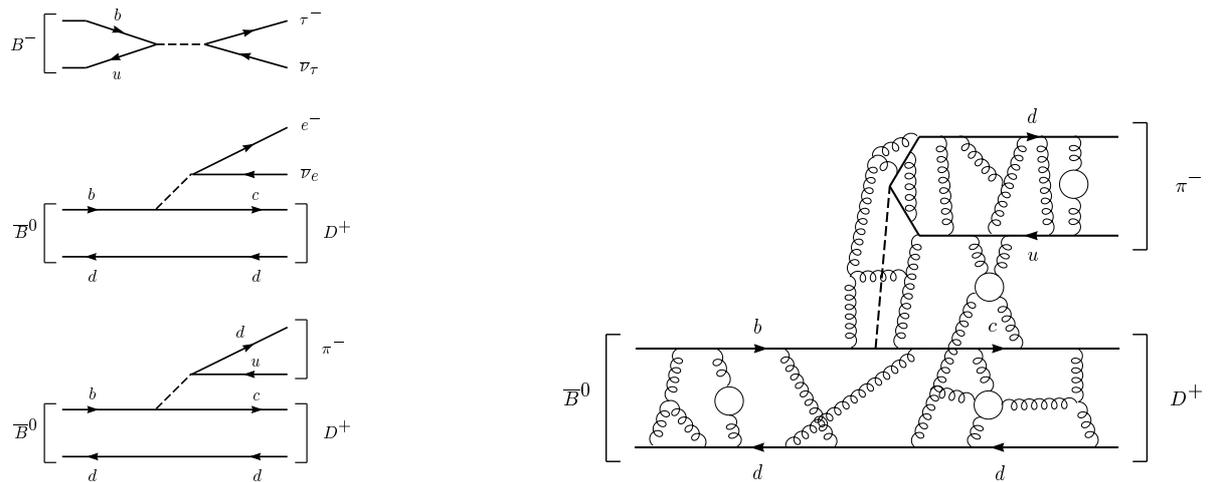


Figure 1: Left plot: examples of leptonic ($B^- \rightarrow \tau^- \bar{\nu}_\tau$), semi-leptonic ($\bar{B}^0 \rightarrow D^+ e^- \bar{\nu}_e$), and non-leptonic ($\bar{B}^0 \rightarrow 5D^+ \pi^-$) decays of B mesons. Right plot: More realistic representation of a non-leptonic decay.

specifically it concentrates on a precise computation of the b -quark mass and the so called B -mesons decay constants which are the single parameters parametrizing bound-state effects in leptonic decays.

One of the reasons why HQET is a very important tool is that at present, due to computer limitations, it is not possible, to work directly with the heaviest quarks (as the b -quark) propagating on the simulated lattice. We have devised a method, to overcome this difficulty which makes use of particular *ratios* of physical quantities computed at slightly different values of relativistic heavy quark masses. This novel approach to B-physics removes completely all the uncertainties on the static point results which are needed in standard Heavy Quark Effective Theory (HQET) inspired methods.

We plan to compute the b -quark mass and the pseudoscalar decay constants f_B and f_{B_s} with high precision. We also plan to start an investigation for the determination of the masses of baryons containing at least one heavy quark. When one performs QCD computation on a space-time lattice one has to specify in what way the QCD interaction is modified by the presence of a discrete lattice. There are several ways to define QCD on a lattice and they all differ by the so-called discretization errors or lattice spacing effects. If we have an hypercubic lattice with spacing a discretization errors are in principle at least of $O(a)$. If one chooses appropriately the way to describe QCD on a lattice one can try to reduce these errors to be smaller, e.asg. of $O(a^2)$. This is very important since the rate with what we reach the continuum QCD theory, i.e. sending $a \rightarrow 0$, is much faster. This implies that at finite a the results do not differ substantially

to the continuum QCD results giving us confidence when performing the extrapolation to $a = 0$.

We have used a way to describe QCD on an hypercubic lattice called Wilson twisted mass. This particular lattice theory has the advantage of ensuring and automatic removal of all the leading $O(a)$ lattice spacing corrections to all the physical quantities at the price of a single non-perturbative tuning of one of the parameters present in the theory.

With our approach we have already published on JHEP results obtained with a feasibility study and they are very encouraging [1]. They compare nicely with the state of art calculations today available in the literature as well as with Particle Data Group (PDG) numbers.

The precision of our first results published on JHEP is still not comparable with recent theoretical and experimental determinations. To fill this gap in this project we propose to improve in several technical aspects of our computation in order to be competitive with the best experimental determinations and to contribute in the search for New Physics beyond the SM.

More Information

1. B. Blossier *et al.* [ETM Collaboration]: "A proposal for B-physics on current lattices, JHEP **1004** (2010) 049 [arXiv:0909.3187 [hep-lat]].

Funding

German Research Foundation (DFG)

Habitabilität von Super-Erden: Gibt es eine Erde 2.0? Skalierungsgesetze für die Manteldynamik in Exoplaneten

J. Oberst, L. Noack, Institut für Geodäsie und Geoinformationstechnik, Technische Universität Berlin

Kurzgefasst

- Die Habitabilität eines Planeten hängt von verschiedenen Faktoren wie Klima und Plattentektonik ab.
- Wir nutzen 2D und 3D Konvektionsmodelle, welche Auskunft über dynamische Vorgänge im Inneren eines Planeten liefern, jedoch sehr zeitaufwändig sind.
- Aus den Konvektionsmodellen leiten wir Skalierungsgesetze für 1D Modelle ab.
- Planeten von großer Masse sind im Inneren einem hohen Druck ausgesetzt, der untere Mantel stagniert (genannt Low-Lid) und nimmt nicht an der Konvektion teil.
- Der Druck hat einen großen Einfluss auf das gesamte Konvektionsverhalten und die Plattentektonikwahrscheinlichkeit sowie die Ausgasung durch Vulkanismus, was wiederum Konsequenzen für das Klima hat.

Seit einigen Jahren beschäftigt sich die Astrophysik mit der Suche nach einem habitablen Planeten außerhalb unseres Sonnensystems, d.h. einem Planeten, der die Fähigkeit besitzt erdähnliches Leben zu beherbergen. Für die Habitabilität eines Planeten (zumindest für komplexes Leben) wird die Existenz von Plattentektonik meist als Grundvoraussetzung angenommen. Durch die Erneuerung der Oberfläche wird zum Einen das Treibhausgas CO_2 der Atmosphäre, welches in Sedimenten gebunden wird, dem Mantel zurückgeführt und daher das Klima stabilisiert. Der Mantel kühlt außerdem dank des Materialtransports aus dem Planeteninneren an die Oberfläche sehr effektiv ab. Dies trägt auch dazu bei, dass ein Magnetfeld entstehen kann bzw. beibehalten werden kann.

Für Modelle zur Simulation der Mantelkonvektion eines Planeten ist die Umsetzung der Plattentektonik mit realistischen Parametern heute noch nicht zufriedenstellend realisierbar. Es ist jedoch möglich, erdähnliche Referenzmodelle zu definieren und Tendenzen anhand von Parametervariationen zu studieren. Diese Ergebnisse können Aufschluss darüber geben, ob die Wahrscheinlichkeit, auf einer Super-Erde mit mehreren Erdmassen Plattentektonik zu erhalten, höher oder niedriger ist als bei einem Planeten von einer Erd-

masse. Abbildung 1 zeigt die vorläufigen Ergebnisse aus unserem Projekt bezüglich der Tendenz der Plattentektonik abhängig von Zeit und Masse [1]. Massereiche Planeten haben aufgrund des hohen Drucks einen stagnierenden unteren Mantel, so dass die Plattentektonikwahrscheinlichkeit mit der Masse abnimmt. Kleine oder kalte Planeten können ebenfalls keine Plattentektonik entwickeln, da die Konvektion im Mantel zu schwach ist.

Für die Simulation und Abschätzung der Habitabilität eines extrasolaren Planeten werden aus den dreidimensionalen Mantelkonvektionsmodellen allgemein gültige Gesetze, die so genannten Skalierungsgesetze, hergeleitet. Diese können dann von eindimensionalen parametrisierten Modellen benutzt werden. Der Vorteil dieser Modelle liegt in dem niedrigen Anspruch an Rechenressourcen, weshalb sie bis heute von vielen Forschern benutzt werden. Einfache Skalierungsgesetze wurden bereits in den letzten Jahrzehnten für kleine bis erdgroße Planeten hergeleitet. Für massereichere Planeten können diese Skalierungsgesetze nicht mehr benutzt werden. In unserem Projekt leiten wir allgemein anwendbare Skalierungsgesetze her. Bei druckabhängigen Rheologien scheint ein simples globales Skalierungsgesetz nicht ausreichend zu sein, da sich die Abhängigkeiten von Geschwindigkeit und Wärmetransport stark mit der Tiefe verändern und nicht global beschrieben werden können. Eine besondere Rolle spielt dabei der untere Mantel, welcher bei sehr massereichen Planeten in einem rein konduktiven Regime ist, was von uns Low-Lid genannt wird [2]. Wir konnten bereits zeigen, dass ein Low-Lid entsteht, wenn die Viskosität mit der Tiefe um den Faktor 10^5 zunimmt [2]. Interessanterweise wurde bereits eine gleiche Klassifikation für die Lithosphäre (stagnierendes oberes Lid) festgelegt. Es ist überraschend, dass die Lithosphäre und das Low-Lid eine ähnliche Abhängigkeit von der Viskosität aufzeigen, obwohl die Lithosphäre durch die kalten Oberflächentemperaturen entsteht, während das Low-Lid durch den hohen Druck an der Kern-Mantel-Grenze gebildet wird.

Ein weiterer Schwerpunkt des Projektes liegt auf dem Vergleich zwischen dem exponentiellen Arrhenius Gesetz für die Berechnung der Viskosität im Mantel und einer stark vereinfachten, jedoch sehr beliebten Viskositätslinearisierung, der Frank-Kamenetskii (FK) Approximierung. Diese Approximierung entsteht durch eine einfache Anwendung der Taylor-Reihenentwicklung um einen vorher bestimmten Linearisierungspunkt (an dem die Ap-

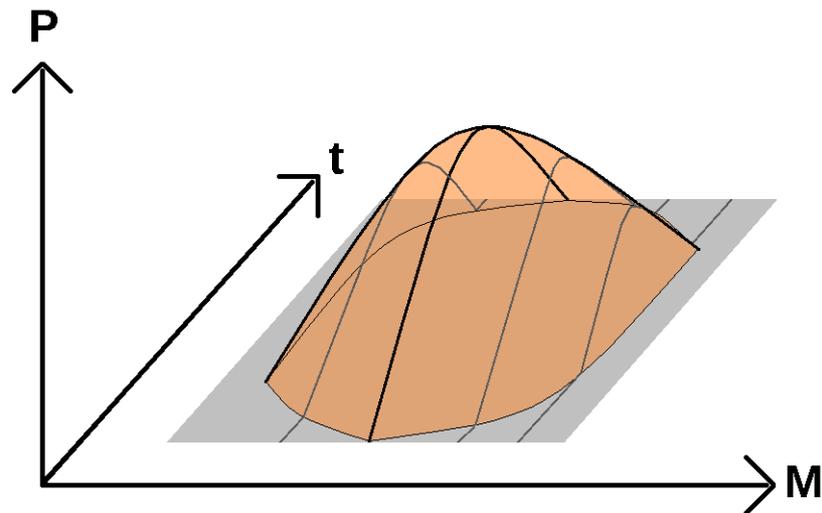


Abbildung 1: Tendenz (P; engl. propensity) der Plattentektonik auf Super-Erden abhängig von Zeit (t) und Masse (M).

proximierung exakt ist) und reduziert den Viskositätskontrast im Mantel. Bisher wurde diese Approximierung jedoch nur für temperaturabhängige Rheologien hergeleitet. Entweder wurde der Druck vernachlässigt, oder der Druck wurde in die einfache temperaturabhängige Approximierung eingesetzt, was zu falschen Ergebnissen führt. Oder die Effekte der Druckabhängigkeit wurden einfach geraten. Wir konnten zeigen, dass für die Benutzung eines realistischen Druckes bei einigen Simulationen die Approximierung nicht benutzbar ist. Wir haben jedoch eine neue FK Approximierung höherer Ordnung hergeleitet. Sie führt in allen untersuchten Fällen zu der gewünschten Genauigkeit und behält die Vorteile der FK Approximierung (kleiner Viskositätskontrast im Mantel) bei [3]. Die Herleitung der Skalierungsgesetze für temperatur- und druckabhängige Rheologien ist daher unabhängig von dem benutzten Viskositätsgesetz, falls die komplexere FK Approximierung benutzt wird.

Weitere gängige Vereinfachungen bei der Simulation der Mantelkonvektion sind die Vernachlässigung der Kompressibilität des Mantelgesteins sowie die Reduktion eines nichtlinearen Kriechverhaltens des Gesteins im oberen Mantel auf eine Newtonsche Rheologie, bei der die Viskosität des Mantels spannungsunabhängig berechnet wird. Skalierungsgesetze wurden bisher lediglich für inkompressible und meist Newtonsche Rheologien hergeleitet. Diese Vereinfachungen sind für Planeten inakzeptabel, welche größer als die Erde sind. Die Skalierungsgesetze werden daher im Rahmen unseres Projektes an realistischere Gegebenheiten angepasst, die nichtlineare Rheologie wird am Planeten Merkur [4] getestet.

Mehr zum Thema

1. Stamenkovic, V., L. Noack und D. Breuer, 2010: Low-lid formation on Super-Earths and implications for the habitability of Super-Earths and Sub-Earths. EGU General Assembly 2010, Geophys. Res. Abstracts 12, EGU2010-9380.
2. Noack, L., V. Stamenkovic und D. Breuer, 2010: Pressure-Dependent Viscosity on Sub-Earths and Super-Earths. EGU General Assembly, Vienna, 2010.
3. Noack, L. und D. Breuer, 2010: Damped Frank-Kamenetskii Approximation for Temperature- and Pressure-Dependent Rheologies and Consequences for the Simulation of Super-Earths. Geodynamik Workshop Münster, 06.-08.10.2010.
4. Grott, M., H. Hussmann, J. Oberst und M. Wählisch, 2009: Terrestrial Planets and Satellites: Geodetic and geophysical data. Landolt-Börnstein VI B, Springer, 182-199.

Förderung

HGF-Forschungsallianz "Planetary Evolution and Life"

Nanostructures for biosensing devices Functionalization of semiconductor nanowires

A.L. da Rosa, N.H. Moreira, Th. Frauenheim,
Universität Bremen

Abstract

- Tailored nanodevices with a specific functionality, or combining various functionalities, can be designed by capping the surface of nanostructures with organic molecules.
- The design of such devices with optimal performance requires a deep understanding of their physical properties such as the investigation of surface defects and surface functionalization.
- In this project we employ first principles density functional theory to design hybrid semiconductor nanostructures with specific functionality via surface modification and doping.
- Equilibrium structures of semiconductor nanowires functionalized with organic molecules are investigated. We propose optimal anchor groups for functionalization of these wires.

There is considerable technological interest in combining organic molecules with semiconductor nanostructures in order to obtain hybrid materials with novel properties, which includes highly specific sensors and new multifunctional devices. Nanostructured materials have large surface-to-volume ratios which offer a unique possibility of enhanced sensitivity and selectivity. Chemical species introduced onto the surface of such nanostructures could then be employed to create novel hybrid multi-functional devices. Nowadays, the used sensing devices require large complexity and time-consuming sample preparation and offer limited sensitivity. Compared to two-dimensional planar devices, where binding to the surface leads to depletion or accumulation of charge carriers only on the surface region, the charge accumulation or depletion in the one-dimensional nanostructures takes place in the bulk region of the structure, which gives rise to large changes in their electrical properties. Such a feature is particularly desirable for rapid and real time detection of biomolecules and proteins. One of the crucial aspects for the realization of such hybrid systems is the understanding of the semiconductor/organic interface.

ZnO can offer many advantages, such as good conductivity, many transport channels at the nanoscale, excellent chemical stability and biocompatibility. Surface modification of ZnO nanostructures should provide immobilization of further

attached biological or organic molecules through covalent binding. Due to the complexity of the systems, it is not always straight forward to obtain all aspects of ZnO/organic interface by experimental characterization. In this context, density functional calculations are a powerful tool for the quantitative interpretation of experiments, and can help to determine the most stable binding groups, the geometry of the adsorbed molecules as well the electronic and electrical properties of the ZnO/organic system.

We employ density-functional theory based methods, including first-principles and tight-binding approaches to investigate structural and electronic properties of hybrid ZnO/organic nanowires. We have investigated the chemical interactions between ZnO nanowire facets and several organic functional groups. Moreover we have investigated dopants in ZnO wires for spintronics applications.

We have demonstrated the covalent functionalization of (10 $\bar{1}$ 0)-ZnO surfaces with carboxylic acids. We have found two thermodynamically stable surface configurations: a monolayer coverage with a bidentate chelating ligand and a half-monolayer coverage with a bidentate bridging ligand (as shown in Fig.1). In both cases, the electronic band structures show the presence of covalent surface/adsorbate interactions. Besides, a nonbonding carboxylate character is verified for the bidentate adsorbate[2],[4].

Besides we have calculated the atomic relaxations and formation energies for neutral and charged defects using an empirical potential alignment procedure. Oxygen vacancies and zinc interstitials have been found the lowest energy defects under Zn-rich conditions, with oxygen interstitials and zinc vacancies favored under O-rich conditions. Most defects have been found favorable on the surface of the wire, with exception of the charged oxygen interstitials, which prefer inner positions to allow a better charge accommodation observed there. Besides, we have also investigated the interaction between oxygen vacancies and carboxylic acids, demonstrating that an oxidation-reduction reaction may explain the suppression of green luminescence bands experimentally observed for organic-coated ZnO nanowires[1].

Finally we investigate the formation energies, electronic structure, and magnetic properties of N impurities in ZnO nanowires. While the subsurface position is the preferential site for the N dopants in bare nanowires, upon hydrogen passivation N atoms segregate to surface sites. Additionally we

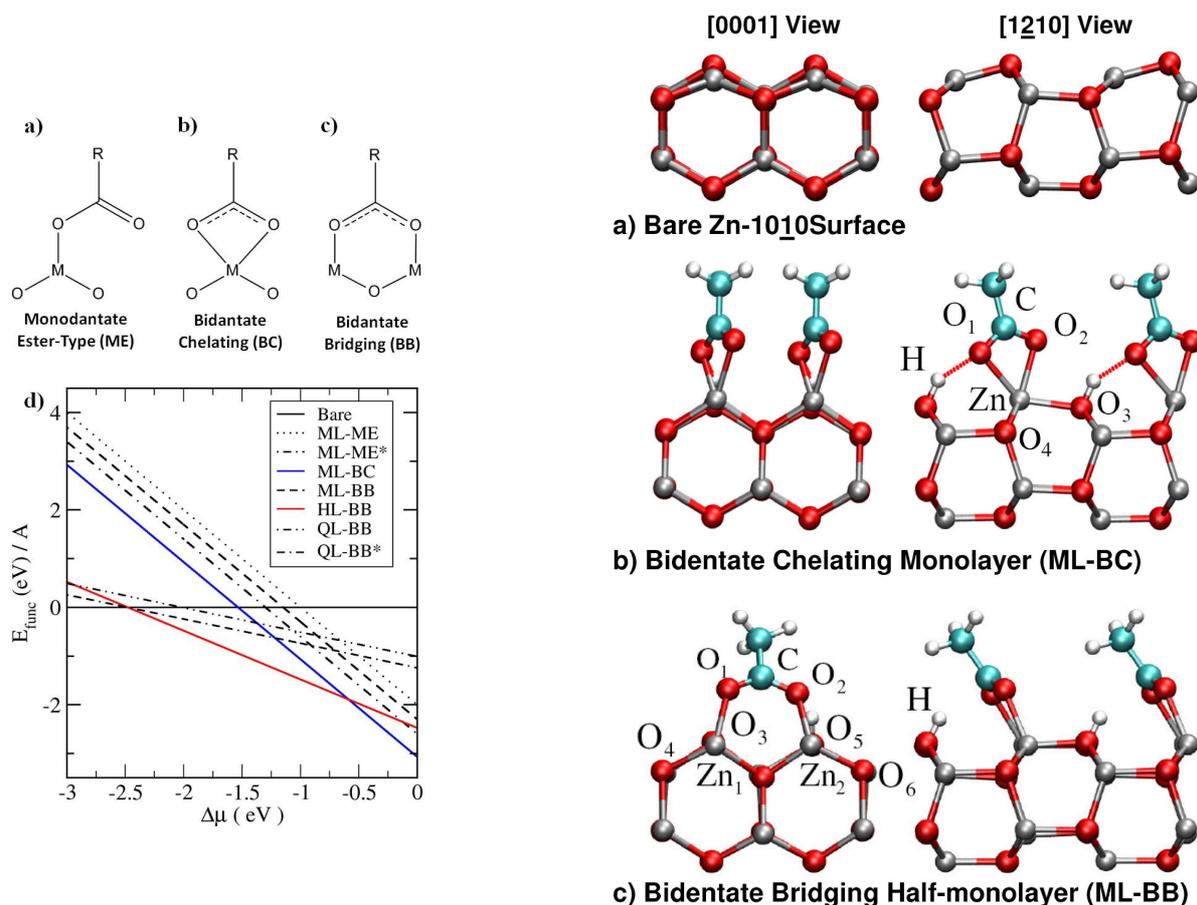


Figure 1: The stability of acetic acid on ZnO ($10\bar{1}0$) surfaces. The picture on the left shows the surface phase diagram for the most stable structures. The picture on the right shows the optimized geometries for $\text{CH}_3\text{-COOH}$ on $\text{ZnO}(10\bar{1}0)$.

show that the defect levels in these ultra-thin wires are deeper than the ones in bulk ZnO, suggesting strong quantum dimensional effects. Finally we investigate the possibility of ferromagnetism induced by N in ZnO nanowires. Our spin-polarized calculations show that, although N introduces a small net magnetic moment in ZnO, the interaction between N dopants is weak and strongly dependent on the N position[3].

3. N-doped ZnO nanowires: surface segregation, the effect of hydrogen passivation and applications in spintronics, H. Xu, A. L. Rosa, Th. Frauenheim and R. Q. Zhang, *phys. stat. sol. (b)* **247**, 2195(2010)
4. First principles calculations of atomic and electronic properties of ZnO nanostructures, W. Fan, H. Xu, D. Fang, A. L. Rosa, R. Q. Zhang and Th. Frauenheim, *phys. stat. sol. (b)* Feature Article, **247**, 2581 (2010)

More Information

1. Native Defects in ZnO Nanowires: Atomic Relaxations, Relative Stability and Defect Healing with Organic Acids, N. H. Moreira, B. Aradi, A. L. Rosa and Th. Frauenheim, *J. Phys. Chem. C* **114**, 18860 (2010)
2. Glycine Adsorption on ($10\bar{1}0$)-ZnO Surfaces, A. Dominguez, N. H. Moreira, G. Dolgonos, A. L. Rosa and Th. Frauenheim, *J. Phys. Chem. C*, (2010) accepted

Funding

German-Israeli Cooperation Program (DIP); DFG Priority Programme 1165

Heisser Tanz Verschmelzung von Neutronensternen

C. Lämmerzahl, S. Rosswog, Universität Bremen, Jacobs University Bremen

Kurzgefasst

- Doppelsternsysteme aus Neutronensternen sind Laboratorien für Physik unter extremsten Bedingungen.
- Sie sind starke Quellen von Gravitationswellen, die man in naher Zukunft zu detektieren hofft.
- Ihre Verschmelzung ist vermutlich verantwortlich für einige der leuchtkräftigsten Explosionen im Universum seit dem Urknall.

Die Entwicklung von Sternen vollzieht sich in Stadien ähnlich denen eines menschlichen Lebens. Am Beginn steht die Geburt eines Sternes durch den Gravitationskollaps einer interstellaren Gaswolke. Der Kollaps wird gestoppt, wenn der Gasdruck im Inneren der kollabierenden Region groß genug wird, um der Eigengravitation Paroli zu bieten: ein 'Proto-Stern' ist geboren. Übersteigt die Zentraltemperatur mehrere Millionen Grad, setzt Wasserstoffbrennen ein. Diese Brennphase ist die längste in einem Sternenleben. Danach können sich weitere Brennphasen anschließen: ist der Brennstoffvorrat der aktuellen Phase aufgebraucht, kommt es zu einer Kontraktion und Temperaturerhöhung, die die nächste Brennphase einläutet, in der die 'Asche' der vorherigen Phase als neuer Brennstoff dient. Wie weit ein Stern in dieser Entwicklung kommt, hängt von seiner ursprünglichen Masse ab. Leichte Sterne können bereits nach dem Helium- oder Kohlenstoffbrennen nicht weiter kontrahieren, ihre Eigengravitation ist zu schwach. In ihrem Todeskampf stoßen sie ihre äußere Hülle ab, zurück bleibt ein 'planetarischer Nebel', in dessen Zentrum der noch glühend heiße Kern des Sternes, ein 'Weisser Zwerg', zurückbleibt. Sterne, die etwa die achtfache Masse unserer Sonne übersteigen, durchlaufen einer Reihe weiterer Brennphasen bis sich ein Eisenkern im Zentrum des Sterns gebildet hat. Eisengruppenelemente können aus kernphysikalischen Gründen nicht weiter fusionieren, deshalb wächst der zentrale Eisenkern bis zu einer kritische Masse, bei der er kollabiert. Dieser Kollaps läutet das finale Feuerwerk ein, in dem der massereiche Stern sein Leben aushaucht: eine Supernova. Dabei zerstört er einen Großteil der Elemente, die er über seine Lebenszeit synthetisiert hat. Zurück bleibt, abhängig von der ursprünglichen Sternmasse, entweder ein Neutronenstern oder ein Schwarzes Loch.

Neutronensterne bestehen, wie im Namen angedeutet, überwiegend, aber nicht ausschliesslich, aus Neutronen. Diese liegen dicht gepackt, wobei die Dichte im Neutronenstern sogar jene in einem Atomkern übersteigt. In diesem Sinne kann man sich einen Neutronenstern als einen gigantischen Atomkern vorstellen, mit einem Radius von etwa 15 Kilometern und etwa dem 1.4-fachen der Masse der Sonne. Die Physik in einem Neutronenstern ist in jeder Hinsicht extrem: sein Gravitationsfeld krümmt nach Einsteins Relativitätstheorie die Raumzeit, sein Magnetfeld kann in Extremfällen jenes der Erde um einen Faktor von 10^{15} übersteigen, und seine zentrale Dichte übertrifft alles, was in Laborexperimenten bei der Kollision von Atomkernen erreicht werden kann, um ein Vielfaches.

Die Mehrzahl der Sterne im Universum befindet sich Doppel- oder Mehrfachsystemen, ein isolierter Stern wie unsere Sonne ist also eher die Ausnahme denn die Regel. Um ein Doppelsternsystem aus zwei Neutronensternen zu formen, muss das ursprüngliche Sternensystem zwei Supernova-Explosionen überstehen. In der Mehrzahl der Fälle wird das System von der Wucht der Explosionen zerfetzt, aber in einigen wenigen Fällen überlebt tatsächlich ein Doppelsternsystem aus zwei Neutronensternen. Momentan sind 10 solcher Systeme bekannt. Diese stellen Physiklabore von unschätzbarem Wert dar. Das erste derartige System, das entdeckt wurde, der Binärpulsar PSR 1913+16, lieferte die ersten, wenn auch indirekten, Hinweise für die Existenz der von der Relativitätstheorie vorhergesagten Gravitationswellen. Ein solches relativistisches Binärsystem emittiert Energie und Drehimpuls in Form von Gravitationswellen, wodurch die Orbitalbewegung langsam, aber messbar 'ermüdet': die beiden Sterne spiralisieren langsam aufeinander zu. Für den ersten Nachweis der Existenz von Gravitationswellen wurden die Entdecker des Systems, Russel Hulse und Joseph Taylor, 1993 mit dem Nobelpreis für Physik belohnt. Vor kurzem haben mehrere bodengebundene Gravitationswellendetektoren ihre Arbeit aufgenommen. Die vielversprechendsten Systeme für den ersten *direkten* Gravitationswellennachweis sind Doppelsternsysteme aus Neutronensternen.

Gewöhnlich ist es sehr schwierig, die Massen von Sternen genau zu bestimmen. Bei Doppelsternsystemen kann man über das Dritte Keplersche Gesetz relativ einfach wenigstens die *Gesamtmasse* bestimmen. Bei relativistischen Dop-

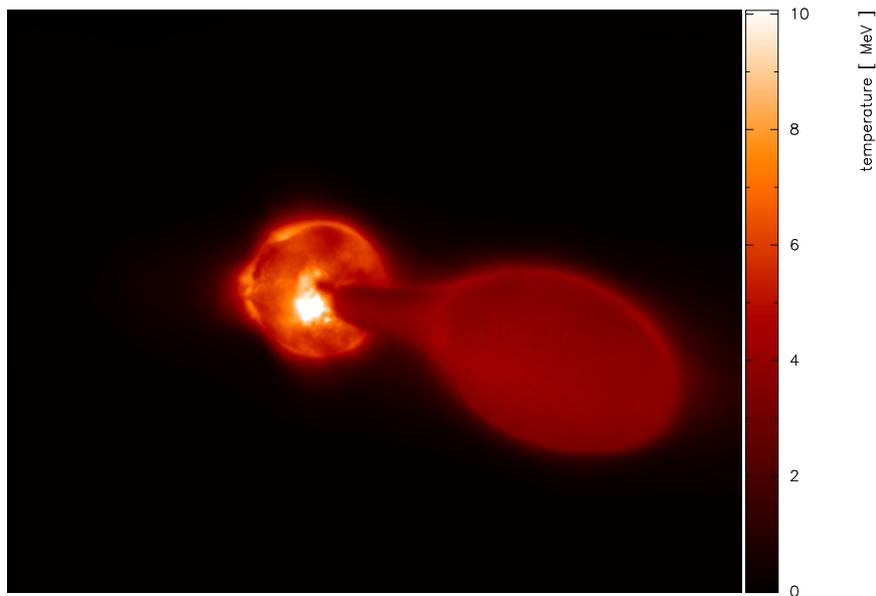


Abbildung 1: Kollision zweier Neutronensterne mit 1.3 und 1.4 Sonnenmassen. Farbkodiert ist die Oberflächentemperatur in Einheiten von MeV, 1 MeV entspricht etwa 10^{10} Kelvin.

pelsternsystemen wie dem Doppelneutronensternsystem PSR 1913+16, erlaubt die Messung von zwei relativistischen Effekten die Bestimmung *individueller* Sternmassen. Die Massen von PSR 1913+16 konnten mit unglaublicher Präzision zu $m_1 = 1.4414 M_\odot$ and $m_2 = 1.3867 M_\odot \pm 0.0002 M_\odot$ [1] bestimmt werden (M_\odot : Masse unserer Sonne). Derartig genau bestimmte Massen bilden wichtige Testfälle für die Theorie der Materiezustandsgleichung jenseits von Kernmateriedichte. Solche relativistischen Doppelsternsysteme stellen darüber hinaus 'Gravitationslabore' dar, die längerfristig eine Unterscheidung zwischen der Allgemeinen Relativitätstheorie und alternativen Gravitationstheorien erlauben könnten.

Die Emission von Gravitationswellen treibt ein relativistisches Binärsystem kontinuierlich näher auf einander zu, so dass es letztendlich zu einem Verschmelzen der beiden Neutronensternkomponenten kommt. Bei einer solchen Verschmelzung werden in Sekundenbruchteilen Gravitationsbindungsenergien von etwa 10^{53} erg frei, mehr Energie als die Sonne seit Bestehen des Universums hätte abstrahlen können. Dieses Verschmelzen erzeugt wahrscheinlich einen sogenannten (kurzen) Gamma-ray Burst [2], eine der leuchtkräftigsten Explosionen im Universum seit dem Urknall.

In einem solchen Verschmelzungsprozess wird außerdem neutronenreiche Materie ins All geschleudert, wobei wahrscheinlich einige der schwersten Elemente im Universum, sogenannte 'R-Prozess' (für 'rapid neutron capture') Elemente, synthetisiert werden [3].

Die Simulation eines solchen Verschmelzungsprozesses ist eine typische Multi-Physik Anwendung: die Materiebewegung wird über (Lagrange) Hydrodynamik-Gleichungen mit Eigengravitation beschrieben. Darüber hinaus ist es wichtig, den von der Materie ausgeübten Druck korrekt mittels einer nuklearen Zustandsgleichung zu berechnen, und weitere physikalische Prozesse wie Kühlung durch Neutrino-Prozesse und die dynamische Entwicklung von Magnetfeldern zu berücksichtigen. All diese Physik-Module sind im Programmpaket MAGMA [4] implementiert. Die ersten Neutronensternsimulationen sind kürzlich am HLRN begonnen worden. Abbildung 1 zeigt einen 'Schnappschuß' einer ersten Simulation der Kollision zweier Neutronensterne.

Mehr zum Thema

1. J. M. Weisberg, J. H. Taylor, in: Binary Radio Pulsars, vol. 328 of Astronomical Society of the Pacific Conference Series, 2005.
2. Eichler et al., Nature 340 (1989) 126; Rosswog et al., MNRAS 345 (2003) 1077
3. Lattimer & Schramm, ApJ 192 (1974) L145 ; Freiburghaus et al., ApJ 525 (1999) L121
4. Rosswog & Price, MNRAS 379 (2007) 915

Förderung

Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG)

Cosmic Magnetic Fields

Magnetic fields in galaxy clusters

C. Lämmerzahl, M. Brueggen, Universität Bremen

Kurzgefasst

- In this project we simulate cosmic magnetic fields in galaxy clusters which are the largest structures in the universe.
- Cosmic magnetic fields can be inferred from radio observations of synchrotron radiation.
- An innovative European radio telescope will yield unprecedented insights into cosmic magnetic fields.
- By comparing simulations performed at the HLRN with observation we can probe plasma physics under conditions unattainable on Earth.

For quite a while, astronomers have known that the gas between the stars of a galaxy as well as the cosmic medium between galaxies is magnetized, generating giant magnetic fields that stretch over several millions of light years. However, very little is known about their origin and the impact they have on the development of galaxies. Very often galaxies come in groups of hundreds to thousands of galaxies, and these associations are called galaxy clusters. Inside a cluster the space between galaxies is filled with very hot and dilute gas. Observations with radio telescopes have shown that this gas is magnetized and that the magnetic field is roughly a 100.000th of the Earth's magnetic field (at the surface).

The key to the analysis of these magnetic fields in outer space is the so-called synchrotron radiation of electrons, which is generated by the electrons' orbital acceleration at near light-speed through these magnetic fields. The electrons were charged with the energy necessary for such radiation through shock waves of cosmic catastrophes like supernova explosions, collisions of galaxies or even galaxy clusters. The radiation pattern of the electrons, which reflects the stars' or galaxies' history, thus becomes a marker for surveying and interpreting the magnetic fields from Earth, which would otherwise not be possible.

Central to the effective and sensitive detection of the cosmic synchrotron radiation is the newly constructed digital telescope LOFAR (acronym for Low Frequency ARray). While classical radio telescopes collect cosmic radiation with motor-operated dish-like antennae, which scan different areas of space with computer-controlled movements, LO-

FAR does not require any moving parts. It consists of a set of simple, small radio antennae fixed to the ground that are spread all over Europe. One antenna station, constructed by Jacobs University, is positioned close to the German city of Jülich.

All data coming in from the different antenna locations are correlated by one of the world's fastest supercomputers located in Groningen (The Netherlands). This way, the array of antennae acts like a giant radio-telescope with an equivalent dish-size of several hundred kilometres in diameter, which not only provides the telescope with a so far unparalleled sensitivity. To analyse these observations, astronomers need to model cosmic magnetic fields.

Even though the magnetic field in the space between galaxies is so weak, it has a profound impact on the dynamics of the gas and thus also on the lives of the galaxies. The reason for this is that heat in the gas is transported almost exclusively along magnetic field lines. Hence, the shape of the magnetic field is crucial for the temperature distribution inside a galaxy cluster. The regulation of the temperature inside this intergalactic gas is important for its cooling and condensation onto the galaxies. In this way, the rate at which galaxies grow by accumulating gas from their environment is controlled by the magnetic fields around them. In supercomputer simulations performed at the HLRN, astronomers from Bremen simulate these processes. The direct comparison with radio observations makes clusters of galaxies unique laboratories for plasmas physics under conditions that cannot be observed anywhere else. For such dilute plasmas with particle densities of less than 0.1 particles per cube centimetres and temperatures of millions of Kelvin many fundamental properties are completely unknown. Astronomical observations of objects that are millions of light years away in combination with supercomputer simulations, thus lead to insights into the microphysics of plasmas. For further reading see, e.g., [1].

Mehr zum Thema

1. Ruszkowski, M., Lee, D., Bruggen, M., Parrish, I., & Oh, S. P. 2010, arXiv:1010.2277

Förderung

BMBF Verbundprojekt D-LOFAR

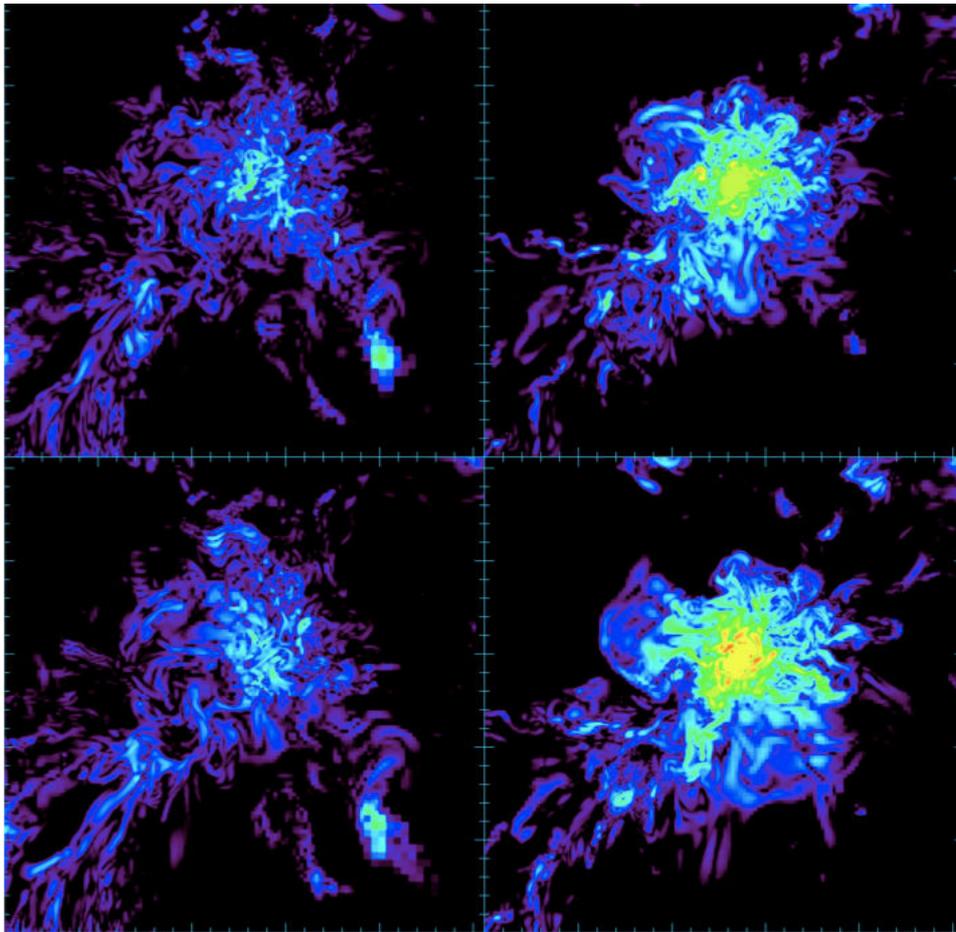


Abbildung 1: Cross sections through the cluster center showing the distribution of the logarithm of the magnetic field pressure. The minimum and maximum range of magnetic field values is the same in all panels. Right column is for radiative runs and bottom row is for the runs with anisotropic thermal conduction. All panels show the central region that measures 8/h Mpc on the side. From Ruszkowski et al. 2010.

Wie sehen Sterne und extrasolare Planeten eigentlich aus? 3D Strahlungstransport & Rechnungen mit dem PHOENIX/3D Code

P. Hauschildt, Hamburger Sternwarte

Kurzgefasst

- In den letzten 15 Jahren wurden hunderte von Planeten ausserhalb unseres Sonnensystems entdeckt und beobachtet.
- Mit einer detaillierten Analyse dieser Daten kann man physikalische Bedingungen (Temperaturen, Drücke) und chemische Zusammensetzung der Stern- und Planetenatmosphären bestimmen.
- Unser Projekt simuliert die Physik und Chemie der Atmosphären von Planeten und Sternen und ermöglicht dadurch die Bestimmung der wichtigen Parameter der Planeten und Sterne.
- Dazu ist der Aufbau der Atmosphäre zusammen mit dem chemischen Gleichgewicht und dem Transport von Licht durch das Gas bei sehr vielen verschiedenen Wellenlängen zu berechnen. Dabei ist besonders der 3D-Strahlungstransport extrem komplex und sehr aufwendig.
- Unser Simulationsprogramm PHOENIX/3D ist daher sehr umfangreich. Eine typische Simulation auf dem HLRN verwendet mindestens 4096 Kerne für 48 Stunden. Dabei werden bis zu 50 PB Daten generiert, von denen zur Zeit nur ca. 1TB permanent gespeichert werden können.

In den letzten 15 Jahren wurden hunderte von Planeten ausserhalb unseres Sonnensystems entdeckt. Mit den größten Teleskopen (auf der Erde und im Weltraum) können die Atmosphären dieser Exo-Planeten beobachtet werden. Dabei werden heute Spektren des ausgesandten Lichtes über einen großen Wellenlängenbereich gemessen. In der nahen Zukunft werden durch neue Teleskope und Beobachtungsverfahren auch echte Bilder der Atmosphären gemacht werden können. Das große Problem bei diesen Beobachtungen ist der Elternstern der Planeten, der 10 000 bis 1 Million mal heller als der Planet ist. Daher werden zur Beobachtung spezielle Techniken benötigt, und es können bisher nur wenige Planeten detailliert beobachtet werden. Mit einer detaillierten Analyse dieser Daten kann man die physikalischen Bedingungen (Temperaturen, Drücke) und die chemische Zusammensetzung der Stern- und Planetenatmosphären bestimmen (und vielleicht sogar Biomarker entdecken). Ein genaues Verständnis der Physik der Atmosphären und ihrer Lichtemission ist aber auch für die Entwicklung von neuen Beobachtungsmethoden notwendig (z.B., um vor-

hersagen zu können, bei welchen Wellenlängen man erdähnliche Planeten am besten beobachten kann).

Unser Projekt simuliert die Physik und Chemie der Atmosphären von Planeten und Sternen und ermöglicht dadurch die Bestimmung der wichtigen Parameter der Planeten und Sterne. Dazu haben wir über die letzten 20 Jahre das Modellatmosphären-Programmpaket PHOENIX entwickelt. Damit können sowohl 1D (kugelsymmetrische) als auch 3D Modelle der Atmosphären und Spektren für fast alle Typen von Sternen und Exo-Planeten sehr detailliert simuliert werden. 1D-Simulationen kommen dabei mit wenigen (8-64) Kernen aus und brauchen relativ wenig Hauptspeicher und Rechenzeit. Bei 3D-Modellen ist der Bedarf an Hauptspeicher, Festplattenplatz und Rechenzeit so gewaltig, dass diese Rechnungen nur auf Systemen wie dem HLRN machbar sind. Das Programmpaket PHOENIX ist dafür ausgelegt, möglichst viele verschiedene Atmosphärentypen zu simulieren. Dadurch wird die Entwicklung insgesamt effizienter und die verschiedenen Module von PHOENIX können unter sehr unterschiedlichen Bedingungen verifiziert werden.

Für alle unsere Simulationen ist es notwendig, den Aufbau der Atmosphäre zusammen mit dem chemischen Gleichgewicht und dem Transport von Licht bei sehr vielen verschiedenen Wellenlängen zu berechnen. Dabei ist besonders der 3D-Strahlungstransport extrem komplex und sehr aufwendig, da er die Lösung von mathematisch 6-dimensionalen Gleichungen erfordert, und spezielle Methoden zur genauen Behandlung von Lichtstreuung in den Atmosphären notwendig sind. Bei Planeten muss die Einstrahlung durch den Elternstern modelliert werden. Durch sie erhöhen sich die Temperaturen auf der "Tagseite" des Planeten um bis zu 1000 K. Die 3D-Strahlungstransport-Module benötigen als Eingabe eine Beschreibung der Wechselwirkung der atmosphärischen Gase mit dem Licht. Dabei berücksichtigen wir bis zu 1 Milliarde individuelle Übergänge in Atomen und Molekülen. Diese bilden oft stark überlappende Bandensysteme, die das emittierte Licht beeinflussen. Der Vergleich der simulierten Banden mit den Beobachtungen erlaubt die chemische Analyse der Atmosphären. Als Ergebnis dieser Berechnungen erhalten wir nicht nur genaue Information über den Energiefluß innerhalb der Atmosphären und ihre Zusammensetzung, sondern auch detaillierte Bilder für eine Vielzahl von Wellenlängen und Betrachtungsrichtungen (siehe auch Abbildung 1).

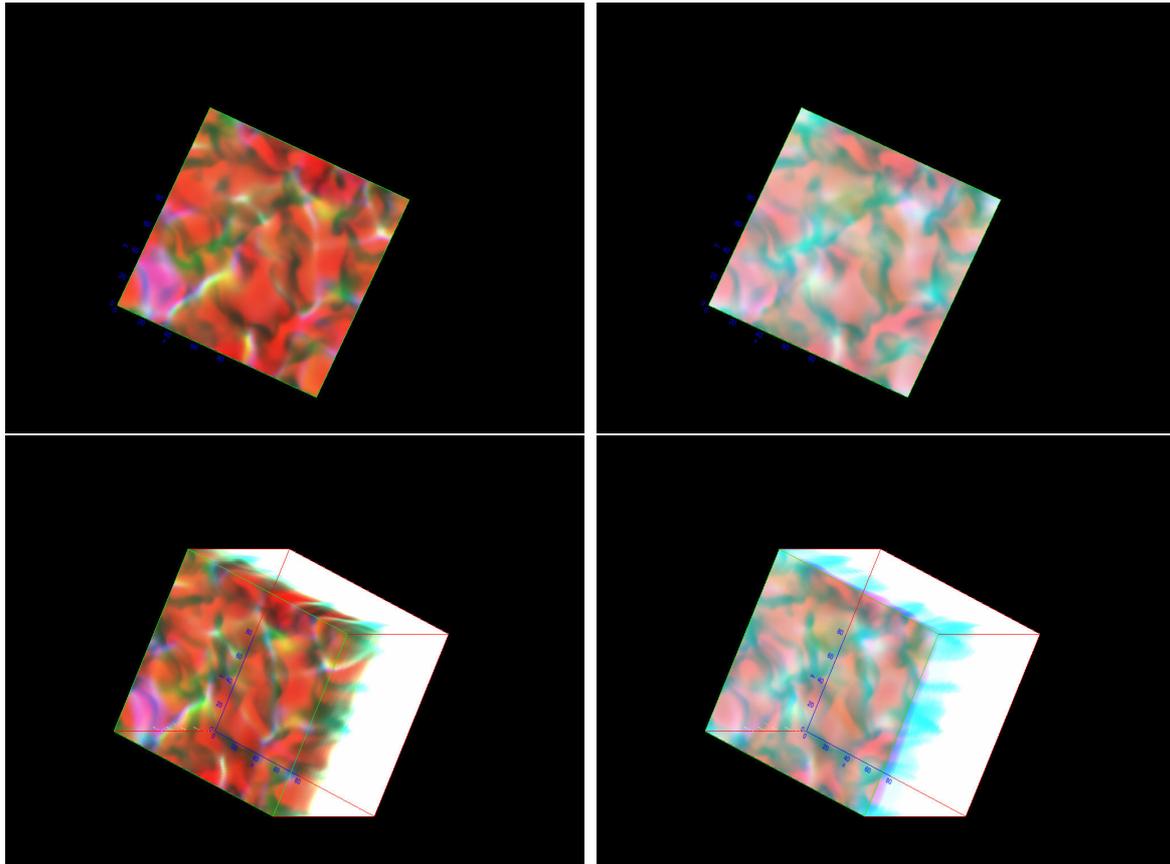


Abbildung 1: Visualisierung eines Modells der Strömungen in der Sonne (aus [2]) Die Bilder sind direkte Ergebnisse der 3D Strahlungstransportrechnungen mit PHOENIX/3D. Es werden 3 verschiedene Wellenlängen mit den Farben Rot, Grün und Blau dargestellt. Die Bilder auf der linken Seite stehen für eine Simulation ohne Streuung von Licht, die Bilder auf der rechten Seite für ein Modell mit starker Lichtstreuung. Die Streuung verursacht den 'Nebel' in diesen Bildern.

Unser Simulationsprogramm PHOENIX ist durch die komplexen Simulationsanforderungen sehr umfangreich (ca. 1.1 Million Zeilen Fortran95) und komplex. Wir haben es mit MPI (ca. 22000 Zeilen mit MPI-Aufrufen) parallelisiert, und entwickeln eine Implementation der zentralen 3D-Strahlungstransportroutinen in OpenCL, um auch GPUs nutzen zu können. Um eine Simulation auf dem HLRN durchführen zu können, werden mindestens 4096 Kerne für bis zu 48 Stunden benötigt. Dabei wird durch eine hierarchische Parallelisierung eine Gebietszerlegung im Raum mit einer Gebietszerlegung der Lichtwellenlängen kombiniert. Während einer Simulation werden ca. 10-50 PB Daten generiert, von denen zur Zeit nur ca. 1TB permanent gespeichert werden können.

Mehr zum Thema

1. Hauschildt, P.H., and Baron, E.: 2010, *A 3D radiative transfer framework: VI. PHOENIX/3D example applications*, A&A, **509**, 36.
2. Hauschildt, P.H., and Baron, E.: 2008, *A 3D radiative transfer framework: III. periodic boundary conditions*, A&A, **490**, 873-877.
3. Hauschildt, P.H., Barman, T., and Baron, E.: 2008, *Irradiated Planets*, Physica Scripta Volume T, **130**, 014033.
4. Bean, J. L., Sneden, C., Hauschildt, P.H., Johns-Krull, C. M., and Benedict, C. F.: 2006, *Accurate M Dwarf Metallicities from Spectral Synthesis: A Critical Test of Model Atmospheres*, ApJ, **652**, 1604-1616.

Förderung

DFG-Graduiertenkolleg 1351; DFG-Sonderforschungsbereich 676; DFG-Einzelförderung

Von exotischer Quantenphysik zur Nanotechnologie

Ab initio Theorie elektronischer und magnetischer Störstellen in Graphen und verwandten Materialien

A. Lichtenstein, T. Wehling, 1. Institut für Theoretische Physik, Universität Hamburg

Kurzgefasst

- Graphen ist nur ein Atom dick und zeigt außergewöhnliche elektronische Eigenschaften.
- Kontrollierte Manipulation von Graphen durch Fremdatome erlaubt die Beobachtung von exotischer Quantenphysik und ist mögliche Basis nanotechnologischer Anwendungen.
- Verständnis von Störstelleneffekten ermöglicht gezielte Optimierung der Elektronenbeweglichkeit in Graphen.
- Quantenmechanische Simulationen liefern atomgenaue Vorhersagen der Struktur und der Eigenschaften von Graphen-Nanosystemen.
- Aufgrund der vielen mikroskopischen Freiheitsgrade und des Einflusses unterschiedlichster Energieskalen sind derartige Rechnungen sehr aufwendig und erfordern den gleichzeitigen Einsatz vieler hundert CPUs.

Die derzeitige Halbleitertechnologie basiert auf dreidimensionalen Materialien wie Silizium und gerät an die Grenzen ihrer Miniaturisierbarkeit: Ungesättigte chemische Bindungen an Oberflächen oder Fremdatome führen zu starker Elektronenstreuung und limitieren so die Leistungsfähigkeit heutiger Halbleiter. Die Suche eines Post-Silizium-Materials als Basis der Halbleitertechnologie ist somit ein wichtiges Gebiet der Festkörperforschung. Hierbei ist Graphen, d.h. eine Kohlenstoffmonolage, ein sehr aussichtsreicher Kandidat. Obwohl es nur ein Atom dick ist, zeigt sich Graphen chemisch sehr widerstandsfähig und Elektronen in diesem Material können eine extrem hohe Beweglichkeit aufweisen. Potentielle Anwendungen etwa in der Weiterentwicklung klassischer Halbleiterbauelemente, im Spintronikbereich, in Hochfrequenztransistoren oder in der Displaytechnologie versuchen, diese Eigenschaften auszunutzen.

Insbesondere graphenbasierte Nanotechnologie und Transistoren erfordern es, genau zu verstehen, wie Fremdatome oder Rückstände aus dem Produktionsprozess die elektronischen Eigenschaften des Graphens beeinflussen. Störstellen sind die Bausteine nanotechnologischer Anwendungen und begrenzen jedoch gleichzeitig die Leistungsfähigkeit dieser Anwendungen, da sie

Elektronen streuen und so zum elektrischen Widerstand beitragen. Elektronen verhalten sich in Graphen wie masselose Teilchen. Daher sind Störstelleneffekte in Graphen fundamental verschieden von bereits gut verstandenen analogen Effekten in konventionellen Halbleitern.

Herstellungsbedingt sind Graphenproben oft mit Wasser oder Rückständen organischer Verbindungen „verschmutzt“. In einem Kooperationsprojekt mit den Universitäten Manchester und Nijmegen haben wir daher die Auswirkungen und die Stabilität solcher Adsorbate untersucht. Mittels atomgenauer Simulationen am HLRN konnten wir so herausfinden, dass Störstellen, wie sie in der Abbildung gezeigt sind, die Leitfähigkeit von Graphen entscheidend begrenzen [1],[3],[4]. Ein Weg zur Optimierung von Graphen für elektronische Anwendungen liegt somit in der gezielten Entfernung dieser Störstellen.

Magnetische Fremdatome können in der Nähe von Kontakten auftreten oder kontrolliert auf Graphen aufgebracht werden. Dieses eröffnet die Möglichkeit, fundamentale Quanteneffekte, wie die Wechselwirkung eines magnetischen Moments mit quasi masselosen Teilchen, zu untersuchen [2]. Derartige Effekte sind sonst oft nur mittels großer Teilchenbeschleuniger beobachtbar. Weiterhin könnte sich Graphen wegen seiner besonderen Eigenschaften als Trägermaterial magnetischer Nanostrukturen eignen. Das Verständnis der Physik magnetischer Adatome auf Graphen erfordert atomistische Simulationen, die vorhersagen, welche chemischen Bindungen die Adatome eingehen und wie sie mit den Graphen-Elektronen wechselwirken.

Derartige Simulationen führen wir am HLRN durch Kombination von Dichtefunktionaltheorie (DFT) mit Vielteilchenmethoden durch. DFT stellt eine große Vereinfachung des ursprünglichen Vielelektronenproblems dar, da sie es ermöglicht, mit der Ladungsdichte statt der extrem viel komplizierteren elektronischen Vielteilchenwellenfunktion zu arbeiten. Um realistische Systeme beschreiben zu können, müssen aber auch im Rahmen der DFT verschiedenste Energie- und Längenskalen gleichzeitig berücksichtigt werden. Zur Simulation von Nanostrukturen etwa müssen die Eigenschaften der Elektronen in der Nähe der Atomkerne sowie die Wechselwirkung zwischen entfernten Atomen genau berücksichtigt werden. Dies erfordert den Einsatz vieler hundert CPU-Kerne gleichzeitig. Abbildung 1 zeigt, wie die Elektro-

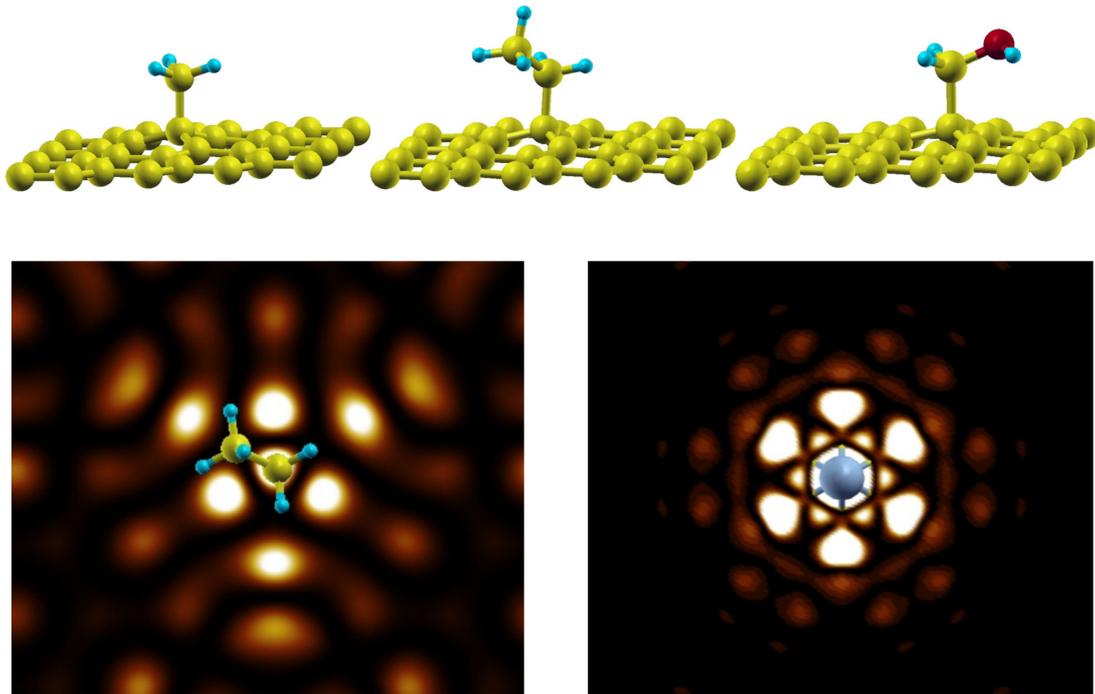


Abbildung 1: Oben: Berechnete Bindungsgeometrien von CH₃-, C₂H₅- und CH₂OH-Gruppen auf Graphen. Derartige organische Rückstände ergeben sich im Herstellungsprozess von Graphen und begrenzen die elektrische Leitfähigkeit. Unten: Elektronenstreuung an einer C₂H₅-Gruppe und einem Co-Adatom auf Graphen. Die Bilder zeigen Gebiete hoher (hell) und niedriger (dunkel) Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Elektronen, die sich aus der quantenmechanischen Interferenz der Elektronenwellen ergibt. Co-Adatome auf Graphen können exotische Quanteneffekte hervorrufen. Dabei werden die Bahnbewegung der Elektronen des Adatoms, ihr Spinmoment und die Leitungselektronen im Graphen miteinander verschränkt [2].

nen über viele Gitterplätze hinweg von Störstellen (C₂H₅-Gruppen und Co-Adatomen) beeinflusst werden, und die Komplexität der Streumuster. Der näherungsweise dreifach symmetrische Streuzustand, der die C₂H₅-Gruppen umgibt, ist für den elektrischen Widerstand vieler Graphenproben verantwortlich.

Die Simulation solcher Nanosysteme und die genaue Beschreibung von Wechselwirkungseffekten zwischen den Elektronen stellt eine große Herausforderung dar und ist derzeit meistens noch Grundlagenforschung. Die Weiterentwicklung von Simulationsmethoden und Computertechnologie ist hier Wegbereiter für einen immer breiteren Einsatz solcher Simulationen auch in der Industrie.

Mehr zum Thema

1. T. O. Wehling, S. Yuan, A. I. Lichtenstein, A. K. Geim, and M. I. Katsnelson, Resonant Scattering by Realistic Impurities in Graphene, *Phys. Rev. Lett.* 105, 056802 (2010).

2. T. O. Wehling, A. V. Balatsky, M. I. Katsnelson, A. I. Lichtenstein, and A. Rosch, Orbitaly controlled Kondo effect of Co adatoms on graphene, *Phys. Rev. B* 81, 115427 (2010).
3. T. O. Wehling, M. I. Katsnelson, and A. I. Lichtenstein, Impurities on graphene: Midgap states and migration barriers, *Phys. Rev. B* 80, 085428 (2009).
4. T. O. Wehling, A. I. Lichtenstein, and M. I. Katsnelson, First-principles studies of water adsorption on graphene: The role of the substrate, *Appl. Phys. Lett.* 93, 202110 (2008).

Förderung

DFG-Sonderforschungsbereich 668 „Magnetismus vom Einzelatom zur Nanostruktur“; DFG-Schwerpunktprogramm 1459 „Graphene“; Am HLRN wird das Projekt durch die gleichzeitige Nutzung von bis zu 1024 CPU-Kernen unterstützt.

Ab Initio Solution of QCD, the Fundamental Theory of Matter Lattice QCD at Physical Quark Masses

G. Schierholz, Deutsches Elektronen-Synchrotron DESY and University of Hamburg

Abstract

- The only existing possibility to solve QCD at all scales is by numerical simulation on a space-time lattice.
- The calculations are now reaching a level, where they are able to not only complement, but provide guidance to current and forthcoming experimental programs at the leading research facilities.
- *Ab initio* calculations of a wealth of hadronic observables may be expected in the years to come.

Quantum chromodynamics (QCD) is the fundamental theory of the strong interactions. It binds quarks and gluons, the fundamental building blocks of matter, to nucleons and mesons, and these to nuclei. The forces between quarks and gluons are so strong – equivalent to a weight force of more than 10 tons – that quarks do not appear as free particles in Nature. This phenomenon is called quark confinement. The equations of this theory are so complicated that they cannot be solved by traditional techniques.

Lattice QCD provides the only *ab initio* method for solving QCD. This is achieved by numerical simulations. For the computer to solve the theory one approximates space and time by a finite box divided into a discrete set of points, the lattice. This reduces the problem to a finite system of coupled equations, which can be solved by standard Monte Carlo techniques. Later on one removes this approximation by letting the lattice spacing go to zero and the box size to infinity.

Since the cost of Lattice QCD computations grows with a large inverse power of the quark mass, initial calculations were restricted to relatively heavy quarks. However, in order to capture the physics of quarks and gluons in captivity, and reach the needed accuracy requested by the experiments, simulations at physical quark masses, on large volumes and at small lattice spacings are required. Due to continuous improvements of the algorithm, and the advent of Petaflop/s-scale computing facilities, we are now able to perform simulations at the physical quark masses.

From the numerical point of view, the task is to solve a system of linear equations, $b = Q^\dagger Qx$, iteratively, where Q is a sparse, more than 300 million \times 300 million complex matrix on current lattices.

In a typical run more than 80% of the total time is spent in multiplication of vectors with the matrix Q . The calculation requires the exchange of ghost cells of the input vector. In order to scale QCD programs to high numbers of processors, a communication network with high bandwidth and low latency is needed. Although the Altix has an excellent network, the loss due to communication is typically of the order of 50%.

The primary goal of this project is to achieve a truly quantitative understanding of the spectrum, the structure and the interaction of hadrons in terms of their quark and gluon constituents. This involves the calculation of hadron form factors, distribution amplitudes, moments of structure functions, as well as transversity and generalized parton distributions (GPDs). These observables are directly relevant to experiments at CERN/LHC, GSI/FAIR, JLab, MAMI and RHIC-spin. A recent result [1] on the quark distribution of the proton is shown in Fig. 1. A further goal is to find out whether the Standard Model is able to describe the flavor and CP violation observed in nature. To shed light on this question, a selection of CKM matrix elements will be determined with high accuracy and well understood errors from meson and hyperon decays. Arguably, the most compelling indicator of new physics beyond the Standard Model is the anomalous magnetic moment of the muon, $a_\mu = (g - 2)_\mu/2$. At the very least, it represents a major constraint for speculative new theories such as supersymmetry or extra dimensions. The current experimental value of a_μ shows one of the largest deviations of any observable from the corresponding Standard Model prediction. For a quantitative test a calculation of the QCD corrections is needed that meets at least the experimental precision. That is currently not the case.

It turns out [2], not unexpectedly, that the structure of hadrons changes dramatically with decreasing quark masses. In Fig. 2 I show very recent results on the magnetic moment of the nucleon as a function of the pion mass. (It is customary to express the mass of the quarks by the corresponding pion mass through the relation $m_q \propto m_\pi^2$.) Only at the physical pion mass (*) does the nucleon develop its given structure. This is due to the pion cloud, which extends to distances $\propto 1/m_\pi$ from the center of the nucleon, and will only unfold at light enough masses. The magnetic radius of the nucleon even appears to diverge like $1/m_\pi$ at vanishing quark masses, in agreement with effective models. This raises the question if a world of mass-

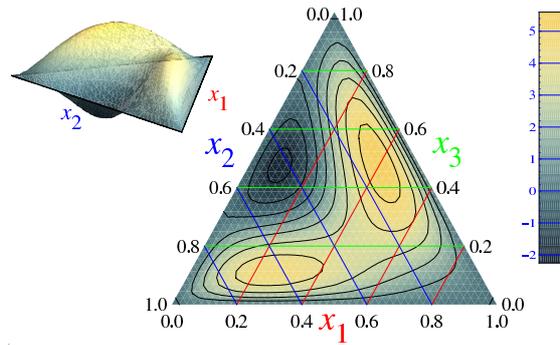


Figure 1: Barycentric 'density plot' of the distribution (probability) amplitude of a spin-up proton as a function of the momentum fractions of the valence spin up quark (x_1), and the up (x_2) and down (x_3) di-quarks (with $x_1 + x_2 + x_3 = 1$). The lines of constant x_1 , x_2 and x_3 are parallel to the sides of the triangle labelled by x_2 , x_3 and x_1 .

less quarks and pions may exist at all. Perhaps it shows that the physical constants are constituted in a way that allows the conditions necessary for life, the anthropic principle.

Calculations of a wide class of observables are now becoming available at physical pion masses, so direct comparison with experiment, *i.e.* without extrapolation to the physical point, will soon be possible. However, finite size effects are starting to become a serious issue. This is not surprising, given the fact that the nucleon barely fits into the volumes simulated so far. As a result, we are now planning new simulations on volumes of $(5 \text{ fm})^3$, in order to minimize finite volume corrections. The long-term goal is to extend the calculations to lattice spacings $a \leq 0.05 \text{ fm}$, which correspond to momentum cut-offs $\geq 4 \text{ GeV}$, so as to accommodate charmed quarks on the lattice. Charm physics is

one of the main research topics at GSI/FAIR. To reach this goal, $O(100)$ Petaflop/s-scale computing facilities are required.

More Information

1. V.M. Braun *et al.*: Nucleon distribution amplitudes and proton decay matrix elements on the lattice, Phys. Rev. D **79** (2009) 034504.
2. M. Göckeler *et al.*: Lattice Investigations of Nucleon Structure at Light Quark Masses, PoS **LAT2009** (2009) 125 [arXiv:0912.0167 [hep-lat]].

Funding

European Union (HadronPhysics2); DFG Collaborative Research Centre Transregio 55

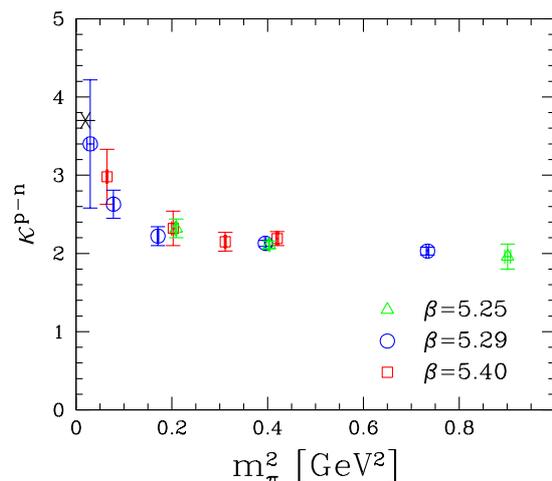


Figure 2: The anomalous magnetic moment of proton minus neutron as a function of the pion mass for three different couplings, corresponding to lattice spacings ranging from $a = 0.080 \text{ fm}$ ($\beta = 5.25$) to $a = 0.069 \text{ fm}$ ($\beta = 5.40$), compared to the experimental value (*) at the physical pion mass.

Wie die Abstoßung zwischen Elektronen deren Geselligkeit fördert Komplexer metallischer Magnetismus stark korrelierter Übergangsmetalloxide

F. Lechermann, I. Institut für Theoretische Physik,
Universität Hamburg

Kurzgefasst

- Korrelierte realistische Festkörper bedingen faszinierende Materialeigenschaften aufgrund der subtilen Balance zwischen Elektronenbewegung und -lokalisation.
- Das magnetische Antwortverhalten in solchen Systemen kann daher in besonderem Maße ausgeprägt sein.
- Die theoretische Beschreibung dieser Vielteilchenphänomenologie erfordert das Studium komplizierter Hamiltonoperatoren zusammen mit realistischen Bandstrukturen.
- Anspruchsvolle Dichtefunktionalmethoden sind mit numerisch sehr aufwendigen Quanten-Monte-Carlo-Techniken zu kombinieren.
- Mehrere hundert CPU-Kerne sind erforderlich, um bei ausreichend tiefen Temperaturen die Physik des korrelierten Magnetismus in Oxidsystemen auflösen zu können.

Jede Art von fester Materie in der Natur stellt physikalisch auf mikroskopischer Ebene ein Vielteilchenproblem dar. Das bedeutet, dass die Eigenschaften eines Festkörpers (z.B. eines Aluminiumstabs oder auch eines Holztisches), wie beispielsweise dessen Farbe, dessen elektrische Leitfähigkeit oder auch seine Festigkeit letztendlich von den unzähligen Elektronen und Kernbausteinen auf atomarer Ebene abhängen. Je nach Chemie und Zusammensetzung eines bestimmten Materials bilden sich aufgrund dieser Wechselwirkungen bei gegebener Temperatur T gewisse Gleichgewichtszustände aus, etwa der metallische Charakter des Aluminiumstabs oder der elektrisch isolierende Zustand des Holztisches.

Die magnetischen Eigenschaften eines Systems sind durch das korrelierte Verhalten der vielen Elektronen festgelegt. Der Begriff „Korrelation“ bedeutet in diesem Zusammenhang, dass aufgrund der Coulomb-Abstoßung zwischen diesen negativ geladenen Teilchen und aufgrund des Pauliverbots für Fermionen die einzelne Elektronenbewegung mit der der anderen Elektronen „abgestimmt“ ist. Diese „Abstimmung“ oder eben Korrelation theoretisch korrekt zu erfassen ist sehr schwierig und erfordert die simultane Betrachtung sehr vieler Teilchen. In manchen Fällen ist es in

der theoretischen Modellierung durchaus möglich, in einer guten Näherung die Bewegung einzelner Elektronen im effektiven Feld der verbleibenden Elektronen zu beschreiben. Dieser Ansatz bildet die Grundlage für die erfolgreiche lokale Dichtenäherung (LDA) der Dichtefunktionaltheorie (DFT) vermöge Bandstrukturrechnungen. Diese erlauben es, viele wichtige Materialien sehr genau von einem atomistischen Standpunkt aus ohne experimentelle Parameter zu beschreiben. Mit DFT-Rechnungen zu einzelnen Fe-Atomen auf einer InSb-Halbleiteroberfläche konnten wir dies in Zusammenarbeit mit Experimentatoren erneut eindrucksvoll mit Unterstützung des HLRN belegen [1]. Allerdings versagt diese Näherung für sogenannte stark korrelierte Systeme, wie etwa viele Übergangsmetalloxide. Dort ist diese Entkopplung in einzelnes Elektron und effektives Feld nicht adäquat, da die Wechselwirkungen im Elektronensystem zu stark sind.

In diesem Projekt widmen wir uns der theoretischen Untersuchung des magnetischen Verhaltens von solchen stark korrelierten Systemen durch eine Kombination der LDA mit Vielteilchen-Hamiltonoperatoren, welche die Wechselwirkung der Elektronen untereinander sinnvoll beschreiben. Neben komplizierten magnetischen Ordnungen zeigen die studierten Systeme subtiles kollektives Verhalten auch in magnetisch ungeordneten Bereichen. Die Elektronenspins als Grundlage für die magnetische Aktivität sind also auf komplizierte Art und Weise gekoppelt. Je nach Art der chemischen Bindung und Charakter der Elektron-Elektron-Wechselwirkung ist ein systemspezifischer Magnetismus zu erwarten. Darüber hinaus ist der metallische Magnetismus von besonderer theoretischer Komplexität, da die Elektronen nicht wie im magnetischen Isolator auf festen Gitterplätzen lokalisiert sind. Der weitere Freiheitsgrad des Hüpfens der Elektronen auf dem Gitter macht das tiefgreifende Verständnis der wechselwirkenden Spins ungleich schwieriger. In diesem Zusammenhang geben jedoch Suszeptibilitäten $\chi(\mathbf{q}, T)$ wichtige Auskunft über die Korrelationen und Ordnungstendenzen im Material. So machen diese Antwortfunktionen für jeden \mathbf{q} -Vektor im reziproken Raum eine Aussage bezüglich der damit jeweils einhergehenden Korrelationsart. Jeder Punkt im reziproken Raum ist dabei mit einem speziellen Korrelationsmuster auf dem direkten Kristallgitter im realen Raum zu assoziieren. So weist eine starke Spinsuszeptibilität am Γ -Punkt der 1. Brillouin-Zone etwa auf ferroma-

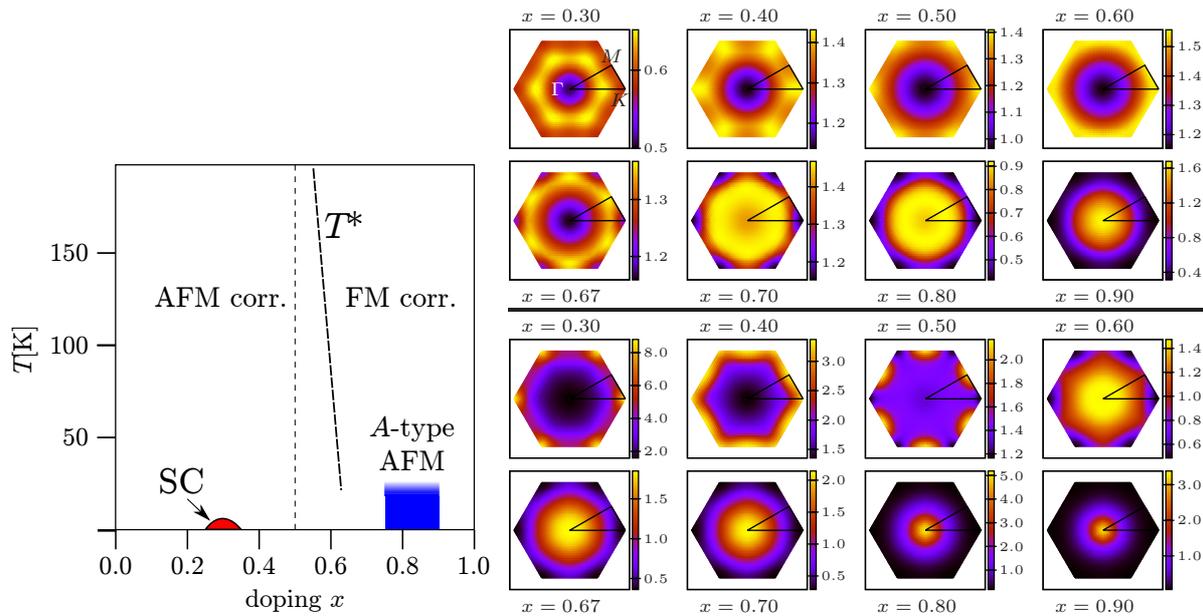


Abbildung 1: Links: Skizziertes experimentelles Phasendiagramm des Natriumkobaltat-Systems (SC markiert eine supraleitende Phase). Rechts: \mathbf{q} -abhängige Gittersuszeptibilitäten für verschiedene Dotierungen, dargestellt in der 1. Brillouin-Zone des unterliegenden Dreieckgitters. Rechts oben ist die Ladungssuszeptibilität $\chi_c(\mathbf{q}, T)$ und rechts unten die Spinsuszeptibilität $\chi_s(\mathbf{q}, T)$, jeweils bei $T=386$ K, dargestellt.

gnetische Tendenzen, also gleichgerichtete Spins, im Festkörper hin.

Für das Na_xCoO_2 -System mit großem technologischen Potential haben wir mit numerisch sehr aufwendigen Rechnungen, basierend auf Slave-Boson-Techniken und Quanten-Monte-Carlo-Verfahren, den Magnetismus untersucht [2][3]. Wie die Abbildung zeigt, weist dieses System in seinem Phasendiagramm Bereiche mit unterschiedlichem magnetischen Verhalten auf. Die Berechnung der dotierungsabhängigen Spin- und Ladungssuszeptibilitäten erforderte den Einsatz von bis zu 1024 Prozessorkernen. Temperaturscans für festes x dauerten auf 512 Kernen knapp zwei Wochen. Damit konnte der Umschlag von antiferromagnetischen (AFM) zu ferromagnetischen (FM) Spinkorrelationen auf dem CoO_2 -Dreiecksgitter im Einklang mit dem Experiment nachgewiesen werden. In der gezeigten Abbildung ist dies an der Wanderung des Intensitätsmaximums der Spinsuszeptibilität vom K -Punkt zum Γ -Punkt nachzuvollziehen. Desweiteren konnten wir auch die Tendenz zu einer kagoméartigen Ladungsordnung anhand der M -Punkt-Intensität der Ladungssuszeptibilität bei $x \sim 0.67$ auf die Vielteilchenkorrelationen in einem effektiven Einband-Hubbard-Modell zurückführen. In diese Rechnungen gingen sogenannte Vertex-Beiträge ein, die bisher in fast allen Studien zu solchen Fragestellungen vernachlässigt wurden. Wir

konnten die Wichtigkeit dieser Terme für das konkrete korrelierte Natriumkobaltat-System nachweisen und damit einen essentiellen Schritt in der allgemeinen Modellierung von solchen komplexen Systemen tätigen.

Mehr zum Thema

1. A. K. Khajetoorians, B. Chilian, J. Wiebe, S. Schuwalow, F. Lechermann and R. Wiesendanger: Detecting excitation and magnetization of individual dopants in a semiconductor, *Nature* **467**, 1084 (2010).
2. C. Piefke, L. Boehnke, A. Georges and F. Lechermann: Considerable nonlocal electronic correlations in strongly doped Na_xCoO_2 , *Phys. Rev. B* **82**, 165118 (2010).
3. L. Boehnke and F. Lechermann: Lattice Spin and Charge Susceptibilities for Na_xCoO_2 including Vertex Contributions, arXiv:1012.5943.

Förderung

DFG-Forschergruppe FOR 1346 „Dynamical Mean-Field Approach with Predictive Power for Strongly Correlated Materials“; Projektförderung am HLRN mit bis zu 1024 parallel genutzten CPU-Kernen

Wasser unter hohem Druck - einfach superionisch!

Ab-initio-Berechnung der thermophysikalischen Eigenschaften von Materie unter extremen Bedingungen

R. Redmer, M. French, B. Holst, W. Lorenzen, A. Becker, K.-U. Plagemann, C. Trötschler, Institut für Physik, Universität Rostock

Kurzgefasst

- Die physikalischen Eigenschaften von Materie sind stark druck- und temperaturabhängig.
- Das Phasendiagramm von Materialien bei hohen Drücken von einigen Megabar und Temperaturen von mehreren 1000 K ist kaum bekannt.
- Solche Zustände sind aber für das Innere von Großen Planeten relevant.
- Mit der Kenntnis des Verhaltens der häufigsten Materialien (H, He, C, N, O) unter hohem Druck lässt sich die innere Struktur und Evolution Großer Planeten berechnen.

Viele wichtige Materialeigenschaften zeigen eine starke Abhängigkeit von Druck und Temperatur. Das Verhalten von Materie unter extremen Bedingungen (Temperaturen von mehreren 1000 bis 100 000 K und Drücke im Megabarbereich) ist zur Zeit ein hochaktuelles Forschungsgebiet. In der Natur kommen solche Materiezustände im Inneren der Planeten unseres Sonnensystems sowie in extrasolaren Planeten vor. Mit großem experimentellen Aufwand lassen sie sich auch im Labor erzeugen, wie z.B. in Diamantstempelzellen oder in Stoßwellenexperimenten. In unserem Projekt am HLRN verwenden wir hochmoderne Methoden der theoretischen Vielteilchenphysik, um grundlegende physikalische Größen für wichtige Materialien unter extremen Bedingungen zu berechnen. Damit sind wir in der Lage, experimentelle Daten zu überprüfen, aber auch zuverlässige Vorhersagen für bis jetzt nicht experimentell zugängliche Bereiche zu treffen.

Ausgehend von einer quantenstatistischen Beschreibung der Wechselwirkungen zwischen Elektronen und Kernen und der Lösung ihrer physikalischen Bewegungsgleichungen geben unsere theoretischen Berechnungen Aufschluss über die Strukturen, die die Materie unter extremen Bedingungen annehmen kann. Daraus leiten wir makroskopische Eigenschaften wie z.B. die thermodynamischen Zustandsgleichungen, die elektrische und Wärmeleitfähigkeit sowie das optische Verhalten ab. Konkret beschäftigen wir uns vor allem (aber nicht ausschließlich) mit den relativ leichten Elementen Wasserstoff, Helium, Stickstoff, Sauerstoff,

ihren Gemischen und einfachen Verbindungen wie z.B. Wasser. Die Durchführung von solchen Rechnungen ist nur auf massiv-parallelen Rechnern wie dem HLRN-System effizient möglich.

Die hauptsächliche Motivation unserer Rechnungen besteht darin, die innere Struktur und Evolution von Planeten zu modellieren. Weder mit erdgebundenen Beobachtungen noch mit Raumsonden kann man in die Tiefen dieser Himmelskörper hinein blicken. Daher wurden und werden Planetenmodelle entwickelt, die jedoch eine genaue Kenntnis des Verhaltens der in den Planeten vorkommenden Materie erfordern. Unsere auf dem HLRN berechneten Materialdaten werden daher zur Modellierung des inneren Aufbaus der Großen Planeten Jupiter, Saturn, Uranus und Neptun genutzt. Das geschieht sowohl direkt in unserer Arbeitsgruppe in Rostock als auch weltweit in anderen Gruppen basierend auf diesen Daten.

In Abbildung 1 ist ein Ausschnitt aus dem Phasendiagramm von Wasser gezeigt, das in einer aktuellen Arbeit berechnet wurde [1]. Die Dissoziation von Molekülen, Ionisation und die Bildung von komplexen Festkörperstrukturen sind typische Phänomene, die unter extremen Bedingungen in vielen Materialien auftreten. Eine große Besonderheit im Phasendiagramm von Wasser stellt die superionische Phase dar. In ihr sind die Protonen beweglich, jedoch bildet der Sauerstoff ein festes Kristallgitter. Die superionische Phase hat daher Eigenschaften einer Flüssigkeit und eines Festkörpers zugleich. In den Planeten Uranus und Neptun herrschen Bedingungen, unter denen superionisches Wasser gebildet werden könnte, wie neue Rechnungen ergeben haben [2]. Die Existenz einer superionischen Phase würde die Dynamoregion tief im Innern prägen und eine mögliche Erklärung für die nicht-dipolaren Magnetfelder dieser Planeten geben.

Ein weiteres zentrales Forschungsthema ist die Berechnung von Gemischen aus Wasserstoff und Helium. Diese beiden Elemente sind der Hauptbestandteil von Jupiter und Saturn. In einer aktuellen Arbeit [3] konnte gezeigt werden, dass Wasserstoff und Helium in Saturn größtenteils nicht mischbar sind, was zu einer Anreicherung von Helium in großen Tiefen führt. Dieser Prozess würde auch die beobachtete verlangsamte Abkühlung des Planeten Saturn erklären. In Jupiter hingegen kommen beide Stoffe als Gemisch vor.

Für reinen Wasserstoff konnte eine viel genauere Vorhersage für ein interessantes thermodynamisch-

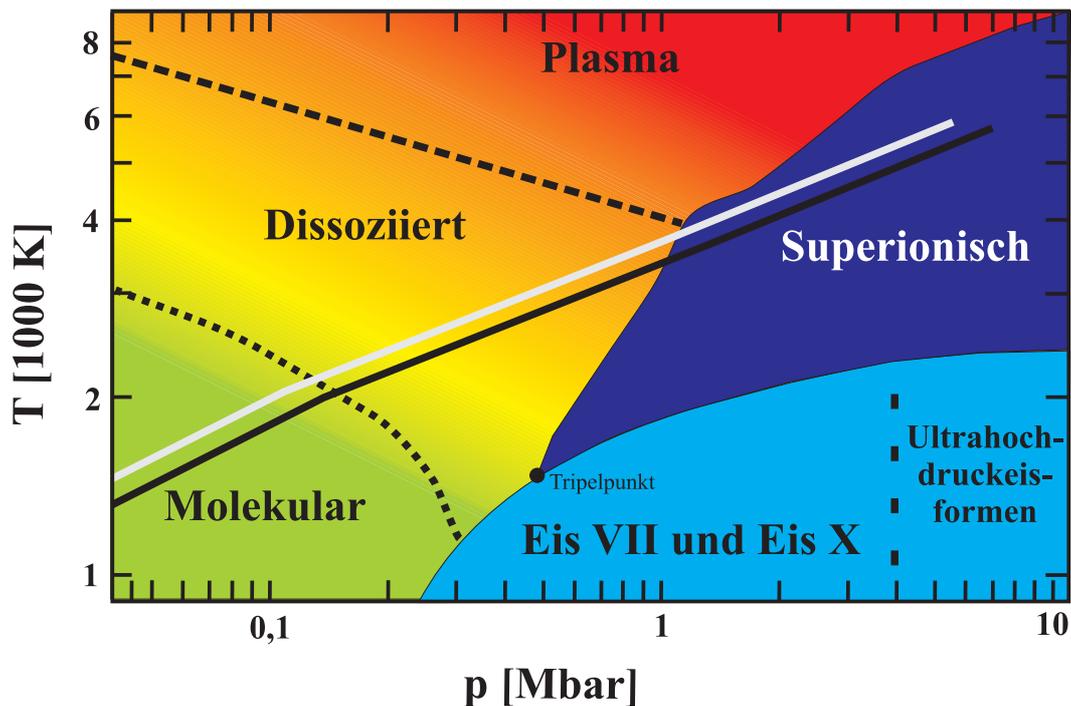


Abbildung 1: Phasendiagramm von Wasser (H_2O). In der fluiden Phase (Farbverlauf von grün über gelb nach rot) sind sowohl Wasserstoff- als auch Sauerstoffkerne beweglich. Die bei kleinen Temperaturen vorhandenen Wassermoleküle dissoziieren mit steigendem Druck und steigender Temperatur. Bei weiterer Temperaturerhöhung werden auch die Elektronen beweglich und es entsteht ein sehr gut leitendes Plasma. Verschiedene Modifikationen von Wassereis (hellblau) treten bei kleinen Temperaturen aber hohen Drücken auf. Die superionische Phase (dunkelblau) ist zwischen dem Plasma und den Eisphasen eingebettet. Die durchgezogenen Linien kennzeichnen die Materiezustände in Uranus (grau) und Neptun (schwarz), die beide wahrscheinlich große Mengen an Wasser enthalten.

schies Phänomen gemacht werden, den bisher hypothetischen Plasmaphasenübergang. Unter hohem Druck erfolgt der Übergang zur vollständig ionisierten Phase so abrupt, dass sich eine scharfe Phasengrenze innerhalb der Flüssigkeit herausbildet [4]. Dieser Flüssig-Flüssig-Phasenübergang hat einen kritischen Punkt bei etwa 1500 K und 1,4 Mbar.

In Zukunft werden wir unsere Berechnungen auch für komplexere Gemische durchführen, die den realen Elementkonzentrationen in den großen Planeten noch genauer entsprechen.

Mehr zum Thema

1. M. French, T. R. Mattsson, N. Nettelmann, R. Redmer: Equation of state and phase diagram of water at ultrahigh pressures as in planetary interiors, *Phys. Rev. B* **79**, 054107 (2009)
2. R. Redmer, T. R. Mattsson, N. Nettelmann, M. French: The phase diagram of water and the magnetic fields of Uranus and Neptune, *Icarus*, im Druck (2010)
3. W. Lorenzen, B. Holst, R. Redmer: Demixing of Hydrogen and Helium at Megabar Pressures, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 115701 (2009)
4. W. Lorenzen, B. Holst, R. Redmer: First-order liquid-liquid phase transition in dense hydrogen, *Phys. Rev. B* **82**, 195107 (2010)

Förderung

DFG-Schwerpunktprogramm 1488 PlanetMag, DFG-Sonderforschungsbereich 652 Starke Korrelationen im Strahlungsfeld

Kleine Teilchen in großer Aufregung Nichtlineare Licht-Materie-Dynamik in finiten Vielteilchensystemen: Cluster in intensiven IR-, VUV-, und XUV-Laserfeldern

Th. Fennel, J. Köhn, M. Arbeiter, Ch. Peltz,
Institut für Physik, Universität Rostock

Kurzgefasst

- Nanopartikel und Cluster - winzige Aggregate bestehend aus einigen zehn bis zehntausend Atomen - sind ideale Modellsysteme für die Untersuchung der nichtlinearen Wechselwirkung von intensiven Laserfeldern mit Vielteilchensystemen. Infolge der Anregung entsteht lokal ein heißes Gemisch aus Elektronen und Ionen (Nanoplasma), dessen Entwicklung durch die Variation von Form und Farbe der Laserpulse abgefragt oder sogar gezielt gesteuert werden kann.
- Die Reaktion von Nanopartikeln auf intensive Laserfelder ist stark materialabhängig. So müssen Nanoplasmen in Clustern aus Isolatormaterialien erst durch laserinduzierte Ionisationsprozesse erzeugt werden, während sie in Metallclustern bereits vor der Anregung als kalte Fermigase vorliegen. Dadurch lassen sich beispielsweise Ionisationsmechanismen grundverschiedener physikalischer Systeme analysieren.
- Zusätzlich ändert sich die Systemantwort fundamental, wenn die Größenordnung der Laserwellenlänge variiert wird. Während im sichtbaren und infraroten Wellenlängenbereich kollektive Elektronenanregungen eine maßgebliche Rolle spielen, dominieren bei sehr kurzen Wellenlängen im extrem ultravioletten bis weichen Röntgenbereich vor allem atomare Ionisationsprozesse die Licht-Materie-Wechselwirkung.

Intensive Laseranregung von atomaren Clustern und Nanopartikeln bietet vielfältige Möglichkeiten zur Erforschung ultraschneller Vielteilchendynamik. So liefert die Analyse des zeitlichen Zusammenspiels von Ionisation, Laserheizung und Zerfall der Nanoteilchen als Funktion der Laserintensität wichtige Hinweise auf limitierende Startprozesse für die Plasmabildung und resonante Verstärkungseffekte [1]. Einblicke in die zu Grunde liegende Dynamik sind sowohl für das fundamentale Verständnis der nichtlinearen Licht-Materie-Wechselwirkung als auch für technische Anwendungen (z.B. Teilchen- und Strahlungsquellen, Lasermaterialbearbeitung) wichtig.

Gegenstand unseres Projektes sind die mikroskopische Analyse der durch Laseranregung getriebenen Elektronen- und Ionendynamik in

Metall- und Edelgasclustern und die Untersuchung der Entwicklung von Kopplungsmechanismen als Funktion der Photonenenergie vom nah-infraroten (NIR) bis hin zum vakuum-ultravioletten Spektralbereich (VUV bis XUV). Insbesondere steht hierbei das Regime stark nichtlinearer Anregung im Mittelpunkt, für das eine störungstheoretische Behandlung der Licht-Materie-Wechselwirkung nicht mehr zulässig ist. Hier können die Simulationsrechnungen ihre Stärke ausspielen, im Rahmen geeigneter Näherungen eine explizite, nichtperturbative Beschreibung der mikroskopischen Dynamik zu liefern. In unserem Projekt werden Methoden der zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie sowie semiklassische Molekulardynamik (Vlasov-LDA mit Stößen bzw. MD) eingesetzt. Im Fokus der Untersuchungen stehen die aus kollektiven und Mikrofeldeffekten resultierenden Einflüsse auf Ionisations-, Heizungs- und Beschleunigungsprozesse, deren Signaturen in den Fragmentspektren, sowie die gezielte Steuerung dieser Prozesse mit amplituden- und phasengeformten Laserpulsen.

Im Folgenden soll exemplarisch ein Aspekt vorgestellt werden, der insbesondere für neuartige Anwendungen kurzweiliger, intensiver Laserstrahlung von großer Bedeutung ist (z.B. die Einzelschuss-Strukturuntersuchung von Biomolekülen). Dazu wird das Ionisationsverhalten und die Auswirkung von Plasmaeffekten auf die Clusteranregung mit intensiven XUV-Laserpulsen betrachtet, die heutzutage mit Freie-Elektronen-Lasern experimentell realisiert werden können. In den Simulationen wurde die Ionisations- und Heizungsdynamik von Argonclustern in intensiven Femtosekunden-Laserpulsen bei einer Wellenlänge von 32 nm intensitätsabhängig untersucht [2]. Die Analyse der Elektronenemission bestätigt das in Experimenten beobachtete Phänomen der sogenannten „multistep-ionization“, bei der die sequentielle Photoionisation innerhalb des sich aufbauenden Clusterpotentials zu einem plateauartigen Energiespektrum führt. Sobald die zunehmende Tiefe des Coulombpotentials des Clusters die direkte Photoemission unterdrückt, entsteht ein Nanoplasma, das zu einem zusätzlichen thermischen Ionisationsbeitrag führt, siehe Abb. 1. Die auf dem HLRN durchgeführten Rechnungen zeigen, dass dabei ein charakteristischer Heizungsmechanismus wirksam wird, den wir als „ionization heating“ bezeichnen. Hierbei wird die Energieabsorption nicht wie bei Wellenlängen über 100 nm durch lasergetriebene

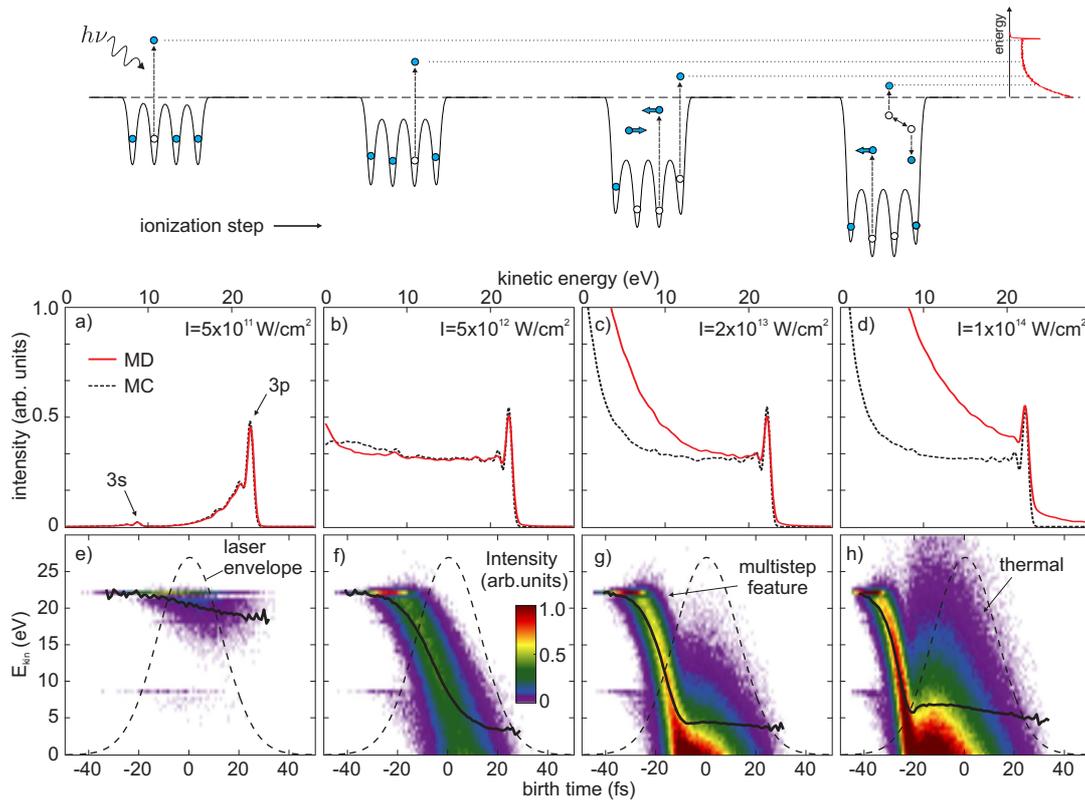


Abbildung 1: Intensitätsabhängige Elektronenemission aus Ar_{147} bei Anregung mit 30fs-Laserpulsen bei $\lambda = 32$ nm. a-d): Die MD-Simulationen (rot) zeigen bei moderaten Intensitäten (hier bis $5 \times 10^{12} \text{ W/cm}^2$) ein Emissionsverhalten, das mit dem Modell der „multistep-ionization“ (Skizze) beschrieben werden kann. Höhere Intensitäten führen zu einem zusätzlichen thermischen Emissionsbeitrag, der in einem vereinfachten Modell (MC, gestrichelt) unberücksichtigt bleibt. e-h): Elektronenenergie als Funktion des Geburtszeitpunktes der Elektronen während des Laserpulses. Der abfallende Verlauf der kinetischen Energie ist charakteristisch für die Multistep-Ionisation, während bei hoher Intensität die zusätzliche breite Energieverteilung thermischer Emission aus dem Nanoplasma entspricht [2].

Plasmaheizung freier Elektronen dominiert, sondern durch die Überschussenergie der aus den Atomen durch Photoionisation freigesetzten Elektronen. Dieser Effekt ermöglicht die Erzeugung eines Nanoplasmas, dessen transiente Dichte und Temperatur gezielt durch die Laserparameter eingestellt werden kann [2].

Weiterhin zeigte sich, dass das von der Laserwellenlänge abhängige Ionisationsregime die wirksamen Expansionsmechanismen der Clusterexplosion bestimmt. In schalen- und ladungsaufgelösten Ionenspektren konnte bei Variation der Photonenenergie ein Übergang von hydrodynamischer Expansion zur Coulombexplosion beobachtet werden. Es wurde gezeigt, dass es durch Analyse charakteristischer Signaturen der Elektronenspektren gelingt, den jeweils dominierenden Expansionsmechanismus (thermischer Druck der heißen Elektronen/Coulombdruck auf Grund der Clusterionisation) der Cluster zu identifizieren [3].

Mehr zum Thema

1. Th. Fennel, K.-H. Meiwes-Broer, J. Tiggesbäumker, P.-G. Reinhard, P. M. Dinh, and E. Suraud, *Laser-driven nonlinear cluster dynamics*, *Rev. Mod. Phys.*, 2010, **82**, 1793.
2. M. Arbeiter and Th. Fennel, *Ionization heating in rare-gas clusters under intense XUV laser pulses*, *Phys. Rev. A*, 2010, **82**, 013201.
3. M. Arbeiter and Th. Fennel, *Rare-gas clusters in intense VUV, XUV and soft x-ray pulses: Signatures of the transition from nanoplasma-driven cluster expansion to Coulomb explosion in ion and electron spectra*, (submitted), <http://arxiv.org/abs/1011.2069>

Förderung

DFG-Sonderforschungsbereich 652

First-Principles Approaches to the Molecule-Insulator Interface Adsorption of Organic Molecules on Wide-Gap Insulators

W. Chen, C. Tegenkamp, H. Pfnür, Institut für Festkörperphysik, Leibniz-Universität Hannover

Abstract

- The understanding of the organic molecule-insulator interaction is central to a wide variety of applications (molecular electronics, catalysis, etc.)
- A microscopic picture of the molecule-insulator interface can be obtained from state-of-the-art first-principles approaches.
- The massively parallel computing systems at HLRN are ideal for first-principles modeling. The computation can be distributed over a large number of nodes.

We are living in a world surrounded by surfaces. There are various surfaces, either metallic or insulating, with which we are constantly interacting in our daily life. Reactions on surfaces are ubiquitous, for example, the rusting and the corrosion of metal surfaces due to oxidation. Over the past few decades, great effort has been dedicated to understanding the physical and chemical phenomena occurring at surfaces and the interfaces of two phases. Heterogeneous catalysis is one of the prime concepts and main applications in the field of surface chemistry which was pioneered by Paul Sabatier and Fritz Haber. Tremendous progress has been achieved since then in the understanding of microscopic characteristics of surfaces and the reactions at surfaces, which is benefited from novel experimental techniques and modern theoretical approaches. The advances in surface science boost the development of semiconductor device fabrication (e.g. epitaxial growth, chemical vapor deposition and atomic layer deposition, self-assembled monolayer based molecular electronics, catalysts, and fuel cells).

One central ingredient in a wide class of applications in surface science (such as heterogeneous catalysts and self-assembled monolayers) is the molecule-surface interaction. Notably, Gerhard Ertl's contribution to the investigation of CO molecules adsorbed at Pt surfaces earned him a Nobel Prize of Chemistry in 2007. Over the last decade, adsorption of molecules at metal surfaces and semiconductors gained broad attention which was stimulated by their relevance in catalysis and molecular electronics. In contrast, there are considerably fewer studies of the molecule-insulator interfaces. Adsorption of organic molecules at wide-

gap insulator surfaces is often unreactive and corresponds mostly to weak physisorption as long as the surface is free of defects. For instance, the features of the frontier molecular orbitals of a pentacene molecule are preserved upon its adsorption at Cu-supported NaCl films as is resolved by scanning tunneling microscopy. Due to the inertness of the wide-gap insulator surfaces, they are excellent candidates for supporting substrates in many chemical and technical applications.

Specifically, revisiting the interface between organic molecules and wide-gap insulators is stimulated by the intriguing features of a separation process in the mining industry. It has been observed that the addition of certain organic molecules can trigger the separation of various minerals such as halite (NaCl), sylvite (KCl) and kieserite ($\text{MgSO}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$) effectively by electrostatic forces in an inhomogeneous electrical field. The electrostatic separation process is plausibly explained by a charge transfer model. Without adsorbates, electronic excitation is practically impossible at room temperature according to the Fermi-Dirac statistics. This situation is modified by the unoccupied states generated by the adsorbate at the insulator surface. The electrons can effectively be excited to these unoccupied molecular states provided that the excitation energy is sufficiently small. When two adsorbate covered surfaces are brought into contact, electrons can hop from one side to the other. A contact voltage drop across the interface results from the net charge transfer, which is supposedly responsible for the electrostatic separation process.

A precise control of the efficiency of the separation process requires not only the accurate knowledge of the organic molecules and the host insulator, but also the microscopic picture of the molecule-insulator interaction. Although the properties of the conditioner molecules (such as *benzoic acid* and its phenolic derivatives) and the rock-salt are well-known, the detailed mechanism of the interaction between the organic molecules and the insulating surface was not yet identified. The surfaces of NaCl or KCl grains are never free of defects. These defects are assumed to have enormous impact on the adsorption configuration and the electronic structure of the adsorbed system.

In this project, we use first-principles calculations to investigate the adsorption of benzoic acid and its various phenolic derivatives at wide-gap insulators (e.g. NaCl and KCl surfaces), in an effort to demystify the contact charging effect between salt

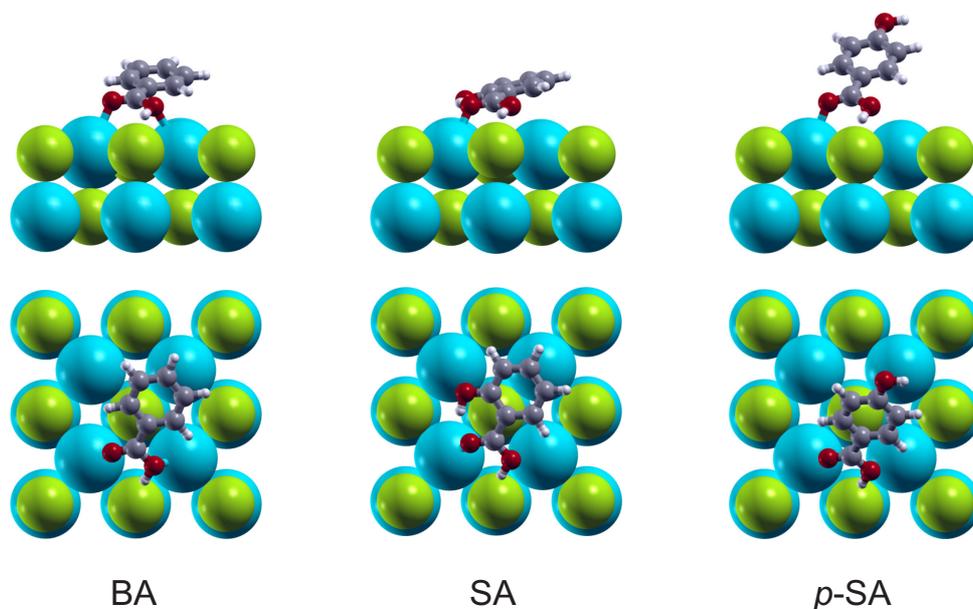


Figure 1: Side view (top panel) and top view (bottom) schematics of the adsorption of benzoic acid (BA), salicylic acid (SA), and *p*-salicylic acid (*p*-SA) at the KCl(100) surface. Density functional theory calculations show that the aromatic carboxylic acids are tilted upon adsorption on the wide-gap insulator surface. The molecule-insulator interaction is governed by a complex interplay between the ionic, covalent and long-range van der Waals interactions (cf. Ref. 1). Potassium: blue, chlorine: green, oxygen: red, carbon: grey, hydrogen: white.

grains mixed with organic molecules. Kohn-Sham density functional theory (KS-DFT) is the standard approach for the prediction of ground-state properties. To describe the weak interaction between surface and adsorbate with high accuracy, we use KS-DFT with hybrid functionals and dispersion force corrections. Green's function based many-body perturbation theory is used for an accurate description of the excitation properties.

This work, particularly the calculations using Green's function perturbation theory, benefits largely from the large main memory available at the ICE2 nodes. These high-level solid-state calculations, involving exceedingly large matrix operations, need up to around 10 GB of memory per process for a realistic modeling of an adsorbate/surface system with around 60 atoms. In this case, we can use up to 1024 CPU cores, *i.e.* 256 nodes with 4 cores each, with a reasonably good scaling. The investigation of the electronic spectra of an extended system, which was once a formidable task, now becomes possible with the new HLRN system.

More Information

1. W. Chen, C. Tegenkamp, H. Pfnür, and T. Bredow: Insight from first-principles calculations into the interaction between hydroxybenzoic acids and alkali chloride surfaces, *J. Phys. Chem. C* 114, 460 (2010)
2. W. Chen, C. Tegenkamp, H. Pfnür, and T. Bredow: Anomalous molecular orbital variation upon adsorption on a wide band gap insulator, *J. Chem. Phys.* 132, 214706 (2010)

Funding

This project is supported by the K+S Group.

Was passiert hinter dem Mond? Numerische Plasmasimulationen von Himmelskörpern

U. Motschmann, H. Kriegel, S. Wiehle, Institut für Theoretische Physik, TU Braunschweig

Kurzgefasst

- Numerische Simulationen der Plasmaumgebung von Himmelskörpern wie Planeten, Monden oder Kometen
- Analyse der auftretenden Strukturen und Effekte
- Vergleich der Simulationsergebnisse mit Messdaten von Raumsonden der ESA und NASA

Die Arbeitsgruppe Numerische Plasmasimulation (NPS) der Technischen Universität Braunschweig simuliert die Umgebung von Himmelskörpern, beispielsweise Mars, Venus, den Mond und den Saturnmond Enceladus. Diese Simulationen sind von besonderer Bedeutung: Raumfahrtorganisationen wie NASA und ESA organisieren etliche Raumfahrtmissionen, um die verbleibenden Geheimnisse dieser Körper zu enthüllen. In den letzten Jahren war dies beispielsweise Venus Express zur Venus, Cassini-Huygens zum Saturn und dessen Monden und erst in diesem Jahr die ARTEMIS-Mission, die den Erdmond gleichzeitig mit zwei Satelliten erforscht. Neben Aufgaben wie der Erkundung der Oberfläche und inneren Struktur dieser Körper befinden sich Magnetometer und Teilchendetektoren an Bord, um die Wechselwirkung des umgebenden Plasmas mit dem jeweiligen Körper zu untersuchen. In den meisten Fällen ist dieses Plasma der Sonnenwind, ein von der Sonne ausgehender Partikelstrom, der hauptsächlich aus Protonen und Elektronen besteht. Bei diesen Messungen sind Raumsonden jedoch einer grundlegenden Einschränkung unterworfen: Sie können nur an ihrer aktuellen Position Messdaten sammeln und nur zu genau dem Zeitpunkt, zu dem sie sich dort aufgehalten haben. Numerische Plasmasimulationen setzen an dieser Stelle an: Häufig basierend auf Original-Messwerten wird nicht nur eine kleine Stelle, sondern die gesamte Umgebung des Objekts simuliert. Dies ermöglicht beispielsweise, den Verlauf von Plasmastrukturen wie Bugstoßwellen aufzuzeigen oder auch, wie im Falle von Enceladus, die Struktur der Ausgasungen des Mondes durch Anpassung des Simulationsmodells an die Daten zu ermitteln.

Der Erdmond ist wegen der Schlichtheit seiner Sonnenwind-Wechselwirkung ein scheinbar einfach zu simulierendes und zu verstehendes Objekt: Im Gegensatz zu anderen Körpern wie unserer Erde verfügt er über kein intrinsisches Ma-

gnetfeld, ebenso fehlt ihm eine dichte Atmosphäre, die Sonnenwindteilchen schlagen daher direkt auf der Mondoberfläche auf und werden absorbiert. Durch diesen Effekt entsteht hinter dem Mond eine Vakuumregion im sonst von Sonnenwind dominierten Weltraum, die eine Ausdehnung vom mehreren Tausend Kilometern hat, bis sie durch den einströmenden Sonnenwind wieder aufgefüllt ist. Wir haben nun den Vorbeiflug eines der ARTEMIS-Satelliten hinter dem Mond simuliert, wofür wir erstmals eine Echtzeitsimulation des gesamten Vorbeifluges durchgeführt haben: Normalerweise wird eine Simulation bis zum Erreichen eines quasistationären Zustands gerechnet, dem Zeitpunkt also, an dem sich die ausgebildeten Plasmastrukturen nicht mehr wesentlich ändern. Das Erreichen dieses Zustands dauert meist nur wenige Echtzeit-Minuten, was nichtsdestotrotz mehreren hundert CPU-Stunden entspricht - je nach Situation auch deutlich mehr. Bei der Simulation des Mondvorbeiflugs trat nun folgendes Problem auf: Das Magnetfeld des Sonnenwindes am Mond durchlief sehr starke Schwankungen, so dass aus der Messung allein nicht geklärt werden konnte, welche Effekte auf den Einfluss des Mondes und welche auf den Sonnenwind zurückzuführen sind. Daher haben wir den Vorbeiflug in seiner gesamten Dauer von zwei Stunden nachsimuliert, was etwa 100x so viel Rechenzeit benötigte wie eine übliche Simulation. Dadurch waren wir in der Lage, sonnenwind- und mondbedingte Einflüsse zu separieren und neue Erkenntnisse über die Struktur dieser Vakuumregion zu gewinnen. Solche Resultate können auch in die weitere Planung der Sondenflugbahnen einbezogen werden, um beispielsweise in der Simulation entdeckte Effekte möglichst gut durch Daten bestätigen zu können[1].

Im Gegensatz zum Erdmond, der sich meist im Sonnenwind befindet, bewegt sich der Saturnmond Enceladus in der Magnetosphäre des Saturns, so dass hier entsprechend das magnetosphärische Plasma betrachtet werden muss. Enceladus zeigt trotz seiner geringen Größe einzigartige kryovulkanische Aktivität: Vermutlich aufgrund eines Ozeans aus flüssigem Wasser unterhalb der Oberfläche gehen von der Südpolarregion geysirartige Jets aus Wasserdampf und Eis aus, die den s.g. Plume bilden. Die Untersuchung dieses Plumes sowie seiner Wechselwirkung mit Saturns Magnetfeld und Plasma ist eins der zentralen Ziele der aktuellen NASA/ESA Mission Cassini: Während bisher 14 naher Vorbeiflüge konnte eine große Menge an Daten gesam-

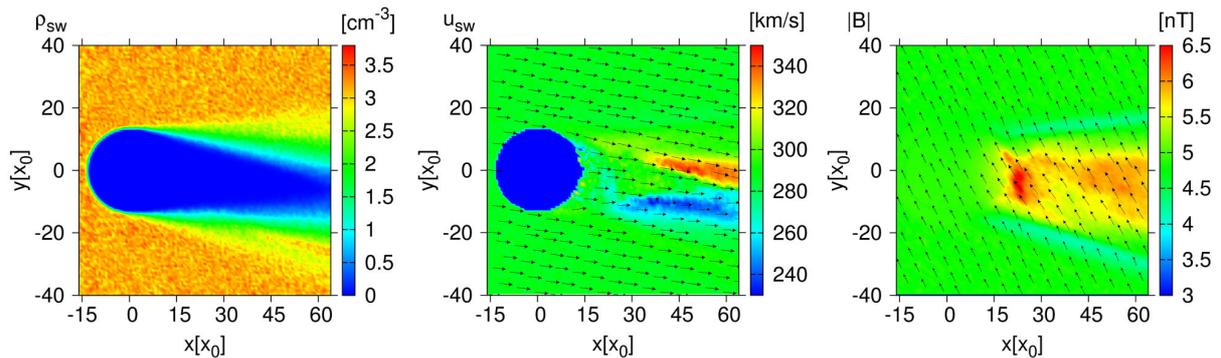


Abbildung 1: 2D-Schnitte durch die Simulationsbox der Mondsimulation: Sonnenwinddichte, -geschwindigkeit und Magnetfeld (v.l.n.r). Der Sonnenwind strömt von links in die Box und wird vom Mond absorbiert, hinter dem Mond entsteht eine Vakuumregion (links). Diese wird von dem umgebenden Plasma wieder aufgefüllt, wobei dieses beschleunigt oder verlangsamt werden kann (mitte). Das Magnetfeld wird vom Mond quasi nicht beeinflusst, jedoch tragen die einströmenden Teilchen hinter dem Mond ebenfalls ein Magnetfeld, so dass es zu einer Erhöhung kommt (rechts).

melt werden. Zur Interpretation dieser Daten sind unter anderem Plasmasimulationen notwendig: Stöße zwischen den Wassermolekülen des Plumes und magnetosphärischen Ionen verursachen eine lokale Störung von Saturns Magnetfeld, die von Cassini gemessen werden kann. Bei einer Übereinstimmung zwischen simulierter und gemessener Magnetfeldstörung lassen sich daher anhand der in der Simulation angenommenen Dichte der Wassermoleküle Rückschlüsse auf die reale Dichte und Produktionsrate des Plumes ziehen[2].

Zur Simulation verwendet die AG NPS dabei den Hybrid-Simulationscode A.I.K.E.F. (Adaptive Ion Kinetic Electron Fluid). "Hybrid" bedeutet hierbei, dass die Protonen und schwerere Ionen des Weltraumplasmas als Makropartikel repräsentiert werden, die sich frei innerhalb der Zellen des Simulationsgitters entsprechend der Lorentzkraft bewegen können. Die leichten Elektronen hingegen werden als masselose, ladungsneutralisierende Flüssigkeit modelliert. Auf den Knoten des Gitters werden aus den Teilchenkoordinaten die elektromagnetischen Felder interpoliert, mit denen dann im nächsten Zeitschritt die Teilchenbeschleunigung bestimmt wird. Der Simulationscode ist dabei in der Lage, adaptiv zu arbeiten. Das bedeutet, die Auflösung des Simulationsgitters kann in Teilen der Simulation erhöht werden, um so relevante Strukturen besser auflösen zu können und gleichzeitig weniger relevante Orte effizient mit geringer Auflösung zu betrachten. Die Hybrid-Beschreibung bietet sich immer dann an, wenn kinetische Effekte der Ionen, wie z. B. die Gyration berücksichtigt werden müssen, d.h. die Gyrationenradien vergleichbar mit der Größe des Hindernisses sind und die

Elektronendynamik wegen der viel kleineren Masse der Elektronen vernachlässigt werden kann. Eine übliche Simulation besteht in der größten Ebene aus etwa 100 Zellen pro Raumrichtung, die Auflösung wird jedoch in Teilen des Simulationsgebietes oft um 2^3 oder 2^4 erhöht. In jeder Gitterzelle befinden sich dabei 20-100 Makropartikel, so dass in der gesamten Simulation oft mehrere Milliarden Partikel enthalten sind. Je nach Teilchenzahl, Auflösung, Adaptivität und benötigter Echtzeit dauert eine Simulationen bei Verwendung von 128 CPUs mehrere Tage. Hinzu kommt, dass eine große Anzahl an Parametern getestet werden muss, weshalb bis zu 100 Simulationen durchgeführt werden müssen.

Mehr zum Thema

1. Wiehle, S. et al., *First Lunar Wake Passage of ARTEMIS: Discrimination of Wake Effects and Solar Wind Fluctuations by 3D Hybrid Simulations*, Plan. Space Sci., subm.
2. Kriegel, H. et al., *Hybrid simulations of moon-magnetosphere interactions at Saturn*, Talk (invited) at AGU Fall Meeting 2010

Förderung

DFG-Schwerpunktprogramm 1488 PlanetMAG

Eine Reise mit vielen Fragezeichen

Untersuchung der Plasmaumgebung des Kometen 67P/Churyumov-Gerasimenko

K.-H. Glaßmeier, C. Koenders, Institut für Geophysik und extraterrestrische Physik, Technische Universität Braunschweig

Kurzgefasst

- Die europäische Raumsonde ROSETTA untersucht ab 2014 den Kometen Churyumov-Gerasimenko.
- Bei Kometen kommt es zu einer Wechselwirkung des Sonnenwindes mit kometaren Gasen, die u.a. den Schweif entstehen lässt.
- Es sind numerische Simulationen notwendig, um genaue Aussagen über diese Wechselwirkung machen zu können und die ROSETTA Mission vorzubereiten.

Am 2. März 2004 startete die europäische Raumsonde ROSETTA zu einer langen Reise, deren Ziel der Komet 67P/Churyumov-Gerasimenko ist. Die Raumsonde soll diesen Kometen im Jahr 2014 erreichen und ihn dann bei seinem Umlauf um die Sonne begleiten.

Vereinfacht dargestellt sind Kometen große Brocken aus Eis und Staub. Ihr Radius beträgt nur wenige Kilometer. Nähert sich ein Komet der Sonne, so wird er durch die zunehmende Sonneneinstrahlung erwärmt. Es kommt zur Sublimation des Eisanteils, so dass eine flüchtige Atmosphäre aus Wassermolekülen und Staubteilchen entsteht. Zudem entsteht ein heller Staubschweif, der immer hinter dem Kometenkern hinterher läuft und hauptsächlich aus den Staubteilchen besteht. Es bildet sich aber auch noch ein weiterer Schweif, der Plasmaschweif. Dieser besteht größtenteils aus ionisierten Wassermolekülen und zeigt immer direkt von der Sonne weg.

Dieses Verhalten lässt sich mithilfe der Plasma-physik erklären: Die Wassermoleküle in der Nähe des Kometen werden durch UV-Strahlung ionisiert und bilden so ein Plasma. Ein anderes Plasma, der Sonnenwind, erreicht den Kometen von der Sonne her kommend. Mit etwa 400 km/s bewegen sich Protonen und Elektronen durch das Sonnensystem. Dieses Plasma transportiert neben den Teilchen auch noch das Magnetfeld der Sonne. Die Wechselwirkung zwischen diesen beiden Plasmen führt zur Ausbildung von unterschiedlichen Strukturen und Grenzschichten. Eine dieser Strukturen ist der Plasmaschweif, dessen Struktur und Dynamik durch unterschiedliche Experimente an Bord der ROSETTA Sonde vermessen werden kann.

In der Vergangenheit sind bereits andere Raumsonde an Kometen vorbeiflogen. Allerdings konnten sämtliche Sonden jeweils nur einmal an „ihrem“ Kometen vorbeifliegen. Somit sind bis heute nur Momentaufnahmen von der Wechselwirkung kometaren Materials mit dem Sonnenwind bekannt. Des Weiteren hatten alle Kometen bei den Vorbeiflügen eine mittlere bis hohe Ausgasungsrate von etwa 10^{27} bis 10^{29} mol/s.

Anders wird dies sein, wenn ROSETTA im Mai 2014 Churyumov-Gerasimenko erreicht. Zu diesem Zeitpunkt befindet sich der Komet in einer Entfernung von etwa 4 Astronomischen Einheiten (AE) zur Sonne und hat eine Ausgasungsrate von nur 10^{24} mol/s. Daher wird eine deutlich schwächere Wechselwirkung erwartet, als es bei den bisher besuchten Kometen der Fall war. Über die Strukturen, die sich bei einer deutlich schwächeren Wechselwirkung ausbilden, ist noch nichts aus Beobachtungsdaten bekannt. Folglich ist ROSETTAs Mission eine Reise mit vielen Fragezeichen.

Um dennoch die Messungen der Sonde in der Umgebung des Kometen zu planen, sind numerische Simulationen erforderlich. Sie stellen bis zur Ankunft die einzige Möglichkeit dar, sich ein Bild von der Wechselwirkungsregion zu verschaffen, denn die Wechselwirkung lässt sich nicht im Labor nachstellen. Nur durch numerische Simulationen können so die zukünftigen Messungen optimiert, Telemetrie und Energie gespart und der wissenschaftliche Erfolg der Mission vergrößert werden.

Das von uns benutzte Simulationsmodell ist ein sogenanntes Hybrid-Modell[1]. In diesem Modell werden die Ionen des Sonnenwindes und der kometaren Teilchen als kinetische Partikel beschrieben. Dies ist besonders wichtig, da geladene Teilchen in einem Plasma um das lokale Magnetfeld gyrieren und somit einen individuellen Teilchencharakter haben. Die Elektronen werden jedoch als Flüssigkeit beschrieben. Dadurch lassen sich zwar keine kinetischen Effekte der Elektronen untersuchen. Allerdings sind die Skalen dieser Effekte deutlich kleiner als die der Ionen und können vernachlässigt werden. Zudem kann durch diese Vereinfachung Rechenkapazität gespart werden.

Anders als in der Luft oder einer Flüssigkeit geschieht die Interaktion zwischen den Teilchen nicht durch Stöße, sondern über elektromagnetische Felder. Diese wirken als Lorentz-Kraft auf die Teilchen im Plasma und es kommt zur Wechselwirkung zwischen den Teilchen und den Feldern. Um Rechenkapazitäten zu sparen, werden in den Simulationen die elektromagnetischen Felder nur auf

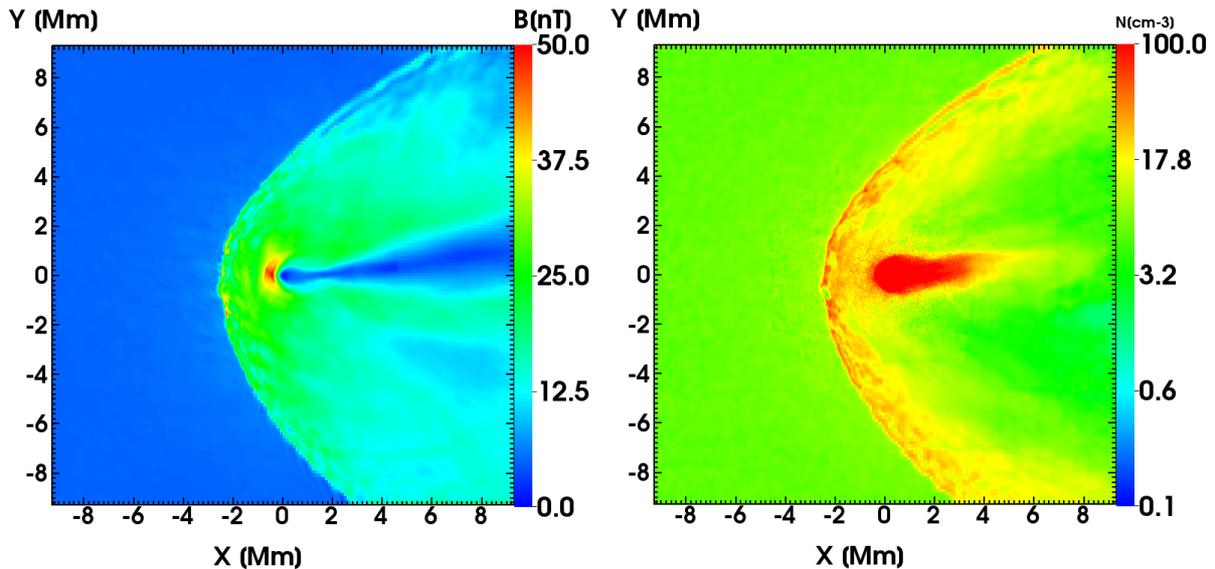


Abbildung 1: Die Ergebnisse einer Simulation der Plasmaumgebung von Churyumov-Gerasimenko bei einer Entfernung von 1,3 AE. Die Abbildungen zeigen zum Einen die Stärke des Magnetfeldes (links) und zum Anderen die Teilchendichte (rechts). Der Sonnenwind strömt von links in die Simulationsbox und ist zunächst ungestört. Allerdings nimmt der Einfluss der kometaren Ionen zum Nukleus (nicht sichtbar, in der Bildmitte) hin stetig zu und es kommt zu einer Bugstoßwelle. Diese parabelförmige Struktur ist sowohl im Magnetfeld als auch in der Teilchendichte durch den sprunghaften Anstieg zu erkennen. Neben zahlreichen anderen Strukturen ist auch zu erkennen, dass sich ein Schweif ausbildet, der von der Sonne weg gerichtet ist. Dies ist der Plasmaschweif.

Gitterknoten berechnet und die Felder für die Berechnungen der Kraft auf die Teilchen interpoliert.

Ein großes Problem bei der Simulation der Wechselwirkung sind die unterschiedlichen Skalen, auf denen Grenzschichten und Strukturen auftreten. Einerseits ist das zu betrachtende Gebiet riesig: mehrere Millionen Kilometer. Andererseits wird sich die ROSETTA Sonde in einer Entfernung von nur einigen 10 Kilometern zum Kometenkern bewegen. Somit ist es notwendig und besonders wichtig, dass die Strukturen in dieser Region durch die Simulationen aufgelöst werden.

Frühere Hybridsimulationen [2] erreichten nur eine räumliche Auflösung von etwa 100km. Sie konnten somit die kleinen Strukturen in der Nähe des Nukleus nicht darstellen. Die Weiterentwicklung des Simulationsprogrammes benutzt nun ein adaptives Gitter, das eine deutlich bessere Auflösung in der Nähe des Nukleus als am Rand der Simulationsbox ermöglicht.

Durch diese Weiterentwicklung und die Rechenkapazitäten auf dem HLRN sind wir nun erstmals in der Lage mit einer Hybridsimulation die diamagnetische Kavität räumlich aufzulösen. Diese Struktur zeichnet sich durch einen sehr starken Abfall der Magnetfeldstärke in der Nähe des Nukleus aus. Erkennen lässt sich diese auch im linken Teil von Ab-

bildung 1 in der Bildmitte, wo die Magnetfeldstärke auf etwa 0nT abfällt.

Die Simulationen aus diesem Projekt werden helfen einige offene Fragen zur Wechselwirkung zu beantworten und somit die ROSETTA Mission voranbringen.

Mehr zum Thema

1. Bagdonat, T. und Motschmann, U.:3D Hybrid Simulation Code Using Curvilinear Coordinates: Journal of Computational Physics, 183:470-485 : doi:10.1006/jcph.2002.7203.
2. Bagdonat, T. und Motschmann, U.:From a Weak to a Strong Comet - 3d Global Hybrid Simulation Studies: Earth Moon and Planets, 90:305-321: doi:10.1023/A:1021578232282

Förderung

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR)

Wie Turbulenz in Galaxienhaufen entsteht

Numerical simulations of an infalling subcluster: A comparative study

W. Schmidt, J. Schulz, E. Lévêque, Institut für Astrophysik, Georg-August-Universität Göttingen

Kurzgefasst

- Galaxienhaufen enthalten große Mengen an Gas, das durch verschiedene Vorgänge durcheinandergewirbelt werden kann.
- Das passiert zum Beispiel, wenn ein kleiner Galaxienhaufen in einen großen Haufen durch dessen Schwerkraft hineingezogen wird.
- Wir untersuchen in einem stark idealisierten Modell, wie dabei Turbulenz entsteht und welche Unterschiede bei der Verwendung von verschiedenen Berechnungsmethoden auftreten. Das kann uns Hinweise darauf geben, wie zuverlässig diese Methoden sind.

Wasserstoffgas bildet innerhalb von Galaxien das Rohmaterial, aus dem Sterne entstehen. Aber auch außerhalb der Galaxien kommen große Gas-mengen vor. In Galaxienhaufen (engl. cluster), also Ansammlungen von Galaxien, die durch die Gravitation der sogenannten Dunklen Materie zusammengehalten werden, gibt es das Intracluster-Medium, das sich auf Grund seiner hohen Temperatur durch Röntgenstrahlung bemerkbar macht. Außerdem hat man Hinweise gefunden, dass das Gas in Galaxienhaufen turbulent ist. Unter Turbulenz versteht man im weiteren Sinne stark fluktuierende, ungeordnete Strömungsbewegungen. Als Ursache für die Turbulenz im Intracluster-Medium kommen Verschmelzungen von Galaxienhaufen in Frage.

In unserem Projekt beschäftigen wir uns mit einem Spezialfall der Verschmelzung von zwei Galaxienhaufen, nämlich des Sturzes eines kleinen Haufens (engl. subcluster) in einen viel größeren. Das ist in gewisser Hinsicht dem Sturz eines kleinen Himmelskörpers, wie etwa eines Asteroiden, auf einen größeren, z. B. einen Planeten, vergleichbar. Nur gibt es in unserem Fall natürlich keine festen Körper, sondern gravitativ gebundene Gasmassen. Uns geht es dabei nicht darum, alle Details möglichst genau zu berücksichtigen, sondern wir studieren grundlegende Eigenschaften dieses Vorganges in einem stark vereinfachten Modell und vergleichen die Ergebnisse, die aus unterschiedlichen Berechnungsmethoden folgen. Dementsprechend kommen individuelle Galaxien im Modell nicht vor. Vielmehr konzentrieren wir uns auf das Gas in den Haufen. Der Subcluster wird durch einen anfangs kugelförmigen Gas-

ball beschrieben, der durch ein bestimmtes Gravitationspotential gebunden ist. Den Sturz in den großen Cluster hinein beschreiben wir durch ein umgebendes Medium konstanter Dichte, das diesen Gasball mit einer Geschwindigkeit umströmt, die der Fallgeschwindigkeit entspricht. Wir bewegen uns also mit dem Subcluster mit und das Gas des großen Clusters erscheint uns damit als eine Art Fahrtwind. Der Trick mit dem mitbewegten Bezugssystem ermöglicht es, zu jedem Zeitpunkt nur einen relativ kleinen Ausschnitt der Umgebung des Subclusters zu berechnen. Dieses Modell wird von uns in verschiedene Codes implementiert, die für strömungsmechanische Berechnungen in der Astrophysik gebräuchlich sind.

Ein flexibler und weit verbreiteter Code, der von einem Gitterverfahren Gebrauch macht, ist Enzo. Unter einem Gitterverfahren versteht man, dass das Raumgebiet, in dem die Strömung berechnet werden soll, in kleine würfelförmige Gitterzellen unterteilt wird. Jeder Zelle sind bestimmte Werte der strömungsmechanischen Variablen (die Dichte des Gases, die Geschwindigkeit der Strömung, etc.) zugeordnet, deren zeitliche und räumliche Veränderung durch die Eulerschen Gleichungen beschrieben wird. In manchen Raumgebieten treten nur über relativ große Abstände hinweg merkliche Änderungen der Variablen auf, während diese in anderen Gebieten stark fluktuieren können. Daher wird die Größe der Gitterzellen dynamisch an die Strömung angepasst. Diese Art der Berechnung nennt man adaptive Gitterverfeinerung. Unsere Arbeitsgruppe hat eine spezielle Methode für die Verfeinerung der Gitter in Simulationen turbulenter Strömungen mit starken Kompressionseffekten entwickelt [1], die auf der Bestimmung statistischer Schwankungen der Vortizität (ein Maß für die Intensität von Wirbeln) und der Kompressionsrate beruht. In einer früheren Studie hat sich herausgestellt, dass diese Methode für das oben beschriebene Modell sehr gut funktioniert [2]. Die Abbildung 1 veranschaulicht die zeitliche Entwicklung der Strömung im Umfeld des Subclusters anhand des Betrages der Vortizität in einer aktuellen Simulation mit 256 Prozessorkernen.

Im weiteren Verlauf des Projekts werden wir ähnliche Simulationen mit Castro ausführen, einem am Lawrence Berkeley National Laboratory entwickelten Code, der ein ausgeklügelteres Verfahren zur Lösung der Eulerschen Gleichungen verwendet. Darüberhinaus planen wir einen Vergleich der Ergebnisse mit dem Code Gadget. Anders als Castro berechnet Gadget die Bewegungen einer Vielzahl

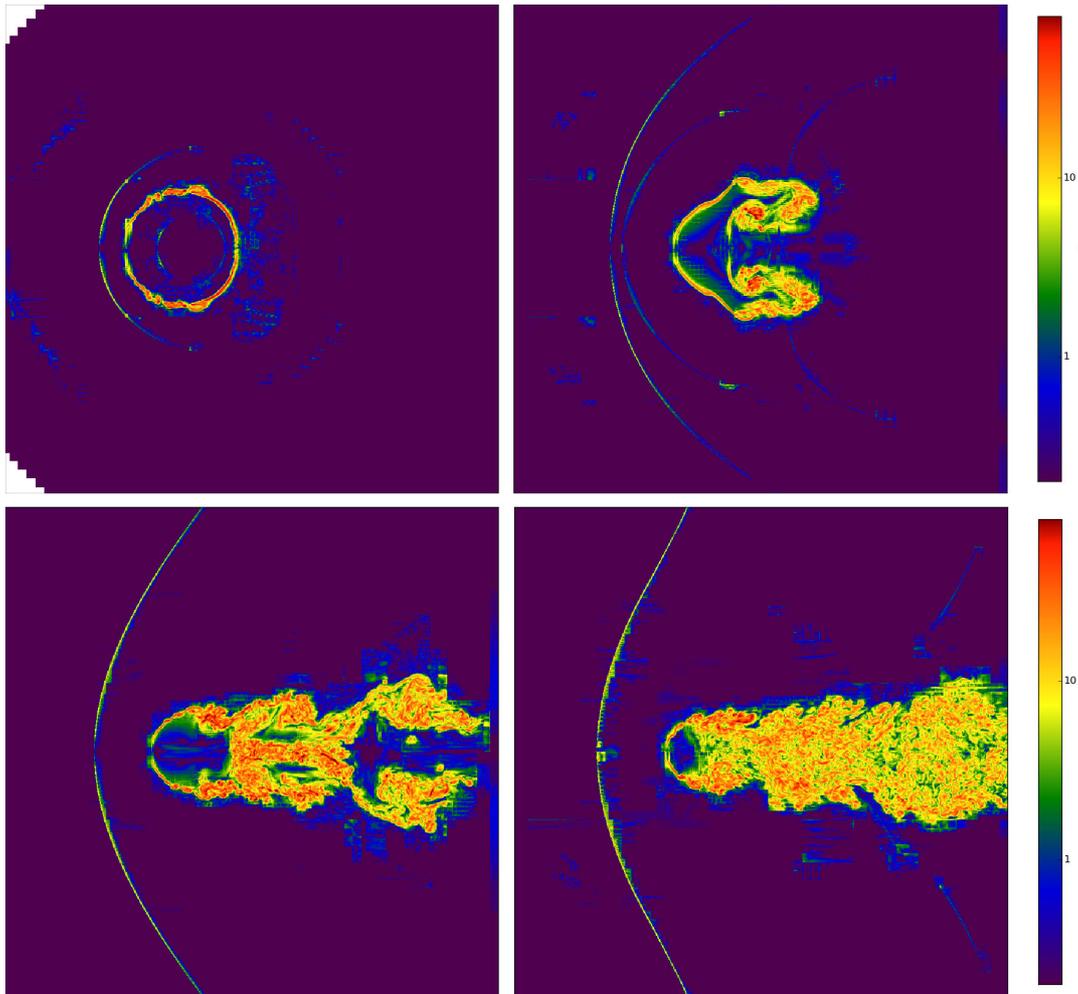


Abbildung 1: Darstellung der Vortizität des den Subcluster umströmenden Gases in einer Schnittebene an vier aufeinanderfolgenden Zeitpunkten. Die Bewegungsrichtung des Subclusters in den großen Cluster hinein muss man sich von rechts nach links denken. Der sichtbare Bildausschnitt bewegt sich aber mit dem Subcluster mit, sodass dessen Position fest bleibt und das umgebende Gas von links nach rechts vorbeiströmt. Infolgedessen wird von dem anfangs kugelförmigen Gasball im Laufe der Zeit mehr und mehr Gas abgestreift und es bildet sich ein stark turbulenter Schweif aus.

von sich mit der Strömung mitbewegenden Teilchen. Dies soll uns Aufschluss über die Frage geben, welche Methode zur Simulation astrophysikalischer Turbulenz besonders geeignet ist.

Mehr zum Thema

1. Schmidt, W., J. C. Niemeyer, M. Hupp, C. Federrath and A. Maier, 2007: A New Modelling Approach for Turbulent Astrophysical Flows, <http://www.deisa.eu/science/deci/projects2005-2006/FEARLESS>
2. Iapichino, L., J. Adamek, W. Schmidt and J. C. Niemeyer 2008: Hydrodynamical adaptive mesh refinement simulations of turbulent flows - I. Substructure in a wind, *Month. Not. Roy. Astron. Soc.* 388, 1079-1088

Förderung

Georg-August-Universität Göttingen

Vielteilchentanz im Gigahertz-Takt Quanten-Monte-Carlo für korrelierte Quantensysteme im und abseits des thermischen Gleichgewichts

Th. Pruschke, A. Honecker, S. Fuchs, A. Kalz, A. Dirks, Theoretische Physik, Universität Göttingen

Kurzgefasst

- Unsere Computer werden immer kleiner, schneller und leistungsfähiger. Mittlerweile werden die Strukturen auf den Chips so klein, dass die detaillierten Eigenarten einzelner Elektronen wichtig werden und zum Teil sogar die Eigenschaften dominieren.
- Dieses Grenzland zwischen unserer täglichen Erfahrungswelt und den Gesetzen auf atomaren Längenskalen stellt eine große Herausforderung an die moderne Festkörperphysik dar, deren Bewältigung den Einsatz moderner Höchstleistungscomputer erforderlich macht.
- Für unsere Rechnungen setzen wir numerische Verfahren basierend auf statistischen Methoden ein. Um damit verlässliche Aussagen ableiten zu können, benötigt man eine ausreichend große Stichprobe an Daten. Höchstleistungscomputer wie der HLRN mit schneller interner Kommunikation und gutem Speicherausbau erlauben, viele solcher Stichproben gleichzeitig (=parallel) zu erzeugen und damit die nötigen Rechenzeiten auf ein vernünftiges Maß zu beschränken.
- Im vergangenen Jahr konnten so in unserem Projekt neue Ergebnisse zum Verhalten von Teilchen in eingeschränkten Geometrien (*Quantenpunkte, optische Fallen, ...*) sowie zum sog. *quantenkritischen Verhalten* infolge konkurrierender Wechselwirkungen erhalten werden, die zu einem tieferen Verständnis der Eigenschaften wechselwirkender Quantenobjekte führen.

Die theoretische Untersuchung wechselwirkender Quantensysteme ist eines der aktivsten Gebiete der modernen Festkörperforschung. Neue Herausforderungen sind in den letzten 10 Jahren durch die Fortschritte in der Nanostrukturierung von Materialien und der Erzeugung komplexer Systeme ultrakalter Atome entstanden: Inhomogene Strukturen in optischen Fallen, Nichtgleichgewichtstransport durch Nanostrukturen und die damit zusammenhängenden möglichen Anwendungen im Gebiet der Spintronik oder des Quantencomputing machen es notwendig, diese Systeme quantitativ zu beschreiben. Aufgrund der Komplexität und der Konkurrenz verschiedener Energie- bzw. Zeit- und Längenskalen werden hier Metho-

den benötigt, die möglichst wenige, kontrollierte Näherungen benötigen [1]. Relativ universell einsetzbar ist das Quanten-Monte-Carlo-Verfahren, das eine Auswertung komplexer Gleichungssysteme mit statistischen Mitteln ermöglicht. Bisher gab es allerdings das Problem, dass man (i) Raum und Zeit diskretisieren musste und (ii) keine Probleme abseits des thermodynamischen Gleichgewichtes behandeln konnte. Infolge der Entwicklung neuer Algorithmen in den vergangenen 5 Jahren sind diese Restriktionen zum Teil überwunden worden, und man kann mit Monte-Carlo-Simulationen effizienter und vor allem zuverlässiger komplexe Quantensysteme im und jenseits des thermischen Gleichgewichtes untersuchen.

Die Themen, die in unserem Projekt untersucht werden, sind zum einen die Simulation stationärer Nichtgleichgewichtszustände in Nanostrukturen [2], sog. *Quantenpunkten*, und zum anderen die Untersuchung der Dynamik stark wechselwirkender Gittermodelle mit konkurrierenden Wechselwirkungen im thermischen Gleichgewicht [3].

Hier bieten die neuen Algorithmen z.B. durch die Abwesenheit bzw. potentielle Reduktion des bekannten Vorzeichenproblems in Monte-Carlo-Simulationen die Möglichkeit, bislang nicht zugängliche Fragestellungen zu untersuchen. Beide Bereiche sind durch ähnliche Modelle und damit zusammenhängend gleichartige numerische Algorithmen verknüpft. Die eingesetzten Algorithmen werden im Rahmen einer internationalen Kooperation, dem ALPS-Projekt, entwickelt und dabei ständig auf die effiziente Ausnutzung moderner Rechnerarchitekturen hin optimiert [4].

Ein Querschnitt der mit Hilfe des HLRN in der vergangenen Förderperiode erhaltenen Ergebnisse ist in Abb. 1 dargestellt.

- (i) *Elektronische Eigenschaften von Festkörpern*: Abb. 1a und b stellen gerechnete Photoemissionsspektren eines Festkörpers dar. In Abb. 1a liegt ein sog. *korreliertes Metall* vor, dessen Fingerabdruck die reichhaltigen, in der Mitte scharfen, Strukturen sind; in Abb. 1b hingegen liegt ein Isolator vor, der in der Mitte des Spektrums eine *Lücke* aufweist. Solche Spektren finden sich experimentell in vielen Übergangsmetallverbindungen, wobei der Übergang zwischen Metall und Isolator z.B. durch äußeren Druck verursacht werden kann.
- (ii) *Thermometrie für endliche Systeme*: Für endliche Systeme mit kleiner Teilchenzahl ist

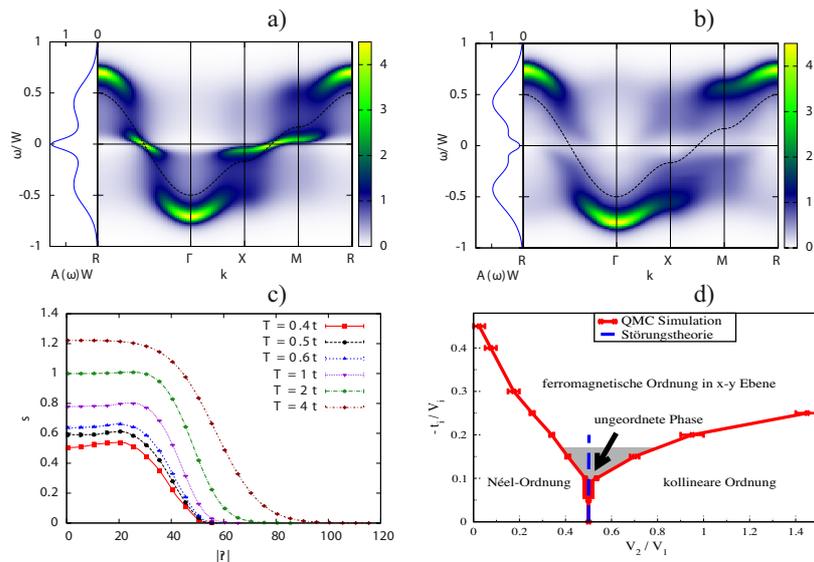


Abbildung 1: Ergebnisse aus Rechnungen mit den Computern des HLRN: Winkelaufgelöstes Photoemissionsspektrum eines a) korrelierten Metalls bzw. b) Isolators. Panel c) zeigt die Entropie eines Ensembles kalter Atome als Funktion des Abstandes vom Zentrum für verschiedene Temperaturen, und d) das Grundzustandsphasendiagramm eines Modells für ein magnetisches Material.

die Temperatur schwer zu messen. Hingegen kann man z.B. aus Experimenten die Entropie bestimmen, und aus dieser dann die Temperatur. Solche gerechneten Entropiekurven für verschiedene Temperaturen als Funktion des Abstandes vom Massenschwerpunkt des Systems zeigt Abb. 1c. Vergleiche einer solchen Rechnung mit Meßkurven können dazu dienen, eine solche Thermometrie durchzuführen.

(iii) *Konkurrierende Wechselwirkungen:* Konkurrenz von Wechselwirkungen in Quantensystemen kann ganz einschneidende Folgen für das physikalische Verhalten haben. In Abb. 1d sieht man das Grundzustandsphasendiagramm eines magnetischen Modells mit Wechselwirkungen verschiedener Reichweiten (V_1, V_2), die unterschiedlich geordnete Zustände favorisieren. Zusätzliche Quantenfluktuationen (t_i) erweitern das Phasendiagramm um weitere Grundzustände. Solch ein Wechselspiel aus unterschiedlichen Phasen kann für Anwendungen im Bereich zukünftiger Informationstechnologien, z.B. in Hinblick auf die sog. *Spintronik*, relevant sein.

Mehr zum Thema

1. Th. Maier, M. Jarrell, Th. Pruschke, M.H. Hettler, *Quantum Cluster Theories*, Rev. Mod. Phys. **77**, 1027 (2005); J.E. Han, R.J. Heary, *Imaginary-Time Formulation of Steady-State Nonequilibrium: Application to Strongly Correlated Transport*, Phys. Rev. Lett. **99**, 236808 (2007).
2. A. Dirks, P. Werner, M. Jarrell, T. Pruschke, *Continuous-Time Quantum Monte Carlo and Maximum Entropy Approach to an Imaginary-Time Formulation of Strongly Correlated Steady-State Transport*, Phys. Rev. E **82**, 026701 (2010).
3. S. Fuchs, T. Pruschke, M. Jarrell, *Analytic Continuation of Quantum Monte Carlo Data by Stochastic Analytical Inference*, Phys. Rev. E **81**, 056701 (2010).
4. E. Gull, P. Werner, S. Fuchs, B. Surer, T. Pruschke, M. Troyer, *Continuous-Time Quantum Monte Carlo Impurity Solvers*, erscheint in Computer Physics Communications; E. Gull, P. Staar, S. Fuchs, P. Nukala, M.S. Summers, Th. Pruschke, Th. Schulthess, Th. Maier, *Sub-matrix updates for the Continuous-Time Auxiliary Field algorithm*, arXiv:1010.3690 (2010).

Förderung

Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG); Deutscher Akademischer Austausch Dienst (DAAD)

Elektronen im Atom in Aufregung versetzt

First principle simulations of classical and quantum charged-particle systems

M. Bonitz, K. Balzer, S. Bauch, T. Ott, Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

Kurzgefasst

- Simulation der durch starke Felder induzierten Elektronendynamik in Atomen und Molekülen mit quantenstatistischen Methoden.
- Die Beschreibung der Elektron-Elektron Wechselwirkung gelingt auf einem relativ hohen Niveau, inklusive Korrelationeneffekte.
- Simulationen sind aufgrund der komplexen mathematischen Struktur der quantenstatistischen Bewegungsgleichungen sehr aufwendig und benötigen mehr als 2 TB Speicher bei parallelem Einsatz von bis zu 1024 CPUs.

Grundlegende Eigenschaften unserer Alltagswelt werden durch Prozesse auf kleinsten Raum- und Zeitskalen physikalisch bestimmt. Eine maßgebliche Rolle spielen dabei die Elektronen – negativ geladene Elementarteilchen – die für die chemischen, elektrischen und optischen Eigenschaften von Atomen, Molekülen und Materialien verantwortlich sind. Insbesondere ihre zeitliche Dynamik und die Möglichkeiten zu ihrer Kontrolle stehen daher seit vielen Jahren im Fokus theoretischer und experimenteller Untersuchungen.

In den letzten Jahren sind mit dem Aufkommen der sogenannten “Attophysik” (eine Attosekunde ist der 10^{18} te Teil einer Sekunde) enorme Fortschritte auf dem Gebiet der experimentellen Physik erreicht worden [1]. Von zentraler Bedeutung ist dabei die Entwicklung und Nutzung neuartiger Strahlungsquellen, die kohärentes “Licht” im Ultraviolett bis hin zum Röntgenbereich erzeugen. Beispiele dafür sind freie Elektronenlaser und neue Labor-Laserquellen. Sie erlauben es, mit bisher unerreichter Präzision immer schnellere Prozesse zu untersuchen und zu kontrollieren. Insbesondere die Bewegung der Elektronen in einzelnen Atomen oder Molekülen und ihre gegenseitige Beeinflussung kann damit zeitlich aufgelöst untersucht werden. Dazu gehören fundamentale Prozesse wie Stöße, Anregungen und Zerfallsprozesse, aber auch das Entstehen und Aufbrechen chemischer Bindungen in Molekülen und an der Oberfläche von Festkörpern.

Diese neuartigen Experimente zu verstehen, erfordert eine angemessene theoretische Beschreibung. Die Prozesse im Atom können dabei nur im Rahmen der *Quantenmechanik* verstanden wer-

den, die unser Universum auf mikroskopischer Ebene beherrscht. Im Gegensatz zur sogenannten klassischen Mechanik werden die Elektronen dabei nicht wie Planeten auf festen Bahnkurven durch Ort und Geschwindigkeit beschrieben, sondern durch eine räumlich “verschmierte” Aufenthaltswahrscheinlichkeit. Dadurch ergibt sich allerdings eine vielfach erhöhte Anforderung an Computer-Speicher und Rechenzeit.

Die Grundgleichung der nicht-relativistischen Quantenmechanik ist die Schrödingergleichung, welche die elektronischen Bewegungen und Wechselwirkungen in kleinen Atomen vollständig beschreibt und die experimentell hervorragend bestätigt ist. Ihre Lösung ist für ausgewählte Systeme numerisch handhabbar, wobei Effizienz und der Speicherbedarf jedoch exponentiell mit der Anzahl der Teilchen skalieren; als obere Grenze gelten heute 4 Elektronen. Atome und Moleküle beinhalten zum überwiegenden Teil jedoch deutlich mehr Elektronen. Hierbei muss berücksichtigt werden, dass jedes Elektron paarweise – über seine Ladung – und zusätzlich durch seine quantenmechanische Natur (Austausch), mit allen anderen in Verbindung steht. Daher bedienen wir uns der Methoden der Quantenfeldtheorie, insbesondere der Theorie der Nichtgleichgewichts-Greenfunktion (NGGF), die eine zweckmäßige Beschreibung von Vielteilchensystemen auf einem hohen Niveau zur Verfügung stellt. In den letzten Jahren haben wir diese Verfahren weiterentwickelt [3] und auf Prozesse, die in Atomen auf Attosekunden Zeitskalen ablaufen, ausgedehnt.

In diesem Projekt untersuchen wir die Vielteilchen-Dynamik von Elektronen in Atomen und Molekülen mit dem oben erwähnten NGGF-Zugang. Dabei lösen wir ein System gekoppelter, partieller Integro-Differentialgleichungen – die sogenannten Keldysh-Kadanoff-Baym-Gleichungen. Das Vorhandensein von zwei Zeitargumenten macht die Berechnungen dabei sowohl besonders zeit- als auch extrem speicheraufwändig. Die Länge der Simulation ist bei gegebener Basis zur Darstellung der NGGF über den maximal nutzbaren Arbeitsspeicher M festgelegt und ist proportional zu \sqrt{M} .

Als ein repräsentatives Beispiel zeigen wir in Abbildung 1 numerische Ergebnisse zur Elektronendynamik im Lithiumhydridmolekül (LiH) [3]. Dieses besteht aus einem dreifach positiv geladenen Lithium-Kern, einem einfach positiv geladenen Wasserstoff-Kern und vier Elektronen. Die Elektron-Kern Wechselwirkung (bei festem Bin-

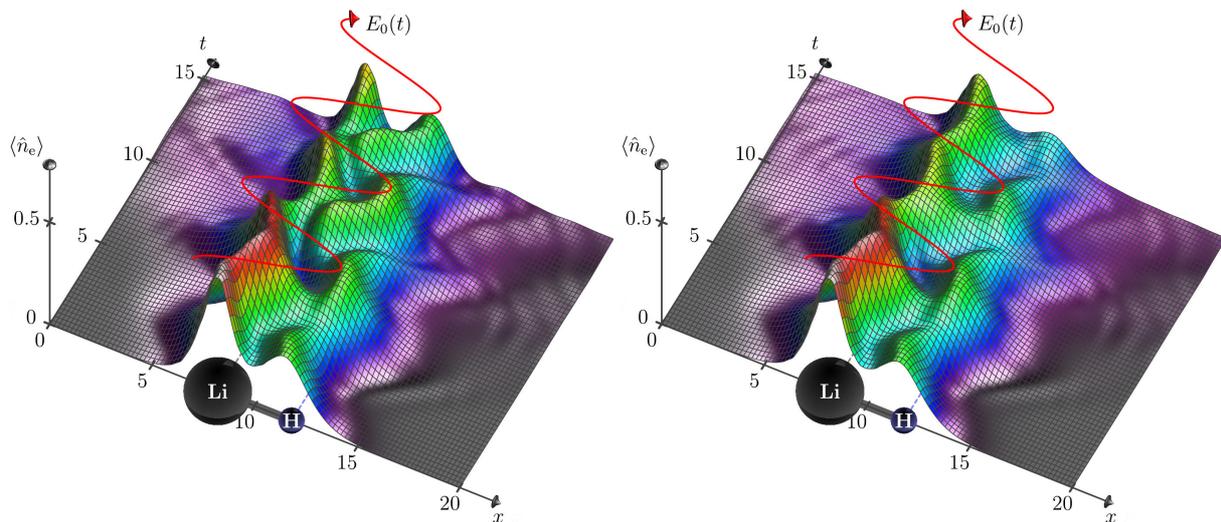


Abbildung 1: Zeitabhängige Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichte $\langle \hat{n}_e \rangle(x, t)$ der vier Elektronen im Lithiumhydridmolekül bei Laseranregung im (X)UV-Wellenlängenbereich aus Quantenfeldtheoretischen Simulationen [3], links: ohne und rechts mit Elektron-Elektron-Korrelationen. Die rote Linie skizziert den zeitlichen Verlauf der Amplitude $E_0(t) \propto E_0 \cos(\omega t)$ des Laserfeldes, $E_0 = 2.0 \times 10^{16} \text{ W/cm}^{-2}$ und $\omega = 35.5 \text{ eV}$. In beiden Fällen oszilliert die Elektronendichte in nichttrivialer Weise im Laserfeld. Dabei kommt das Resultat der rechten Abbildung dem exakten Verhalten, welches bei Systemen mit vier Elektronen noch berechenbar ist, relativ nahe. Eine Zeiteinheit entspricht jeweils 24 Attosekunden (24×10^{-18} Sekunden), und eine Ortseinheit sind 0.0529 Nanometer (0.0529×10^{-9} Meter).

dungsabstand) erfolgt durch die anziehende Coulombkraft, während die Elektronen sich gegenseitig über die Coulombkraft abstoßen und sich zusätzlich durch ihre quantenmechanische Natur (Pauliprinzip) beeinflussen.

Vereinfacht könnte man erwarten, dass sich die Elektron-Elektron Wechselwirkung in der Vielteilchendynamik dadurch berücksichtigen lässt, dass jedes einzelne Elektron in klassischer Weise mit dem mittleren Feld (Mean-Field) in Wechselwirkung tritt, das durch die Aufenthaltswahrscheinlichkeit der anderen Elektronen erzeugt wird. Dies ist jedoch eine sehr vereinfachte Vorstellung, die viele Prozesse nicht korrekt beschreibt. Sie erfordert daher quantenstatistische Korrekturen: Es müssen 1. Austauscheffekte berücksichtigt werden, die durch das Pauli-Prinzip hervorgerufen werden, und 2. sind Korrekturen, die als Elektron-Elektron Korrelationen bezeichnet werden, zu berücksichtigen. Der Vorteil unseres Zugangs liegt darin, dass das Pauli-Prinzip durch Anwenden der Quantenfeldtheorie intrinsisch eingebaut ist. Desweiteren lassen sich Korrelationseffekte mit relativ einfachen Näherungen gut beschreiben. Dass Korrekturen aufgrund von Korrelationen bei Anregungsprozessen auf Attosekundenzeitskala wichtig sind, zeigt Abbildung 1.

Mit diesen Resultaten haben wir die Grundlage gelegt für die theoretische Beschreibung

von Attosekundenprozessen in größeren Atomen und Molekülen. Der Erfolg dieser Untersuchungen ist dabei in kritischer Weise abhängig von der Verfügbarkeit modernster Rechenkapazitäten, die uns am HLRN dankenswerterweise zur Verfügung stehen.

Mehr zum Thema

1. F. Krausz and M. Ivanov, *Rev. Mod. Phys.* **81** 163 (2009)
2. S. Bauch, K. Balzer and M. Bonitz, *Europhys. Lett* **91** 53001 (2010)
3. K. Balzer, S. Bauch and M. Bonitz, *Phys. Rev. A* **81** 022510 (2010); *ibid.* **82** 033427 (2010)
4. www.theo-physik.uni-kiel.de/~bonitz

Förderung

DFG-Sonderforschungsbereich TR24; BMBF Verbundprojekt "Flash"

Chirale Nanomagnete an Oberflächen Nichtkollinearer Magnetismus auf Oberflächen durch Spin-Bahn-Kopplung

S. Schröder, P. Ferriani, S. Heinze, Institut für Theoretische Physik und Astrophysik, Christian-Albrechts-Universität zu Kiel

Kurzgefasst

- Die Spintronik basiert auf der Idee, neben der Ladung auch den Spin des Elektrons zur Informationsdarstellung und -verarbeitung zu nutzen.
- Der Spin und die Bahnbewegung des Elektrons bewirken das magnetische Moment eines Atoms, das in einem Festkörper der Austauschwechselwirkung mit seinen Nachbarn unterliegt.
- Aufgrund der gebrochenen Inversionssymmetrie an Oberflächen tritt die sogenannte Dzyaloshinskii-Moriya-Wechselwirkung auf, die Spinstrukturen mit einer gewissen Händigkeit (Chiralität) bevorzugt.
- Parameterfreie, quantenmechanische Rechnungen basierend auf der Dichtefunktionaltheorie für Festkörperoberflächen erlauben es, das Zwischenspiel dieser Wechselwirkungen zu bestimmen und experimentell gefundene neue magnetische Strukturen zu erklären.
- Aufgrund der Größe der Systeme, der Nichtkollinearität der Spinstrukturen und der hohen Genauigkeit bezüglich der Energieunterschiede verlangen diese Rechnungen den parallelen Einsatz mehrerer hundert CPUs.

Im heutigen Informationszeitalter ist die Speicherung und Verarbeitung riesiger Datenmengen von zentraler Bedeutung. Daher wird der Erforschung neuer Technologien, die beispielsweise eine größere Speicherkapazität und höhere Lesegeschwindigkeit versprechen, besondere Aufmerksamkeit gewidmet. Ein Durchbruch auf diesem Gebiet gelang 1988 mit der voneinander unabhängigen Entdeckung des Riesenmagnetowiderstandes (*engl.* giant magneto resistance, GMR) durch P. Grünberg und A. Fert, wofür diese 2007 gemeinsam mit dem Nobelpreis für Physik ausgezeichnet wurden. Der GMR-Effekt basiert auf der spinabhängigen Streuung von Elektronen, wodurch der elektrische Widerstand von der relativen Orientierung der Magnetisierung der magnetischen Schichten in einer Multilagenstruktur abhängt. Er findet heute Anwendung in den Leseköpfen von Festplatten und ermöglichte den fortgesetzten exponentiellen Anstieg der Speicherkapazität. Außerdem war die Entdeckung des GMR die Geburtsstunde der Spin(elek)tronik.

Der Spin, eine intrinsische Eigenschaft des Elektrons wie seine Ladung, bildet mit der Bahnbewegung des Elektrons die Grundlage für das magnetische Moment eines Atoms. Durch die Austauschkopplung zwischen den magnetischen Momenten benachbarter Atome im Festkörper kann es zu der Ausbildung einer magnetischen Ordnung wie dem Ferromagnetismus, also der parallelen Orientierung der magnetischen Momente, oder komplexeren nichtkollinearen Strukturen kommen, bei denen die magnetischen Momente in beliebigen Richtungen zueinander angeordnet sein können (z. B. [1]). Die Kopplung von Spin- und Bahnmoment durch die sogenannte Spin-Bahn-Kopplung führt zu einer Ausrichtung der magnetischen Momente relativ zu den Kristallachsen. Falls der Festkörper keine Inversionssymmetrie aufweist, kann diese Kopplung auch eine Verkipfung der magnetischen Momente der Atome zueinander bewirken und führt zu Spinstrukturen mit einer gewissen Händigkeit. Dieser Effekt wurde bereits vor 50 Jahren von I. Dzyaloshinskii und T. Moriya zur Erklärung des schwachen Ferromagnetismus in antiferromagnetischen Materialien vorgeschlagen.

Während die Kristallstruktur elementarer Metalle inversionssymmetrisch ist, wird diese Symmetrie an jeder Ober- oder Grenzfläche gebrochen und die Dzyaloshinskii-Moriya-(DM)-Wechselwirkung kann immer auftreten. Erstaunlicherweise wurde jedoch erst 2007 mittels der spinpolarisierten Rastertunnelmikroskopie (RTM), die eine Abbildung magnetischer Strukturen auf der atomaren Skala erlaubt, entdeckt, dass diese Wechselwirkung tatsächlich an Oberflächen sehr stark ist und chirale Spinspiralstrukturen hervorruft [2].

Bei nanostrukturierten Festkörperoberflächen handelt es sich um Vielelektronensysteme, deren theoretische Beschreibung ausgehend von der Quantenmechanik eine gewaltige Herausforderung ist. Ein mächtiges Verfahren dazu stellt die Dichtefunktionaltheorie dar, auf deren Grundlage eine Vielzahl von Methoden für unterschiedliche Anwendungen entwickelt worden sind. Für unser Projekt ist eine sehr hohe Genauigkeit bei der Berechnung der Energiedifferenz zwischen verschiedenen nichtkollinearen magnetischen Strukturen unter Berücksichtigung der Spin-Bahn-Kopplung nötig, die nur wenige Methoden wie z. B. die von uns verwendete 'Full-Potential Linearized Augmented Plane Wave'-(FLAPW)-Methode leisten.

Seit der Entdeckung der dramatischen Konsequenzen der DM-Wechselwirkung in Nanostruk-

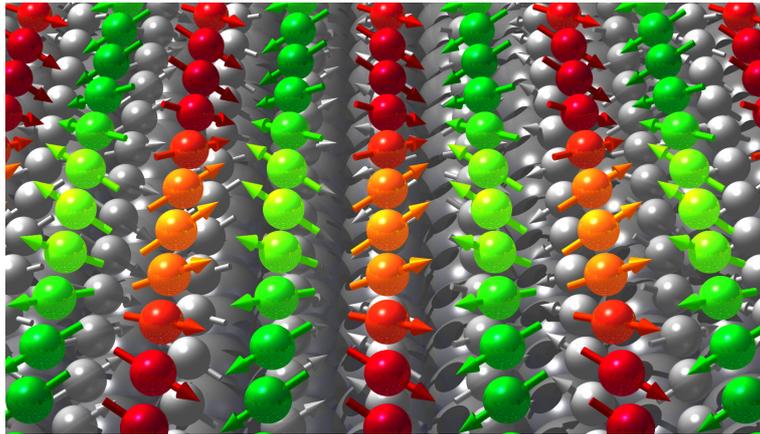


Abbildung 1: Konischer Spinspiralzustand einer Doppellage von Manganatomen auf der Wolfoberfläche. Die obere Lage der Struktur wurde farbig dargestellt. Die magnetischen Momente rotieren in dieser Struktur von Atom zu Atom mit einem konstanten Winkel um eine Achse senkrecht zu der Ausbreitungsrichtung der Spirale, die in die Bildebene läuft. Zusätzlich sind die Spins relativ zur Rotationsachse um den Öffnungswinkel verkippt. Die Einfärbung soll hierbei die betrachtete Komponente der Magnetisierung verdeutlichen. In diesem Fall bezeichnet grün die positive Ausrichtung des magnetischen Moments innerhalb der Filmebene, während rot die negative Ausrichtung darstellt. Die relative Orientierung senkrecht zur Filmebene variiert ebenfalls farblich. Weiterhin sind die untere Manganlage sowie das Wolframsubstrat in der Abbildung in grau gezeigt.

turen an Oberflächen wurden bereits einige weitere Systeme gefunden, in denen diese bislang vernachlässigte Wechselwirkung die magnetische Ordnung bestimmt. Neben dem Auftreten von Spinspiralen in ultra-dünnen Filmen [2][3] konnten wir kürzlich zeigen, dass magnetische Skyrmionengitter in solchen Systemen auftreten können [4]. Die Erforschung der DM-Wechselwirkung in Nanomagneten an Oberflächen steht jedoch erst am Anfang und daher untersuchen wir in unserem Projekt, in welchen Materialsystemen sie auftritt, wie stark sie ist, wovon ihre Stärke abhängt und welche Art von Spinstrukturen induziert wird. Dabei betrachten wir auch die weitere Verringerung der Dimension des Systems von zweidimensionalen Filmen zu eindimensionalen atomaren Ketten, die seit einigen Jahren auch experimentell hergestellt und untersucht werden können.

Kürzlich wurden in der Gruppe von Prof. Wiesendanger (Universität Hamburg) Messungen mittels spinpolarisierter RTM an einer Doppellage aus Mangan-Atomen auf der (110)-Oberfläche von Wolfram durchgeführt, die überraschenderweise ein vollkommen anderes Resultat lieferten als die Messungen an einer einzigen Manganlage auf der gleichen Oberfläche [2]. Mit Hilfe aufwändiger Rechnungen, die am HLRN durchgeführt worden sind, konnten wir die vorliegende magnetische Struktur enträtseln, den beobachteten Kontrast in den RTM-Bildern erklären und den mikroskopischen Mechanismus hinter dieser Spinstruktur auf-

decken. Bei der gefundenen magnetischen Struktur handelt es sich um eine konische Spinspirale mit einem Öffnungswinkel von etwa 20° , die entlang der [001]-Richtung der Oberfläche läuft (s. Abb. 1). Interessanterweise zeigt sich, dass neben der DM-Wechselwirkung auch Austauschwechselwirkungen höherer Ordnung von entscheidender Bedeutung sind. Für dieses System wurden sehr viele Rechnungen mit bis zu 210 Prozessoren für jeweils etwa einen Tag benötigt.

Mehr zum Thema

1. M. Waśniowska, S. Schröder, P. Ferriani, S. Heinze: *Real space observation of spin frustration in Cr on a triangular lattice*, Phys. Rev. B **82**, 012402 (2010).
2. M. Bode *et al.*: *Chiral magnetic order at surfaces driven by inversion asymmetry*, Nature **447**, 190-193 (2007).
3. P. Ferriani *et al.*: *Atomic-Scale Spin Spiral with a Unique Rotational Sense: Mn Monolayer on W(001)*, Phys. Rev. Lett. **101**, 027201 (2008).
4. S. Heinze *et al.*: *Spontaneous atomic-scale magnetic skyrmion lattice in two dimensions*, submitted.

Förderung

Universität Kiel; Das Projekt wird am HLRN mit bis zu 2048 parallel genutzten CPU-Kernen gefördert.

Erforschung der räumlichen Organisation des Genoms

Untersuchung strukturregulierender Parameter für kurze und lange Chromatinfasern durch Monte-Carlo-Simulationen

G. Wedemann, CC Bioinformatics, Institute for Applied Computer Science, Fachhochschule Stralsund

Kurzgefasst

- DNA liegt im Zellkern hochgradig verpackt als Chromatin vor
- Struktur und Zugänglichkeit der DNA beeinflussen maßgeblich Transkription, Replikation und DNA-Reparatur
- Die Strukturen im Zellkern sind experimentell nur schwer zugänglich
- Simulationen physikalischer Modelle von Chromatinfasern im thermodynamischen Gleichgewicht
- Ziel ist die Identifikation strukturregulierender Faktoren, ein besseres Verständnis von experimentellen Daten und die Überprüfung theoretischer Chromatinmodelle

Die Desoxyribonukleinsäure (DNA) ist der Träger der Erbinformation und liegt bei höheren Lebensformen im Zellkern vor. Bei einer menschlichen Zelle beträgt die Gesamtlänge der DNA etwa 2 m. Das bedeutet, dass die DNA eng gepackt werden muss, um im wenige Mikrometer großen Zellkern Platz zu finden. Gleichzeitig muss die DNA aber auch leicht zugänglich bleiben, damit sie abgelesen werden kann. Im Zellkern ist die DNA deshalb hierarchisch verpackt: Im ersten Schritt ist die DNA um ein Oktamer aus Proteinen, den Histonen, gewunden und bildet so eine zylinderförmige Struktur, das Nukleosom. Durch die Aneinanderreihung der Nukleosomen entsteht eine Struktur, die an eine Perlenkette erinnert. Diese Struktur wird als Chromatin bezeichnet, welches wiederum das Baumaterial für die Chromosomen darstellt. Die Struktur des Chromatins und der Chromosomen ist allerdings nicht statisch, sondern wird aktiv von der Zelle reguliert.

Die Struktur des Chromatins hat direkten Einfluss auf die Zugänglichkeit der DNA und beeinflusst somit das Ablesen der Erbinformation (Transkription), seine Vervielfältigung (Replikation) und DNA-Reparatur. Für eine Vielzahl von Genen konnte ein direkter Zusammenhang zwischen der Chromatinstruktur und der Genaktivität gezeigt werden. Weiterhin konnte ein Zusammenhang zwischen Faktoren, die die Chromatinstruktur beeinflussen (Histonmodifikation oder DNA-

Methylierung) und verschiedenen Formen von Krebs sowie neurodegenerativen Krankheiten festgestellt werden. Aus diesen Gründen ist es sehr wichtig, den Zusammenhang zwischen der Chromatinstruktur und der Genexpression genau zu verstehen.

Auch mehr als 30 Jahre nach der Entdeckung des Nukleosoms bleiben die 3D-Struktur des Chromatins und die Mechanismen der Regulation der Struktur unklar, da Experimente nur sehr eingeschränkt Informationen über die Struktur des Chromatins liefern, z.B. ist die DNA in Elektronenmikroskopischen Aufnahmen nicht sichtbar.

In diesem Projekt untersuchen wir, welchen Einfluss lokale Strukturparameter auf die Struktur des Chromatin haben. Die Simulationen leisten einen wichtigen Beitrag zum Verständnis der Strukturregulation, verbessern das Verständnis von experimentellen Ergebnissen und ermöglichen die Überprüfung von verschiedenen Modellen und Theorien.

Für die Simulationen der Eigenschaften einzelner Nukleosomen verwenden wir atomare Modelle und simulieren diese mit der Technik der Molekulardynamik. Dabei untersuchen wir die Unterschiede zwischen Nukleosomen, die auf verschiedene Art und Weise modifiziert worden sind. Diese sehr aufwändigen Berechnungen liefern Einblicke in die Dynamik von Nukleosomen und ihren einzelnen Komponenten[1]. Weiterhin erlauben sie die Untersuchung der Wechselwirkung von zwei Nukleosomen.

Diese Erkenntnisse dienen dazu, gröber auflösende Chromatinmodelle zu entwickeln. Bereits ein einzelnes Nukleosom besteht aus etwa 28000 einzelnen Atomen. Das bedeutet, dass bereits kleinere Chromatinfasern nicht mehr auf atomarer Ebene abgebildet werden können, da der dafür benötigte Rechen- und Speicherbedarf zu groß wäre. Deshalb haben wir ein vereinfachtes Chromatinmodell entwickelt, welches aber gleichzeitig detailliert genug ist, um alle relevanten physikalischen Eigenschaften abzubilden. Im Modell wird die DNA-Helix als Kette elastischer Segmente abgebildet. Diese besitzen, wie auch die DNA, eine negative Ladung, was dazu führt dass sich einzelne Segmente voneinander abstoßen. Die Nukleosomen werden durch spezielle anisotrope Potentiale modelliert, deren Stärke und Größe von der Orientierung der Nukleosomen zueinander abhängig ist. Dabei ist die lokale Geometrie der Nukleosomen durch diverse Parameter (z.B.

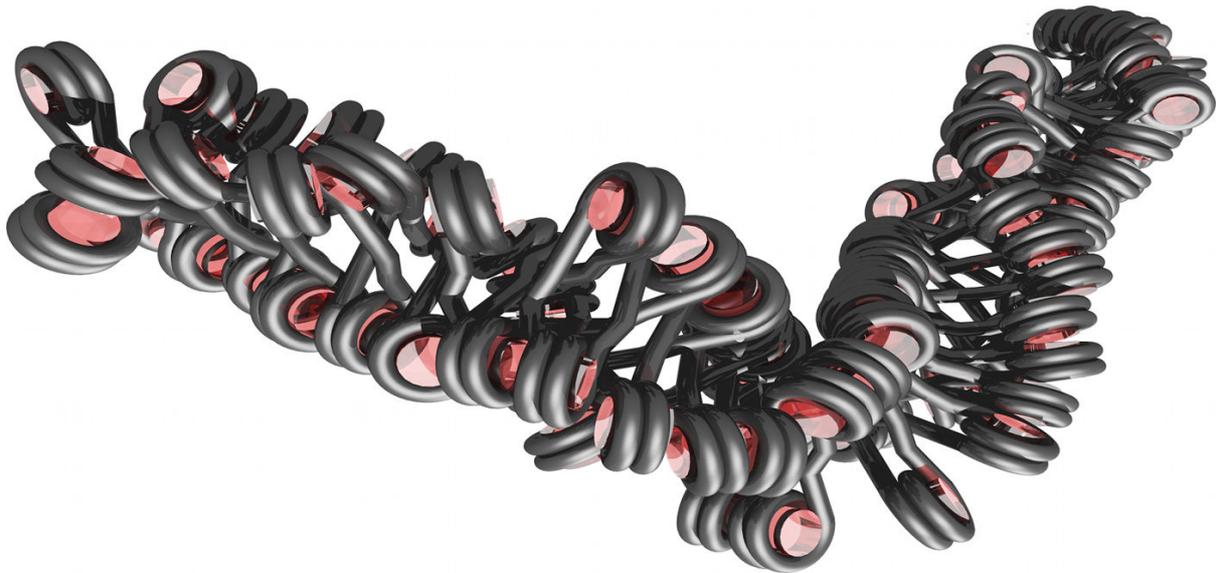


Abbildung 1: Visualisierung einer simulierten Chromatinfaser. Die DNA (grau) windet sich etwa 1,67 mal um ein Oktamer aus Histonproteinen (rot). Elastische Eigenschaften, elektrostatische Abstoßung der DNA und Wechselwirkungen zwischen den Nucleosomen werden im Modell berücksichtigt. Darüber hinaus können auch externe Einflüsse, wie Wechselwirkungen mit Oberflächen oder Zug- und Torsionskräfte in die Simulation mit einbezogen werden, um experimentelle Methoden wie Rasterkraftmikroskopie oder Manipulationen mit Mikropinzetten nachstellen zu können. Durch die verwendeten Monte-Carlo-Protokolle werden thermodynamische Fluktuationen simuliert und repräsentative Ensembles von möglichen Chromatinstrukturen erzeugt.

den Öffnungswinkel der ein- und auslaufenden DNA) genau einstellbar. Außerdem fließen in das Modell experimentell bestimmbare Parameter wie elastische Konstanten mit ein. Zur Simulation des Chromatinmodells werden Monte-Carlo-Verfahren angewendet. Insbesondere wird das sogenannte Replica-Exchange-Simulationsverfahren verwendet, um bei höheren Wechselwirkungsstärken zwischen den Nucleosomen ein Verharren in lokalen Energieminima zu vermeiden. Dabei wird ein Aufheizen und Abkühlen der Faser simuliert, wodurch diese lokalen Minima überwunden werden können[2]. Mit diesem Modell konnten wesentliche experimentelle Eigenschaften der Chromatinfaser erklärt werden [3].

Von großem wissenschaftlichen Interesse sind die Effekte in großen Chromatinfasern, da hier übergeordnete Strukturen auftreten, die beispielsweise durch Rückfaltung einzelner Faserabschnitte entstehen. Durch Weiterentwicklung des Modells und das Fortschreiten der Rechenleistung ist es möglich, immer größere Systeme zu berechnen, um weiter in diese Bereiche der höheren Chromatinorganisation vorzudringen.

Mehr zum Thema

1. R. Ettig, N. Kepper, R. Stehr, G. Wedemann, K. Rippe. Dissecting DNA-histone interactions in the nucleosome by molecular dynamics of DNA unwrapping. submitted 2011.
2. R. Stehr, N. Kepper, K. Rippe, G. Wedemann. The effect of the internucleosomal interaction on the folding of the chromatin fiber. *Biophys. J.*, 95(8), 3677–3691, 2008.
3. R. Stehr, R. Schöpflin, R. Ettig, N. Kepper, K. Rippe, G. Wedemann: Exploring the conformational space of chromatin fibers and their stability by numerical dynamic phase diagrams. *Biophys. J.*, 98(6), 1028–1037, 2010.

Förderung

Projekt ERASysBio+, „Systembiologische Bestimmung epigenomischer Struktur–Funktionsbeziehung“

Methodenentwicklung

Kurze Wege in großen Systemen

MR-Search: Ein Framework für massiv-parallele Graphensuche mit MapReduce

A. Reinefeld, T. Schütt, R. Maier, Humboldt-Universität zu Berlin, Zuse-Institut Berlin

Kurzgefasst

- Graphenalgorithmen lassen sich aufgrund von Lastverteilungsproblemen und der irregulären Graphenstruktur nur schwer parallelisieren.
- Entscheidungsprobleme, die auf Graphen beruhen, werden immer komplexer. Eine effiziente Parallelisierung ist daher von großer ökonomischer Bedeutung.
- Wir haben auf dem HLRN-II das MPI/OpenMP-Framework "MR-Search" für parallele Graphensuchalgorithmen implementiert.
- MR-Search unterstützt Breitensuche, Bestensuche, iterative Suche und Branch-and-Bound. Es ist effizient, skalierbar und ausfalltolerant.
- Eine Out-of-Core-Variante kann zur Lösung sehr großer Probleme eingesetzt werden, die nicht in den Hauptspeicher passen.

Algorithmen auf Graphen sind von enormer ökonomischer Bedeutung. Viele Entscheidungsprobleme der Kombinatorischen Optimierung und Künstlichen Intelligenz lassen sich auf Graphen abbilden und mit effizienten Algorithmen lösen. Im Vergleich zu den regulären, gitterbasierten Algorithmen der numerischen Mathematik sind Graphenalgorithmen allerdings viel schwieriger zu parallelisieren, weil während der Knotenexpansion Schrankenwerte berechnet und an nebenläufige Prozesse geschickt werden müssen, um irrelevante Teile des Graphen von der Lösungssuche auszuschließen. Da die in der Praxis auftretenden Graphen häufig sehr groß sind – manchmal sogar so groß, dass sie nicht mehr in den Hauptspeicher passen – ist eine Parallelisierung für Systeme mit verteiltem Speicher besonders wichtig.

Die derzeit existierenden Lösungen bauen auf sequentiellen Algorithmen auf, indem sie die im Knotenexpansionsprozess berechneten Schrankenwerte mittels MPI-Nachrichtenübertragung zwischen den parallelen Prozessen austauschen. Die Lastverteilung ist allerdings eine große Herausforderung und lässt sich systembedingt nicht vollständig lösen, so dass derartige Algorithmen nur auf einigen hundert bis tausend Prozessoren laufen.

Wir haben das MapReduce-Programmiermodell [1] zur Lösung sehr großer Graphenprobleme eingesetzt und damit optimale Lösungspfade in

Suchräumen von bis zu 10^{24} Knoten auf dem HLRN-II berechnet [3]. MapReduce verarbeitet key/value-Paare, die in unserem Fall aus Knoten (key) und deren Attributen (value) bestehen.

Abbildung 1 veranschaulicht die drei Schritte der parallelen Graphensuche: Im ersten Schritt, dem *map*, expandiert jeder parallele Prozess die ihm zugeordneten Knoten, indem er seine Nachfolger erzeugt. Im zweiten Schritt, dem *shuffle*, werden die verteilt erzeugten Knoten mit einer parallelen globalen Gruppierung in sogenannte *buckets* sortiert und im dritten Schritt, dem *reduce*, werden irrelevante Knoten (und damit ganze Teilgraphen) aus dem Suchraum eliminiert. Dies geschieht solange, bis ein Lösungsknoten gefunden ist. Bei Verwendung einer zulässigen (nicht-überschätzenden) Heuristik ist der gefundene Lösungsknoten optimal.

Mit MapReduce können sowohl einfache Breitensuchverfahren [2] als auch komplexere heuristische Suchen (A^* , IDA^* , Branch-and-Bound) [3] effizient auf parallelen und verteilten Systemen ausgeführt werden. Der parallele Knoten-Expansionsprozess ist feingranular und asynchron, was eine gute Lastverteilung und hohe Skalierbarkeit garantiert. Bei Rechnerausfällen werden die entsprechenden Prozesse automatisch nachgestartet und die erzeugten Datensätze (key/value-Paare) mit den bereits vorhandenen Daten zusammengeführt.

MR-Search

Um die Vorteile von MapReduce für einen weiten Anwendungsbereich zu öffnen, haben wir auf dem HLRN-II das MR-Search-Framework entwickelt und darauf basierend eine Bibliothek mit einigen Graphensuchmethoden (Breitensuche, Kürzeste-Wege-Suche) für unterschiedliche Anwendungen implementiert. Auf nachrichtenbasierten Systemen mit verteiltem Speicher, wie der SGI ICE des HLRN-II, läuft die Software mit MPI und auf Systemen mit gemeinsamem Hauptspeicher, wie der SGI UltraViolett des HLRN-II, läuft sie mit OpenMP. Zusätzlich existiert eine CUDA-Version für Graphikprozessoren.

Zur Lösung sehr großer Probleme, deren Graphen nicht in den Hauptspeicher passen, können die Daten auf Festplatten ausgelagert werden. Für den Anwendungsprogrammierer ist die Parallelisierungs- und Speicherstrategie transparent; er muss lediglich die anwendungsspezifischen Operationen der Map- und Reduce-

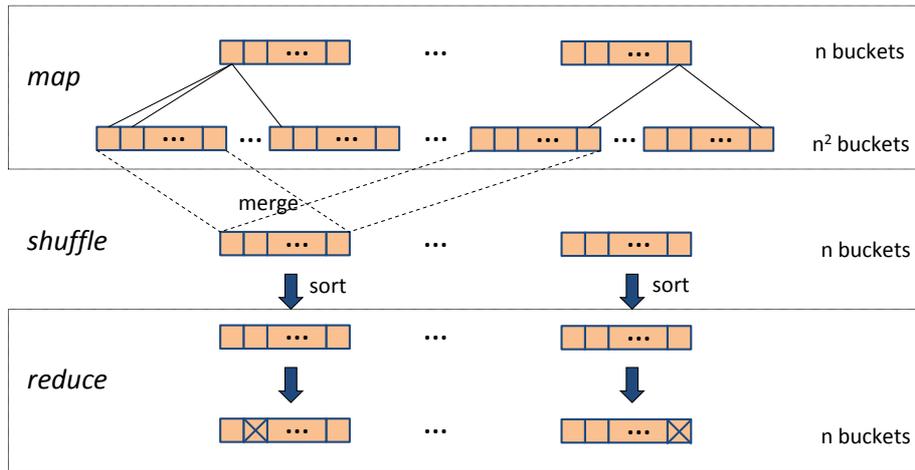
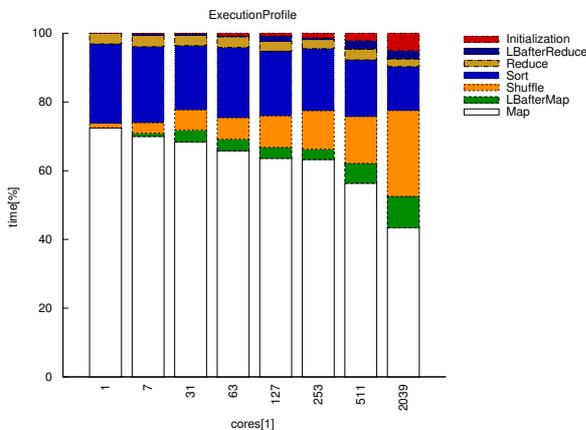


Abbildung 1: Funktionsweise des parallelen MapReduce-Frameworks MR-Search.

Funktionen programmieren. Dadurch ist der Code sehr kompakt und leichter zu debuggen, als der sonst notwendige MPI-Programmcode mit expliziten Kommunikationsaufrufen.

Mit MR-Search haben wir Graphenprobleme mit 10^{13} Knoten vollständig gelöst [2] und die dabei entstandenen 80 TeraByte Daten zur späteren Analyse im SAN und Archivspeicher des HLRN-II gespeichert. Für noch größere Suchräume mit bis zu 10^{24} Knoten haben wir optimale Lösungen von zufällig ausgewählten Probleminstanzen mit MR-Search gelöst [4].

Wegen der vielen Prozessorkerne auf dem HLRN-II ist die Programm-Ausführungsgeschwindigkeit nicht durch die CPU-Leistung sondern durch die Ein/Ausgaberate und die aggregierte Bandbreite des parallelen Lustre-Dateisystems limitiert. Während einer der ersten Läufe, die noch in der Abnahmephase des SGI ICE2-Systems stattfanden, konnte mithilfe unserer Anwendung ein I/O-Problem des Lustre-Dateisystems entdeckt und behoben werden [2].



Die obige Abbildung zeigt, wie sich der pro-

zentuale Anteil der einzelnen Abschnitte eines MapReduce-Jobs bei steigender Prozessoranzahl ändert. Lastbalancierungsprobleme spielen in diesem Beispiel nur eine untergeordnete Rolle ('LB after Map' und 'LB after Reduce'), während der Anteil der Netzwerkkommunikation überproportional ansteigt ('shuffle'). Dies zeigt, dass – neben einer effizienten Implementation – die Ausgewogenheit eines Hochleistungsrechners in Bezug auf Prozessorleistung versus Kommunikationsleistung eine große Rolle spielt.

Mehr zum Thema

1. J. Dean, S. Ghemawat. MapReduce: Simplified data processing on large clusters. OSDI, 2004.
2. A. Reinefeld, T. Schütt. Out-of-core parallel heuristic search with MapReduce. HPCS 2009, Kingston, Ontario, Canada. Springer LNCS 5976, S. 323-336.
3. A. Reinefeld, T. Schütt, R. Maier. Very large pattern databases for heuristic search. In: Proc. of the 19th ACM Int. Symposium on High Performance Distributed Computing (HPDC 2010), Chicago, ACM, S. 803-809.
4. T. Schütt, A. Reinefeld, R. Maier. MR-Search: Massively parallel heuristic search. Concurrency and Computation: Practice and Experience, 2011.

Förderung

Europäische Union, Projekt Contrail

Schnell und energiesparend – Neue Technologien für das HPC

Effiziente Nutzung heterogener Manycore-Systeme

A. Reinefeld, Th. Steinke, K. Peter, S. Borchert,
Humboldt-Universität zu Berlin, Zuse-Institut Berlin

Kurzgefasst

- Um den Einsatz heterogener Systemarchitekturen im Hochleistungsrechnen vorzubereiten, haben wir Kernels wichtiger HPC-Anwendungen auf heterogene Systeme portiert und evaluiert.
- Schwerpunktmäßig haben wir folgende Applikationen implementiert: Mehrteilchendynamik, Smith-Waterman, Reed-Solomon Encoding
- Der Aufwand zur Entwicklung effizienter Codes ist für alle heterogenen Plattformen noch sehr hoch. Das gilt insbesondere für FPGAs.
- Als Mitglied der internationalen *OpenAccelerator*- und *OpenFPGA*-Organisationen treiben wir daher die Standardisierung von Programmierschnittstellen und die Entwicklung generischer Programmierumgebungen voran.

Heterogene Manycore-Systeme eröffnen alternative Wege, um eine hohe Rechenleistung bei moderatem Stromverbrauch und Kühlaufwand zu erzielen. Heutige Beispiele dafür sind GPGPUs, Tensilica und Tiler CPUs oder auch FPGAs. Dazu kommen in Kürze Manycore-Prozessoren von AMD (Fusion) und Intel (MIC/Knights Corner).

Wir evaluieren Manycore-Technologien hinsichtlich ihrer Leistungsfähigkeit, Energieeffizienz und Produktivität. Beginnend im Jahr 2006 mit der Cray XD1 als erster FPGA-Plattform [5] haben wir eine Reihe von heterogenen Systemen mit SIMD-Prozessoren (ClearSpeed), GPGPUs und Cell Broadband Engine untersucht.

Die jeweiligen Charakteristika dieser Plattformen ermitteln wir, indem wir kompakte Anwendungen und typische Kernel für die Manycore-Systeme parallelisieren und optimieren. Unser Interesse erstreckt sich dabei von rechenintensiven Algorithmen wie *Mehrteilchendynamik* (s. Abb. oben) oder Kernel zur *numerischen Quadratur* für Elektronen-Scattering-Simulation [2] bis hin zu datenintensiven Algorithmen der *Bioinformatik* [3] und Untersuchungen zu Aspekten der *Fehlertoleranz* in massiv-parallelen Speicherszenarien.

Für die Anwendungsklasse "Mehrteilchendynamik" haben wir in Kooperation mit Partnern des OpenFPGA-Konsortiums eine portablen Anwenderschnittstelle für heterogene Plattformen entwickelt [4].

Da Aspekte der Fehlertoleranz in künftigen

HPC-Konfigurationen eine Rolle spielen, haben wir die Leistungsfähigkeit und Effizienz von Manycore-Prozessorplattformen für die Datenkodierung nach dem *Cauchy Reed-Solomon*-Verfahren untersucht [1] (s. Abb. unten).

Als Mitbegründer der *OpenAccelerator*-Initiative und des *OpenFPGA*-Konsortiums bringen wir uns in die Etablierung von Standards für heterogenes Computing ein. Unser Hauptinteresse liegt hierbei in der Entwicklung einheitlicher Programmierumgebungen und Standards, um heterogene Manycore-Systeme für Anwendungsentwickler leichter zugänglich zu machen.

Mehr zum Thema

1. T. Steinke, K. Peter, S. Borchert: Efficiency Considerations of Cauchy Reed-Solomon Implementations on Accelerator and Multi-Core Platforms. *J. Parallel Distributed Comp., Special Issue*, 2011
2. C. J. Gillan, T. Steinke, J. Bock, S. Borchert, I. Spence, N. S. Scott: Programming challenges for the implementation of numerical quadrature in atomic physics on FPGA and GPU accelerators. *Frontiers of GPU, Multi-core and Many-core Systems (FGMMS)*, 2010
3. P. May, G.W. Klau, M. Bauer, T. Steinke: Accelerated microRNA-Precursor Detection Using the Smith-Waterman Algorithm on FPGAs. In: *GCCB 2006*, p. 19-32, 2007
4. E. Stahlberg, D. Popig, D. Ryle, M. Babst, M. Taher, K. Anderson, T. Steinke: Molecular Simulations with Hardware Accelerators: A Portable Interface Definition for FPGA Supported Acceleration, *RSSI'07, NCSA*, 2007
5. T. Steinke, A. Reinefeld, T. Schütt: Experiences with High-Level Programming of FPGAs on Cray XD1. *Proceedings of the Cray User's Group Conference, Lugano*, 2006

Förderung

OpenFPGA Inc., Mitronics AB, Bundesministerium für Bildung und Forschung

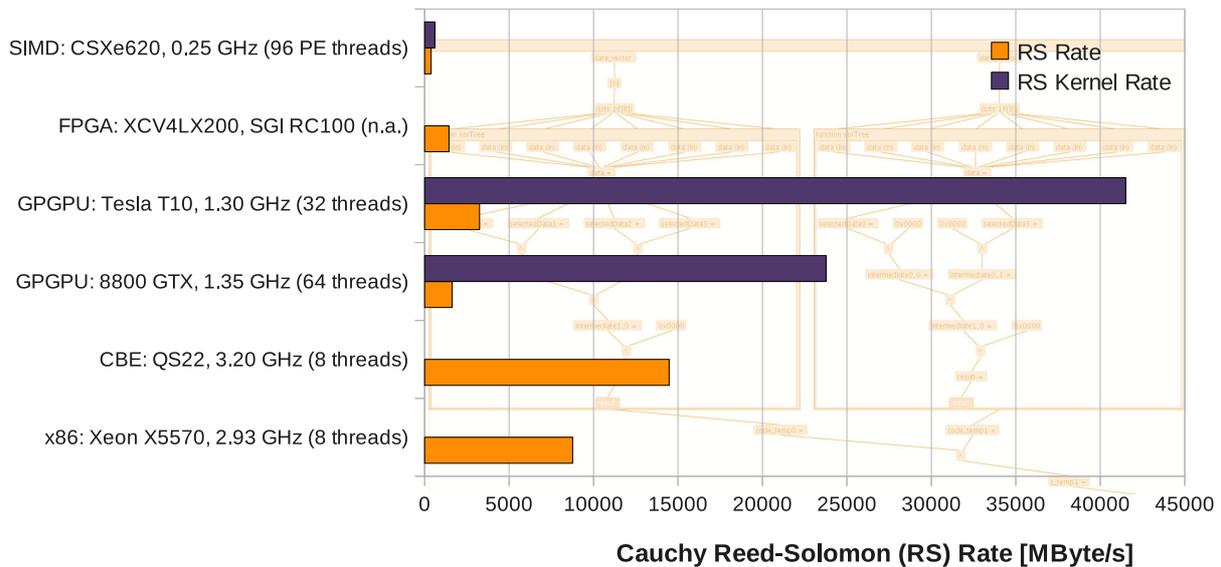
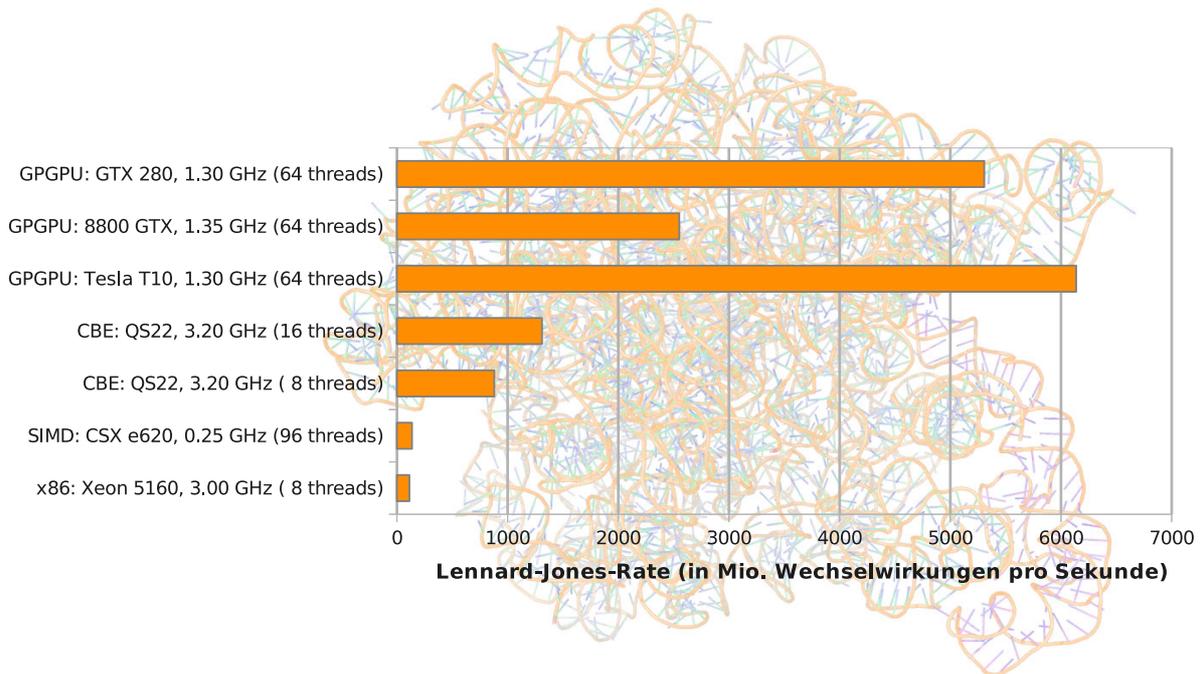


Abbildung 1: Oben: Mehrteilchendynamik – Vergleich der Rechenleistung verschiedener heterogener Plattformen bei der Simulation einer Mehrteilchendynamik mittels Verlet-Integration (in 32 bit-Genauigkeit). Verglichen wird die erreichte Anzahl der berechneten atomaren, nicht-bindenden Wechselwirkungen pro Zeit (Lennard-Jones-Rate). Diese Rate ist neben der Berechnung der Coulomb-Interaktionen bestimmend für die Gesamtrechenleistung einer Mehrteilchendynamik. GPGPU-Plattformen profitieren hier von der besseren Balance von Rechenleistung und Bandbreite zum lokalen Speicher (On-Board), wenn die Daten darin komplett vorgehalten werden können. Der CellBE-Prozessor, gemessen auf einer IBM QS22-Plattform (s. a. IBM RoadRunner) und die älteren ClearSpeed-Prozessoren (CSX e620) folgen im Leistungsvergleich. Die Leistung der x86-CPU wurde auf einem (mittlerweile älteren) Dual-Socket-Knoten mit FSB-Anbindung an den Hauptspeicher gemessen.

Unten: Datenkodierung/Fehlertoleranz – Durchsatzraten für das Cauchy Reed-Solomon-Verfahren. Durch die hardware-nahe Implementierung hängt der erzielbare Durchsatz hauptsächlich von der effektiven Speicherbandbreite ab. Sowohl heterogene Systeme mit CellBE oder FPGA als auch aktuelle x86-CPU mit Quickpath-Interface zeigen die besten Durchsatzraten. Hinsichtlich der Durchsatzleistung zeigen GPGPU-Plattformen hier den Nachteil ihrer heutigen Anbindung über ein Bus (PCI-Express) an den Host. Von der effizienten Implementierung und flexiblen Erzeugung der Redundanzdaten können komplexe Datenspeichersysteme und hochskalierende parallele Anwendungen profitieren.

Pushing the frontier of solvability of real-world optimization problems Distributed branch-and-cut methods to solve previously intractable optimization instances

M. Grötschel, Y. Shinano, Technische Universität Berlin, Zuse Institute Berlin

Abstract

- Optimization refers to finding the best solution with respect to objectives and constraints.
- Mathematical optimization has proved that it can solve instances which are so big that they seem to be unsolveable.
- Big means that several million variables and constraints can be handled efficiently.
- In business terms, that refers to the possibility, for example, to solve problems in a finer decision granularity.
- We solved two open instances of the problem library MIPLIB2003 [1] which is a collection of difficult real-world optimization problem.

Branch-and-bound is a very general and widely used method to solve discrete optimization problems. Problem classes which can be solved (besides others) using this method are the class of mixed integer programs (MIP), the class of mixed integer nonlinear programs (MINLP), and the class of constraint integer programs (CIP). The challenge of these problems is to find one feasible assignment to a set of decision variables which yields a minimum/maximum value with respect to a given objective function. The feasibility region for these problems is described by side constraints which differ in their nature depending on the problem class. In case of MIPs, for example, the side constraints are linear inequalities. In addition some of the variables are only allowed to take integer values, which makes these problems in general \mathcal{NP} -hard.

The idea of *branching* is to successively subdivide the given problem instance into smaller subproblems until the individual subproblems are easy to solve. The best solution found in all these subproblems yields a *global optimum*. During the course of the algorithm, a *branching tree* is generated in which each node represents one of the subproblems. Usually, the vast majority of suboptimal nodes can be pruned by *bounding* at an early stage. Therefore, mathematically sophisticated techniques are used to dramatically reduce the size of the branching tree and avoid a brute

force enumeration. Typically, problems with ten thousand variables and constraints (i.e., approximately $2^{10\,000}$ potential solutions) can be solved by investigating a few hundred thousand branch-and-bound nodes.

In the first step we restrict ourselves to MIP instances, although our approach is much more general and can also handle MINLPs, CIPs, satisfiability testing (SAT) problems, pseudo-Boolean problems, and many more problem classes.

State-of-the-art solvers for the problem class MIP are based on a *branch-and-cut* procedure, a mathematically involved variant of branch-and-bound, in which the linear programming (LP) relaxation plays an important role. This relaxation is achieved by discarding the integrality conditions. It can be solved in polynomial time. The optimal solution value of the LP relaxation provides a *dual bound* for the original problem. This bound together with the *primal bound*, the solution value of the best known solution, can be used for example to prune parts of the search tree or to *prove (global) optimality* in case the dual bound is equal to the primal bound.

Mixed integer programming solvers have made tremendous progress in the last decades. For instance, the average algorithmic speedup in LP solutions over the last 15 years is at least a factor of 1000; another factor of 1000 comes from the hardware speedup, see Bixby [2]. For integer programming even more impressive advances have been achieved, see Bixby et al. [3]. The solvers have also become numerically much more stable.

One reason for this progress is the availability of real-world problem instances which are provided by different libraries. The most important one is the MIPLIB³. Since its introduction in 1992, the MIPLIB has become a standard test set used to compare the performance of mixed integer optimizers. The MIPLIB contains a collection of difficult real-world instances mostly from industrial applications. Its availability has provided an important stimulus for researchers in this area. The current version, MIPLIB2003, still contains six instances which resisted all attempts of the research community to solve them to proven optimality.

Within this project we focus on solving real-world instances which have up to now been intractable due to insufficient computing power. Optimal solutions and the behavior of the solver (which is taped

³<http://miplib.zib.de>

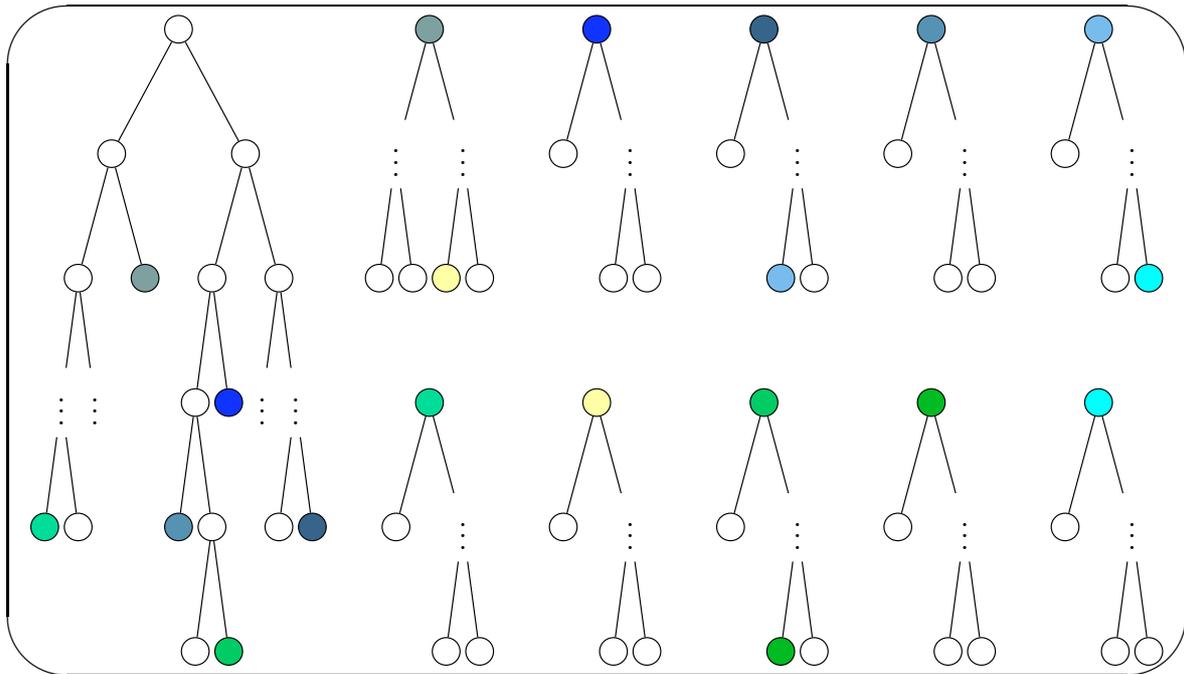


Figure 1: The picture illustrates a branch-and-bound search tree and shows the possibility of distributing it. Each root node (except the white one) corresponds to a leaf in one of the other search trees. This is indicated by the colors. Search nodes with the same color are equivalent problems. The subproblems corresponding to colored leaves are distributed to a different processor for solving. This picture already indicates that by using such a distributed approach much more search nodes can be processed. This results in the fact that big instances can be solved within a reasonable time frame.

via log files) for these instances will give more insight and help to understand the structure of the solved problems in much more detail.

The results of this project will lead to the development of new methods to solve similar problems more efficiently. The achievements within this project will stimulate research in that research area. It will give the proof that a computational environment such as the HLRN is efficiently usable to solve real-world instances, which is not possible with standard desktops or PC clusters. This will be recognized by researchers and industry and will lead to a demand for such environments.

Using our implementation of a parallel mixed integer programming solver, called ParaSCIP [4], we were able to solve two open instances of the MIP-LIB, namely, *ds* (a problem from public transport service planning) and *stp3d* (a VLSI routing problem) to optimality, which have 67 732 and 204 880 decision variables, respectively.

It took approximately 86 hours to solve *ds* and 114 hours to solve *stp3d*, using up to 2048 cores. The optimal values, are 93.52 for *ds* and 493.71965 for *stp3d*. This means we found a feasible solution with the corresponding values and proved that there exists no feasible solution with a smaller

value (both instances have an objective function which has to be minimized).

More Information

1. T. Achterberg, T. Koch, and A. Martin, *MIP-LIB2003*, Operations Research Letters, 34:4 (2006) 361–372.
2. R. E. Bixby, *Solving Real-World Linear Programs: A Decade and More of Progress*, Operations. Research, 50 (2002) 3–15.
3. R. E. Bixby, M. Fenelon, Z. Gu, E. Rothberg, and R. Wunderling, *MIP: Theory and Practice – Closing the Gap*, In: System Modelling and Optimization: Methods, Theory and Applications, (2000).
4. Y. Shinano, T. Achterberg, T. Berthold, S. Heinz, and T. Koch, *ParaSCIP – a parallel extension of SCIP*, ZIB-Report 10-27, (2010) Zuse Institute Berlin.

Funding

IBM; Zuse Institute Berlin; The project is funded at the HLRN with up to 7680 CPU cores over a time horizon of more than 72 hours.

Datenassimilation

Hochskalierende Datenassimilationsverfahren zur Kombination von numerischen Modellen mit Beobachtungsdaten

W. Hiller, L. Nerger, Kompetenzzentrum für Höchstleistungsrechnen Bremen (BremHLR), Universität Bremen und Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung, Bremerhaven

Kurzgefasst

- Mit PDAF wird eine open-source Software zur vereinfachten Implementierung von Datenassimilations-Systemen entwickelt.
- Eine hochskalierende Parallelisierung des Datenassimilations-Systems erlaubt die effiziente Nutzung von Höchstleistungsrechnern.
- PDAF stellt optimierten und parallelisierten ensemble-basierten Filteralgorithmen bereit.

Numerische Modelle werden verwendet um unterschiedlichste Sachverhalte zu modellieren. In den Umweltwissenschaften werden Modelle verwendet um z.B. Wettervorhersagen zu berechnen oder auch um Strömungen im Ozean zu simulieren. Keines dieser Modelle ist wirklich exakt. D.h. alle Modellsimulationen weisen Unterschiede zur Realität auf. Aus diesem Grund kann z.B. eine realistische Wettervorhersage nur für einen begrenzten Zeitraum berechnet werden. Die Unterschiede werden z.B. durch die Abbildung der Realität mit einem Computerprogramm erzeugt. Dies verlangt unter anderem, dass ein System wie die Atmosphäre durch ein Gitter von Punkten beschrieben wird (die sogenannte Diskretisierung) und Größen, z.B. die Temperatur, nur an diesen Gitterpunkten verfügbar sind. Ausserdem ist der augenblickliche Zustand - wie Temperaturverteilung, Luftdruck, Windgeschwindigkeit - nicht vollständig bekannt, so dass eine Simulation die vom aktuellen Zustand startet nicht exakt sein kann.

Neben den Modellen gibt es noch Messungen der unterschiedlichen Größen. Diese sind allerdings oftmals nur an wenigen Messpunkten bekannt. Insbesondere für den Ozean gibt es nur sehr wenige Beobachtungen. Zum einen gibt es Fernerkundungsdaten von Satelliten, die allerdings nur die Oberfläche des Ozeans widerspiegeln. Von Schiffen und anderen Vorrichtungen wie Bojen gibt es noch Messungen die direkt im Ozean vorgenommen werden und auch Daten aus der Tiefe liefern. Diese Daten sind aber nur an sehr wenigen Punkten im Ozean verfügbar und reichen bei weitem nicht aus um den Ozean vollständig zu beschreiben. Abgesehen von der unvollständigen Be-

obachtung weisen die Messungen Messfehler auf, so daß auch diese nicht exakt sind.

Den größten Informationsgewinn erhält man, wenn man eine Modellsimulation direkt mit den Beobachtungen kombiniert. Datenassimilationsmethoden erlauben diese Kombination und können zu Modellsimulationen führen, die genauer sind als jeweils die Beobachtungsdaten und die reine Modellsimulation ohne Datenassimilation. Die Datenassimilation wird z.B. für die Wettervorhersage eingesetzt um den aktuellen Zustand der Atmosphäre optimal zu schätzen und auf dieser Basis eine Vorhersage berechnen zu können. Ähnliches kann bei der Vorhersage des Wasserstands durchgeführt werden, wie sie bei Sturmfluten eingesetzt wird.

Bei der Datenassimilation müssen Rechnungen durchgeführt werden die üblicherweise um ein vielfaches aufwändiger sind als normale Modellsimulationen. Einige der Methoden, die heutzutage die besten Ergebnisse liefern, verwenden ein Ensemble von Modellvorhersagen um den Fehler der Simulation abzuschätzen. In diesem Fall werden statt einer Modellsimulation zwischen 8 und 100 Modellsimulationen berechnet um die Unsicherheit der Simulation abzuschätzen. Diese Information wird dann verwendet um eine optimale Kombination der Modellfelder mit den Messungen zu berechnen.

Während Simulationen in diesem Umfang sehr aufwändig sind, lassen sie sich sehr gut auf einem Parallelcomputer durchführen. Dieses ist darauf zurückzuführen, dass die Ensemble-Rechnungen praktisch unabhängig voneinander durchgeführt werden können und nur für die Kombination mit den Messungen zusammengeführt werden müssen.

Um die Implementierung von Datenassimilations-Systemen zu vereinfachen und auch die Parallelität der Ensemble-Simulationen optimal zu nutzen, wurde am Alfred-Wegener-Institut die Datenassimilationsumgebung PDAF (Parallel Data Assimilation Framework, siehe [1]) entwickelt. PDAF ist, wie viele der Modelle mit denen es genutzt wird, in Fortran implementiert und nutzt MPI (Message Passing Interface) für die Parallelisierung. In PDAF sind wichtigsten der heutigen ensemble-basierten Datenassimilationsalgorithmen, in optimierter und parallelisierter Form implementiert. PDAF läßt sich mit einem bestehenden Modellcode verbinden wobei nur sehr wenige Änderungen im Quellcode des Modells erforderlich sind. Hiermit erhält man ein vollständig parallelisiertes Datenassimilations-system. PDAF ist als Open-Source Software frei verfügbar und wird im Rahmen wissenschaftlicher

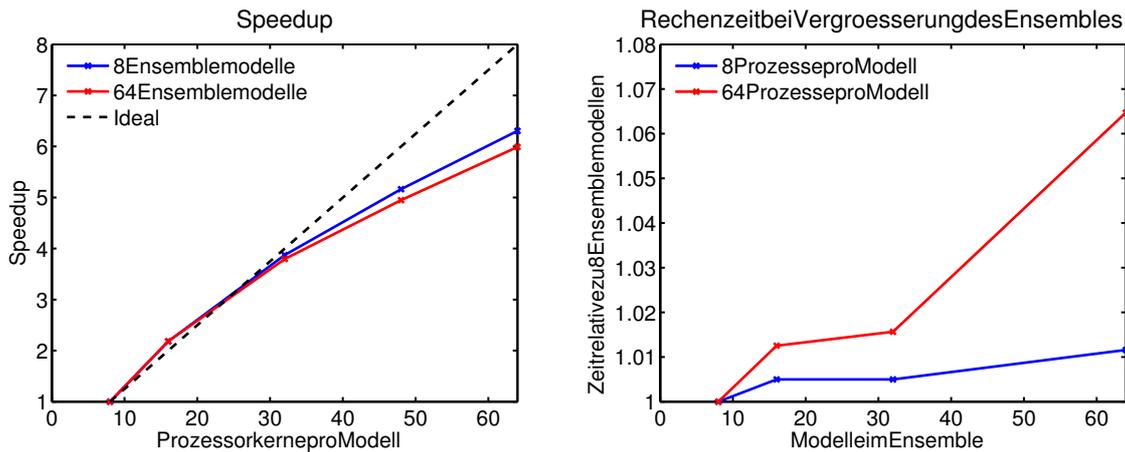


Abbildung 1: Links: Geschwindigkeitserhöhung ("Speedup") des Datenassimilationssystems, wenn die Anzahl Prozessorkerne pro Ensemble-Modell von 8 Kernen aus erhöht wird. Die Gesamtanzahl der Prozessorkerne wird bei einem Ensemble von 64 Modellen zwischen 512 und 4096 variiert. Hierbei wird eine Geschwindigkeitserhöhung um einen Faktor sechs erreicht. Rechts: Rechenzeit bei Vergrößerung des Ensembles zwischen 8 und 64 Modellen. Die Rechenzeit vergrößert sich hierbei um maximal 6,5%.

Projekte weiter entwickelt. Hierbei werden sowohl neue Algorithmen entwickelt als auch die Parallelisierung weiter optimiert.

Für den HLRN wird ein Anwendungsprojekt vorbereitet bei dem Datenassimilation mit dem Ozeanmodell FEOM des AWI [2] betrieben werden soll, dass auf finiten Elementen basiert. Hierzu wurde ein Datenassimilations-System implementiert bei dem FEOM mit PDAF kombiniert wurde. Auf dem HLRN-II System wurde die Skalierung dieses Datenassimilations-Systems getestet.

Abbildung 1 zeigt auf der linken Seite um wie viel das Assimilationsprogramm schneller wird, wenn die Anzahl Prozessorkerne bei gleichbleibender Ensemblegröße variiert wurde (der sogenannte "Speedup"). Die gestrichelte Linie zeigt den optimalen Verlauf an, bei dem eine Verdoppelung der Prozessorkerne eine Halbierung der Rechenzeit bewirkt. Ein solches optimales Verhalten ist zwischen 8 und 32 Prozessorkernen pro Ensemblemodell zu beobachten. Werden mit 64 Prozessorkernen 8-mal so viele Prozessorkerne verwendet, wird eine Reduzierung der Rechenzeit auf ein sechstel erreicht. Diese Verhalten ist vor allem auf die Parallelisierung des Ozeanmodells zurückzuführen, die durch PDAF nicht verändert wird. Die Skalierung jedes einzelnen Modells ist durch die verwendete Gittergröße begrenzt. Das Modellgitter war in dem verwendeten Fall verhältnismäßig grob. Bei einer höher aufgelösten Konfiguration ist ein größerer Speedup zu erwarten.

Die rechte Seite von Abbildung 1 zeigt das Verhalten der Rechenzeit, wenn die Größe des En-

sembles bei konstanter Anzahl von Prozessorkernen pro Ensemblemitglied variiert wurde. Die Veränderung des Ensembles führt nur zu einem marginalen Anstieg der Rechenzeit um 6,5% wenn das Ensemble von 8 auf 64 Modellintegrationen vergrößert wird. Wenn jedes Modell des Ensembles 64 Prozessorkerne nutzt, wird hierbei die Anzahl der Prozessorkerne von 512 auf 4096 vergrößert.

Die Datenassimilation zeigt bereits mit der getesteten noch recht kleinen Konfiguration von FEOM eine sehr gute Skalierung auf dem HLRN-II System bis zu der getesteten Anzahl von 4096. Dieses ist auch die derzeitige Obergrenze für parallele Rechnungen beim HLRN. Höher aufgelöste Modellkonfigurationen werden in Zukunft weit mehr Prozessoren nutzen können.

Mehr zum Thema

1. PDAF Website: <http://pdaf.awi.de>
2. Wang, Q., S. Danilov, J. Schröter (2008). Comparison of overflow simulations on different vertical grids using the Finite Element Ocean circulation Model, *Ocean Modelling*, 20(4), 313-335., doi:10.1016/j.ocemod.2007.10.005 .

Förderung

AWI PACES Forschungsprogramm

FESOM - Großskalige Ozeanmodellierung mit finiten Elementen Skalierbarkeit globaler Simulationen zur Bestimmung der weltweiten Zirkulation

W. Hiller, K. Fieg, S. Harig, J. Schröter, S. Danilov, Zentrum für Technomathematik, Universität Bremen und Alfred-Wegener-Institut für Polar- und Meeresforschung, Bremerhaven

Kurzgefasst

- Strömungsmodelle auf Grundlage von finiten Elementen in unstrukturierten Gittern erlauben eine realistische Wiedergabe der unregelmäßigen Geometrie der Weltozeane
- Diese Methode erlaubt die Durchführung globaler Simulationen mit hoher Auflösung in einem kleinen Teilgebiet ohne die Verwendung von Nesting-Verfahren
- Wesentlicher Anteil der Rechenzeit entfällt auf die Lösung großer dünn besetzter Gleichungssysteme
- Effiziente Implementierung der Lösungsmethoden und optimale Nutzung der Rechnerarchitektur am HLRN sind wesentlich für die Durchführung globaler Modellstudien

Im Vergleich zur Atmosphäre gibt es in den Welt-ozeanen nur relativ wenige Messungen. Zur Interpretation dieser Daten und zur Bestimmung der weltweiten Ozeanzirkulation sind numerische Modelle daher unverzichtbar. Die meisten Ozeanmodelle basieren auf Differenzenverfahren, die große Einschränkungen an die erlaubte Diskretisierung stellen. Im Gegensatz dazu erlaubt die numerische Methode der Finiten Elemente unstrukturierte Diskretisierungen und ermöglicht so eine realistische Wiedergabe der unregelmäßigen Struktur von Küstenlinien und Bathymetrie. Ein Nachteil dieser Verfahren ist der hohe numerische Aufwand, da in jedem Zeitschritt große, dünn besetzte Gleichungssysteme gelöst werden müssen.

Das Modell **FESOM** (**F**inite **E**lement **S**ea **I**ce **O**cean **M**odel) besteht aus dem Ozeanmodell **FEOM** und einem daran gekoppelten Eismodell. Beide Komponenten operieren auf dem selben horizontalen Gitter. Das Modell wird seit mehreren Jahren am AWI entwickelt. Das zugrunde liegende Gitter besteht in der Horizontalen aus einer Triangulierung des Modellgebietes. In der Vertikalen ist die Verwendung von Prismen und Tetraedern möglich. Mehr Einzelheiten zum Modell und ein Vergleich von verschiedenen Diskretisierungen sind in [1] und [2] enthalten.

Nachdem das Modell in Modellstudien mit idealisierten Geometrien getestet und validiert wur-

de ist es notwendig möglichst realistische Simulationen bis zur globalen Skala durchzuführen und mit bestehenden Datensätzen sowie mit analogen Studien unter Verwendung bereits etablierter Modelle zu vergleichen. Im rechten Teil der Abbildung 1 ist ein globales Modellgitter dargestellt. Dieses Gitter zeigt die oben erwähnten Vorteile des unstrukturierten Ansatzes, die mittlere Auflösung ist relativ grob, dennoch wurde der für die Tiefenwasserbildung wesentliche Bereich entlang der Schwelle zwischen Grönland, Island und Schottland hoch aufgelöst um etwa den Transport durch die Dänemarkstraße besser wiederzugeben.

Im **CORE** Projekt (**C**o-ordinated **O**cean-Ice **R**eference **E**xperiments, siehe [3]), einer Modellvergleichstudie für gekoppelte Eis-Ozeanmodelle müssen in einem ähnlichen Gitter 500 Jahre simuliert werden. Dazu werden Datensätze vorgegeben, die den Einfluss der Atmosphäre beschreiben, das Modell wird mit klimatologischen Daten initialisiert und die Entwicklung der Ozeanzirkulation wird für 500 Jahre berechnet. Der daraus resultierende Zustand kann mit den Ergebnissen anderer Modelle, sowie bestehenden Daten verglichen werden um so das Modell zu validieren. Solche Modellstudien sind numerisch sehr aufwändig und nur auf massiv parallelen Plattformen wie dem HLRN-II durchführbar. **FESOM** ist vollständig **MPI**-parallel. Vor der eigentlichen Rechnung wird eine Gebietszerlegung des Modellgitters erstellt, die zu lösenden linearen Gleichungssysteme werden parallel aufgesetzt und gelöst. Die Skalierbarkeit des Modells ist im linken Teil von Abbildung 1 dargestellt. Dabei wurden 10 Modellschritte berechnet und die dafür benötigte Rechenzeit bestimmt. Bei einem Zeitschritt von 30 Minuten entspräche diese Zeit also der Simulation von 5 Stunden Modellzeit, die vollen 500 Jahre enthielten 8.76 Mio. Zeitschritte.

Es wurde die Performance der ICE1 Architektur mit Harpertown Prozessoren und des neuen ICE2 Systems mit Gainestown Prozessoren verglichen. Im Fall des schnelleren ICE2 Systems werden bei Verwendung von 8 Cores 2.035 Sekunden benötigt, im Falle von 512 Cores lediglich 0.047 Sekunden. Dies entspricht einem Speedup von 43,3. Dieser Wert liegt unter dem optimalen Wert von 64, dennoch bedeutet es im oben beschriebenen hypothetischen Fall mit einem Zeitschritt von 30 Minuten, dass die Simulation von 500 Jahren mit 512 Cores weniger als einen halben Tag benötigte anstelle von 20.6 Tagen bei Verwendung von 8 Cores.

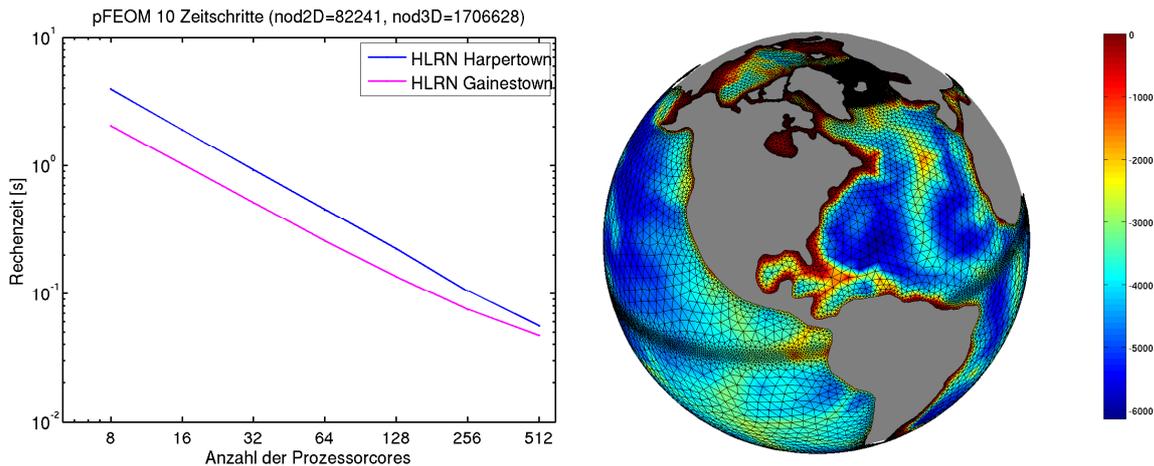


Abbildung 1: Globales Modellgitter mit hoher Auflösung im Bereich der Schwelle zwischen Grönland, Island und Schottland. Die Farbskala gibt die Meerestiefe in m an. Die linke Abbildung zeigt die Rechenzeit für 10 Zeitschritte in Abhängigkeit von der Anzahl der verwendeten Cores

Insbesondere im Fall der Gainestown Prozessoren ist erkennbar, dass der Speedup von 256 auf 512 Prozessoren sinkt, was darauf hinweist, dass der Anteil der Kommunikation im Vergleich zum eigentlichen Rechenanteil zunimmt. Dieser Effekt ist bei gleicher Problemgröße für Gainestown mit höherer Rechenleistung deutlicher als für Harpertown.

Da zur Validierung und im Produktionsbetrieb eine große Zahl solcher Simulationen durchzuführen sind, ist die Optimierung der Skalierbarkeit unabdingbar für einen praktikablen Betrieb des Modells.

Weiterhin wird innerhalb des BMBF-Projektes **ScalES** an der Kopplung zwischen FESOM und Atmosphärenmodellen gearbeitet. Dabei soll durch Weiterentwicklung des Kopplers OASIS4 der Datenaustausch zum unstrukturierten Ozeangitter optimiert und parallel ausgeführt werden, um so auf den Plattformen des HLRN die effiziente Berechnung gekoppelter Modellläufe zu ermöglichen.

Mehr zum Thema

1. Danilov, S., Wang, Q., Losch, M., Sidorenko, D., Schröter, J. (2008). Modeling ocean circulation on unstructured meshes: Comparison of two horizontal discretizations, *Ocean Dynamics*, 58(5-6), 365-374.
2. Timmermann, R., Danilov, S., Schröter, J., Böning, C., Sidorenko, D., Rollenhagen, K. (2009). Ocean circulation and sea ice distribution in a finite element global sea ice – ocean model, *Ocean Modelling*
3. Griffies, S. M. et al (2009). Coordinated Ocean-ice Reference Experiments (COREs). *Ocean Modelling*, 26, 1-46.

Förderung

AWI PACES Forschungsprogramm; Bundesministerium für Bildung und Forschung, Projekt ScalES

Virtuelle 3D-Welten – Ergebnisse skalierbarer Datenanalyse Effiziente Generierung interaktiv nutzbarer 3D-Filme aus massiv-parallelen Simulationen

S. Olbrich, M. Vetter, Regionales Rechenzentrum/Fachbereich Informatik, Scientific Visualization and Parallel Processing, Universität Hamburg

Kurzgefasst

- Die hochauflösende Simulation zeitabhängiger Prozesse erzeugt extrem große Datenmengen.
- Die Analyse und Visualisierung dieser Daten erfordert im Kontext massiv-paralleler Simulationen innovative Verfahren.
- Ziel der Forschung ist die Minimierung der sequenziellen Engpässe, die traditionelle Visualisierungsansätze beinhalten sowie eine Reduktion der Komplexität der abzuspeichernden Daten.
- Dafür wurde als Teil eines Visualisierungsframeworks DSVR eine Komponente zur In-Situ-Datenextraktion entwickelt, innerhalb derer das „Visualization Mapping“ parallelisiert wird.
- Skalierbare Datenreduktionsverfahren erzeugen geometrische Objekte, die mit Attributen aus den Originaldaten angereichert und zum effizienten Streaming/Rendering vorverarbeitet sind.
- Das Resultat dient als Grundlage zur anschließenden interaktiven 3D-Präsentation.

Der durch Hochleistungsrechner unterstützte wissenschaftliche Workflow ergänzt die Theorie und das Experiment insbesondere durch numerische Simulationen, aber auch durch das Pre- und Postprocessing, um die Berechnungen vorzubereiten und die Rechen- und Messergebnisse fassbar zu machen. Dieser Workflow trägt zum Zuwachs an Erkenntnissen und zum interdisziplinären Verständnis bei. Im Gegensatz zu Simulationssoftware, die auf tausenden Prozessorkernen effizient parallel arbeitet, skaliert traditionell für das Postprocessing – hier: Datenanalyse und Visualisierung – eingesetzte (Workstation-)Software jedoch bei weitem nicht in gleichem Maße. Dadurch wird der parallele Speed-up des Gesamtprozesses – bestehend aus Simulation, Datenanalyse und Visualisierung – erheblich limitiert. Darüber hinaus stellt allein die hohe räumliche und zeitliche Auflösung der Simulationsszenarien hohe Anforderungen an die Datenübertragung bzw. -speicherung. Beispielsweise werden in PALM [5], das auf dem HLRN-II bis zu 4096 Rechenkern nutzt, instationäre Strömungsphänomene auf einem 3D-Gitter mit $\sim 10^{11}$ Datenpunkten mit

$\sim 10^4$ Zeitschritten simuliert. Bei Abspeicherung sämtlicher skalarer und vektorieller Ergebniswerte je Gitter- und Zeitpunkt wäre ein Volumen von ~ 10 Petabyte an Rohdaten zu bewältigen.

Zur Lösung der genannten Probleme werden seit ca. 10 Jahren innovative Ansätze entwickelt und, in enger Abstimmung mit dem Institut für Meteorologie und Klimatologie an der Leibniz Universität Hannover, in prototypischen Implementierungen – zuerst auf einer Cray T3E, später auf den HLRN-Rechnern der ersten und zweiten Generation sowie weiteren Rechenclustern – erprobt. Kern der Entwicklungen ist eine Bibliothek zur parallelen Aufbereitung von Zeitserien dreidimensionaler Skalar- und Vektordatenfelder in eine Sequenz polygonaler 3D-Grafiken (Isosurfaces, Streamlines, Slicer), u. a. im Rahmen des DFG-Projekts „EVITA – Effiziente Methoden zur Visualisierung in tele-immersiven Anwendungen“ [1], [2], [3]. Neben der Parallelisierung des „Visualization Mapping“, das Voraussetzung zur interaktiven 3D-Präsentation – inklusive dem möglichen Einsatz von Methoden der Virtuellen Realität – ist, findet zugleich eine Reduktion der Ordnung der Komplexität der Daten – und damit des Volumens – statt.

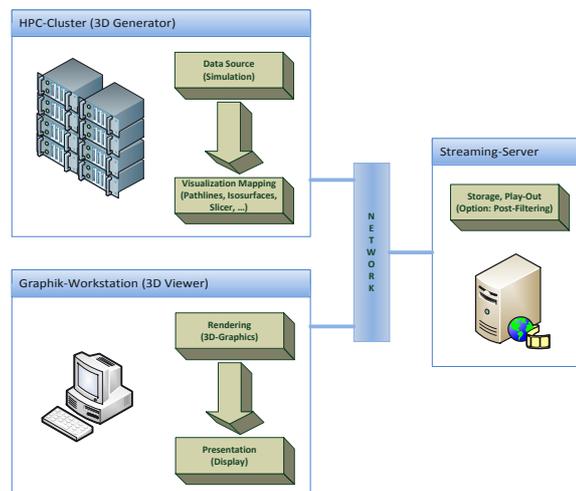


Abbildung 1: Die Visualisierungspipeline wird im DSVR-Framework netzverteilt partitioniert und zum Teil parallelisiert.

Die realisierten Datenextraktionsalgorithmen skalieren bereits bis zu mehreren hundert Cores.

1. Parallele Isosurface-Extraktion mit integrierter Polygonsimplifizierung

Die Idee der engen Verzahnung zweier bekannter Verfahren – einerseits der Marching-Cubes-Algorithmus zur Erzeugung polygo-

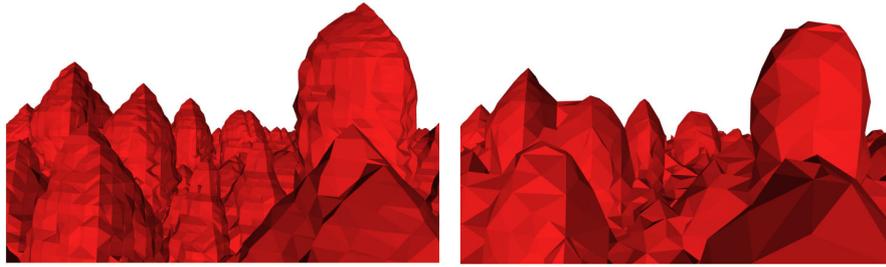


Abbildung 2: Isosurface-Visualisierung des Temperaturfeldes einer Simulation atmosphärischer Konvektionszellen mit PALM in Originalauflösung und mit integrierter Reduktion der Polygonanzahl auf ca. 10%.

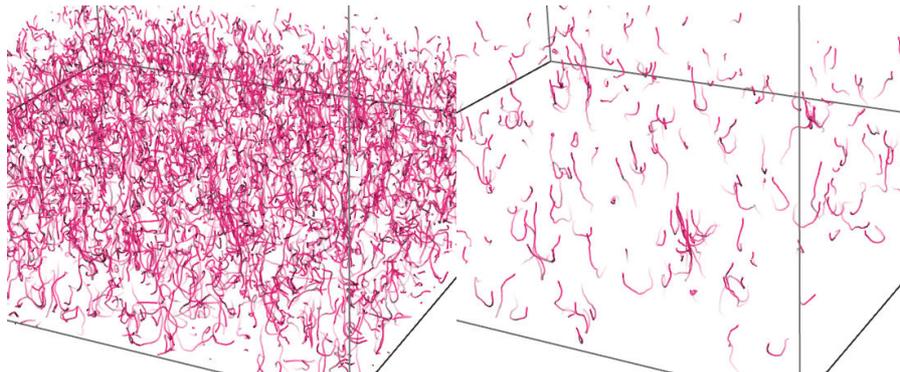


Abbildung 3: Bahnlinien-Visualisierung einer atmosphärischen Konvektionsströmung auf Basis eines generalisierten Saatpunkt-Schemas und mitgespeicherter Merkmalsextrakte, ohne und mit Postfiltering.

nal angenäherter Isooberflächen aus Skalarfeldern, andererseits Vertex-Clustering zur Polygonsimplifizierung – wurde implementiert und erprobt. Hinsichtlich der parallelen Skalierung sowie auch bezüglich der erzielten Reduktionsfaktoren ist der Ansatz erfolgreich. Ein neu hinzugekommener Ansatz zur adaptiven Reduktion, der zukünftig noch ausbaubar ist, führte zu einer weiteren deutlichen Qualitätsverbesserung (siehe Abb. 2).

2. Parallele Stromlinien-Extraktion mit merkmalsbasiertem Postfiltering

Es wurden parallele Programmbibliotheksfunktionen entwickelt, die eine effiziente Aufbereitung instationärer Vektorfelder in Strömungskurven erlauben. Mittels Anreicherung des Datenstroms, der ursprünglich die Bahnlinien nur als 3D-Grafik codierte, durch Eigenschaften aus räumlich und zeitlich zugeordneten Rohdaten wurde ein neuer Ansatz realisiert. Dieser unterstützt sowohl den Batchbetrieb durch die automatisierte Datenextraktion als auch explorative Visualisierungsszenarien durch die Integration von interaktivem Postfiltering (siehe Abb. 3).

Mehr zum Thema

1. Olbrich, S., et al., 2009: EVITA – Effiziente Methoden zur Visualisierung in tele-immersiven Anwendungen. Abschlussbericht zum DFG-Projekt EVITA, DFG-Geschäftszeichen OL 241/1-1.
2. Manten, S., M. Vetter und S. Olbrich, 2011: Evaluation of a Scalable In-Situ Visualization System Approach in a Parallelized Computational Fluid Dynamics Application. In: Coquillart, S., G. Brunnett und G. Welch (Hrsg.): Virtual Realities, Dagstuhl-Seminar 2008, Springer.
3. Vetter, M. und S. Olbrich, 2011: Scalability Issues of In-Situ Visualization in Parallel Simulation of Unsteady Flows. In: Proceedings of CiHPC (Competence in High Performance Computing) 2010 – HPC Status Conference of Gauß-Allianz e. V., Schwetzingen, Germany, Springer.
4. DSVR: <http://www.dsvr-software.de>
5. PALM: <http://palm.muk.uni-hannover.de>

Förderung
Universität Hamburg

Anhang

Organisationsstruktur des HLRN

Der HLRN-Verbund wird von seinem Verwaltungsrat geführt, in dem jedes beteiligte Land durch den zuständigen Referenten im Ministerium bzw. in den Senatorischen Behörden vertreten ist. Der Verwaltungsrat wird durch zwei ständige Kommissionen beraten und unterstützt, den Wissenschaftlichen Ausschuss und die Technische Kommission.

Der mit fachlich ausgewiesenen Mitgliedern besetzte Wissenschaftliche Ausschuss entscheidet in einem wissenschaftlich geleitetem Verfahren über die Zulassung von Projekten entsprechend den bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft üblichen Kriterien für die Begutachtung von Forschungsvorhaben. Die Technische Kommission ist verantwortlich für die Konzeption des Computersystems, die Steuerung der Betriebsparameter, die Realisierung des Zugangs und die Entwicklung des Fachberaterkonzepts, welche die Nutzer des HLRN-Systems fachlich und methodisch unterstützen.

Weitere Informationen über den HLRN sind auf der HLRN-Website www.hlrn.de zu finden.

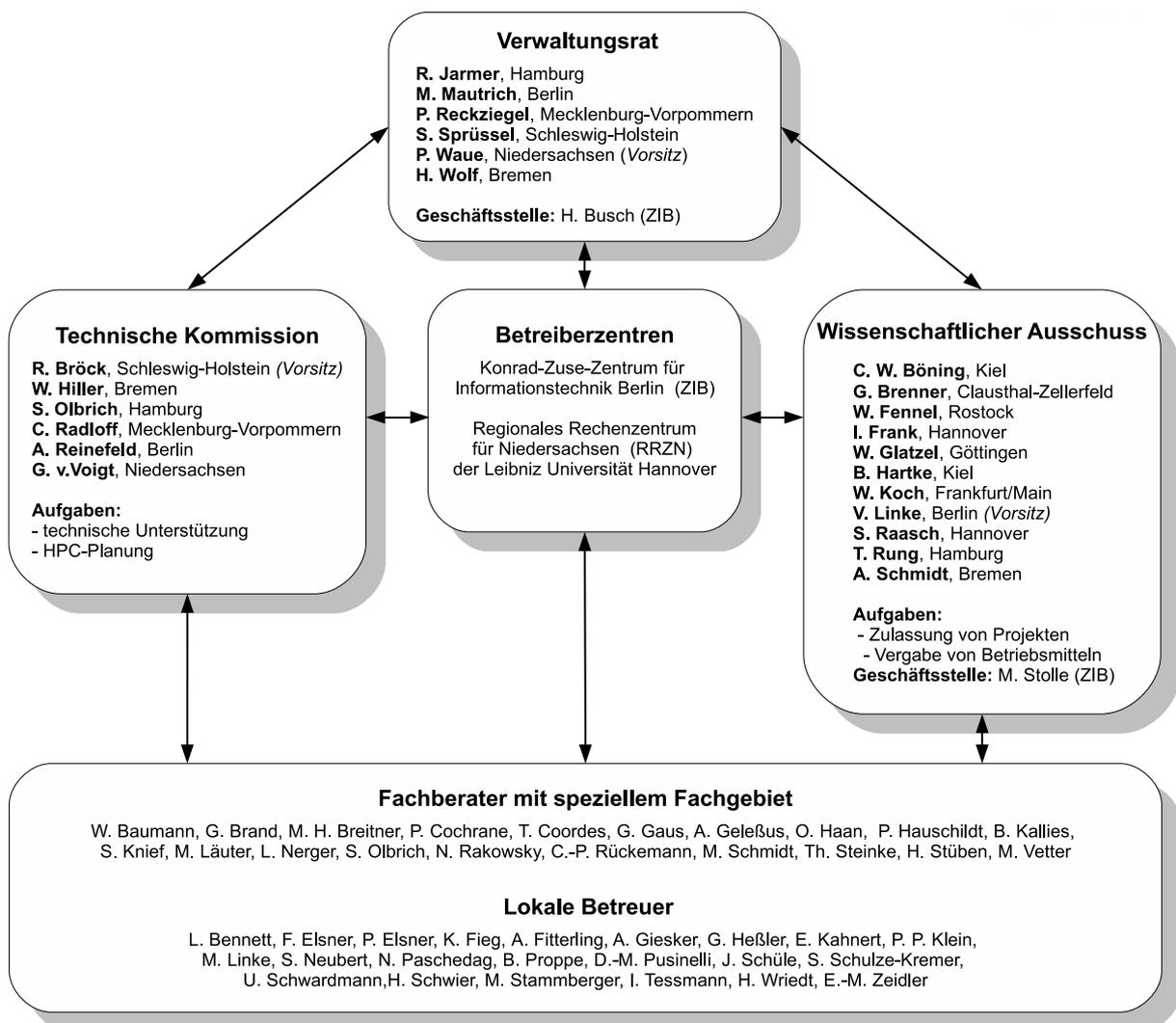


Abbildung 1: Organisationsstruktur des HLRN; Stand Januar 2011

Technik des HLRN-II-Systems

Das HLRN-II-System SGI Altix besteht mit seinen beiden Teilkomplexen in Berlin und Hannover aus je vier Compute-Systemen (ICE1, XE, ICE2, UV), deren einzelne Komponenten im Folgenden tabellarisch aufgeführt werden. Diese vier Systeme sind mit dem I/O-System und zum Teil untereinander durch ein leistungsfähiges Infiniband-Netzwerk verbunden. Die enge Verbindung beider Komplexe ist durch eine optische 10 Gbit/s-Netzwerkverbindung realisiert. Dadurch lassen sich die Systeme an beiden Standorten in technischer und administrativer Sicht weitgehend als ein System betreiben und nutzen. Zusätzlich runden Login-Server, Datei-Server sowie große Magnetband-Archive das Gesamtsystem ab. Die folgende grafische Darstellung des HLRN-II-Gesamtsystems kennzeichnet die Hardwareausstattung der einzelnen Komponenten. Die einzelnen Quader kennzeichnen die Rechenknoten, ihre Grundfläche die Zahl der Prozessorcores, ihre Höhe die Speichergröße. Die blau eingefärbten Knoten kennzeichnen Test- und Entwicklungssysteme, der rot eingefärbte xe-Knoten ist reserviert für sequentielle Pre- und Postprocessingjobs, die übrigen Knoten bilden die Produktionssysteme.

Hubert Busch
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin

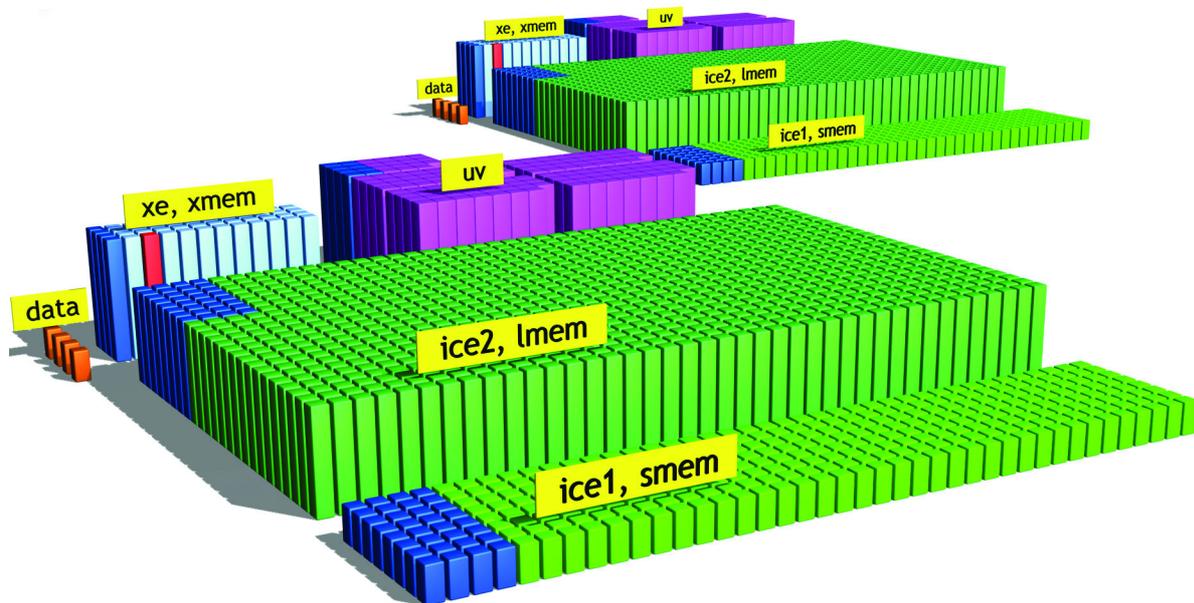


Abbildung 2: Grafische Darstellung der heterogenen Komponenten des HLRN-II an den beiden Standorten aus Sicht des Batchsystems.

	ICE1	XE	ICE2	UV
Prozessor, Intel Xeon	Harpertown QuadCore	Harpertown QuadCore	Nehalem EP QuadCore	Nehalem EX OctoCore
Anzahl Racks	10	6	30	10
Anzahl Nodes (Blades)	640	96	1.920	304
Anzahl Cores	5.120	768	15.360	4.864
Maximalzahl Cores pro Anwendung	2.560	384	7.680	496
Maximalzahl Cores pro Linux-Instanz	8	8	8	496
Taktrate (GHz)	3,0	3,0	2,93	2,266
Hauptspeicher/Node	16 GB	64 GB	48 GB	64 GB
Taktrate des Speichers (GHz)	1,6	1,6	1,333	1,066
Speicherzugriff, 8 (16) threads (GB/s)	15,5	15,5	38	29,6 (41,2)
Maximaler Speicher pro Anwendung	5,12 TB	3,0 TB	46 TB	1,94 TB
Maximaler Speicher pro Linux-Instanz	16 GB	64 GB	48 GB	2.048 GB
Gesamter Hauptspeicher	10,24 TB	6,0 TB	92 TB	19,0 TB
Performance (TFlop/s)	61,4	9,2	180	44
Peakperformance pro NPL ((GFlops/s)*h)	288	288	141	145
Speicherleistung pro NPL ((GB/s)*h)	46,5	46,5	57	41,2
Kommunikationsnetzwerk	InfiniBand 4xDDR	InfiniBand 4xDDR	InfiniBand Dual Rail 4xDDR	Numalink 5
MPI-Kommunikation, Latenzzeit und Bandbreite	2,5 μ s 1,9 GB/s	2,5 μ s 1,9 GB/s	3,3 μ s 2,8 GB/s	2,0 μ s 3,1 GB/s

Tabelle 1: Hardware (Gesamtsystem Berlin und Hannover).



Abbildung 3: Das HLRN-II-System ist an jedem Standort in 49 Racks untergebracht, davon 28 für Computersysteme, 13 für Plattensysteme, 6 für InfiniBand-Switches und 2 für weitere Server.

Betriebssystem

SuSE Linux Enterprise Server (SLES), SGI ProPack

Compiler

Intel compiler suite, GNU compiler suite

Bibliotheken und Anwendungssoftware, Chemie

CPMD, MOLPRO, GAMESS, Gaussian, GROMACS, NAMD, Turbomole, CP2K, CRYSTAL, VASP

Bibliotheken und Anwendungssoftware, Ingenieurwissenschaften

ABAQUS, ANSYS, CFX, FLUENT, STARCD, EnSight, OpenFOAM

Bibliotheken und Anwendungssoftware, Numerik

Intel MKL, PetSc, FFTW, GSL, HDF, netCDF

Parallelisierung

SGI MPI, Intel MPI, OpenMPI, MVAPICH2, OpenMP

Profiling und Debugging

Intel Threading & Tracing Tools, TotalView

Systemsoftware

Moab, Torque, Lustre, SGI Tempo, Scali Manage, Ganglia

Tabelle 2: Betriebssystem und Software.

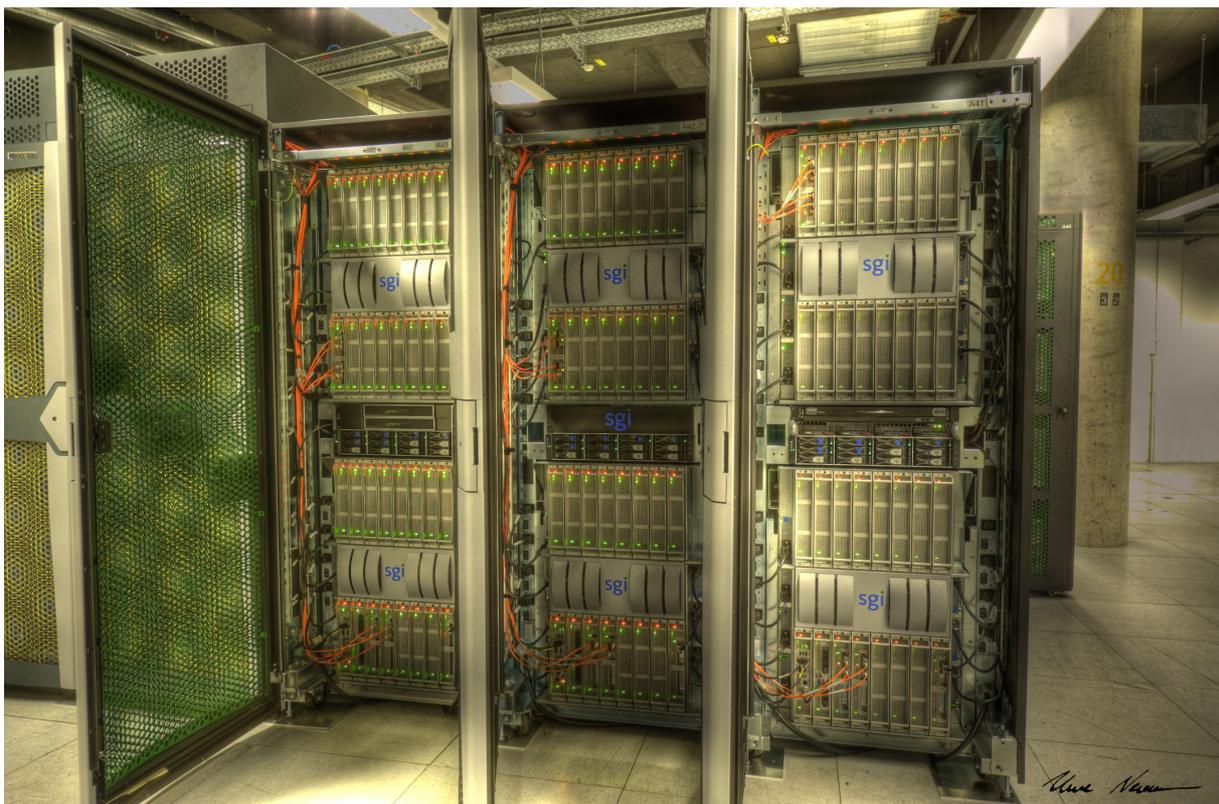


Abbildung 4: Geöffnete Schranktüren von UltraViolet-Racks mit jeweils 32 Compute-Blades.

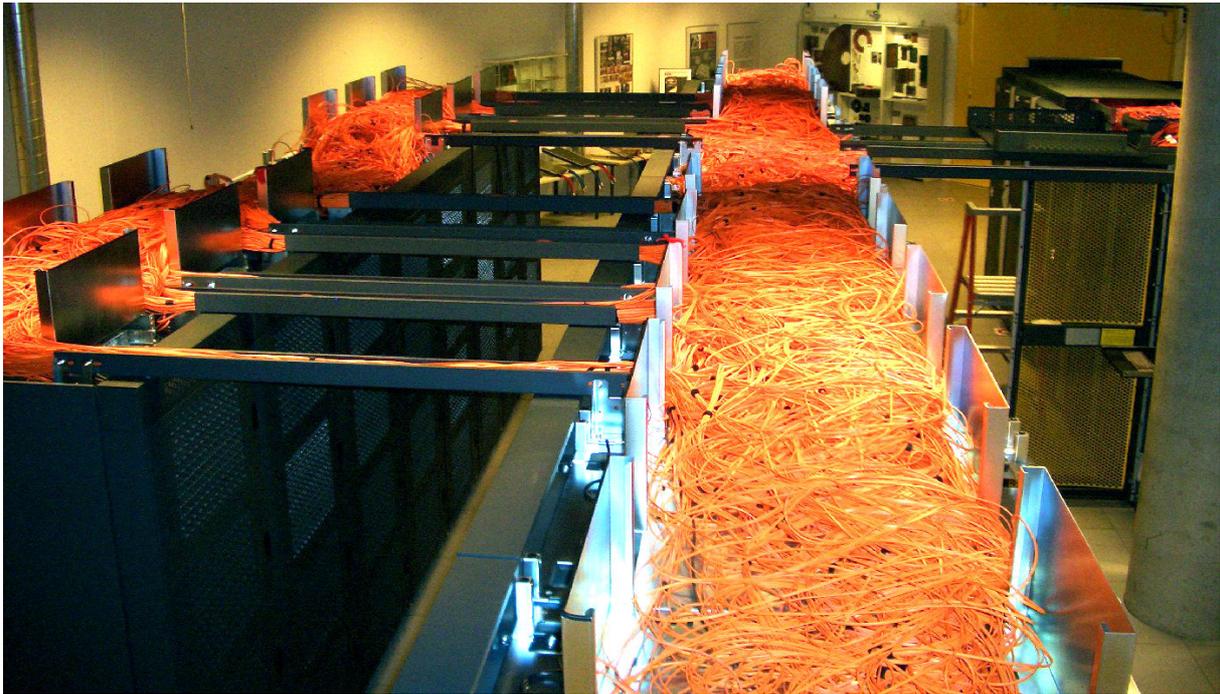


Abbildung 5: 7.200 Glasfaserkabel in InfiniBand-Technik mit einer Gesamtlänge von 72 km verbinden die Compute-Knoten untereinander und mit den I/O-Systemen.

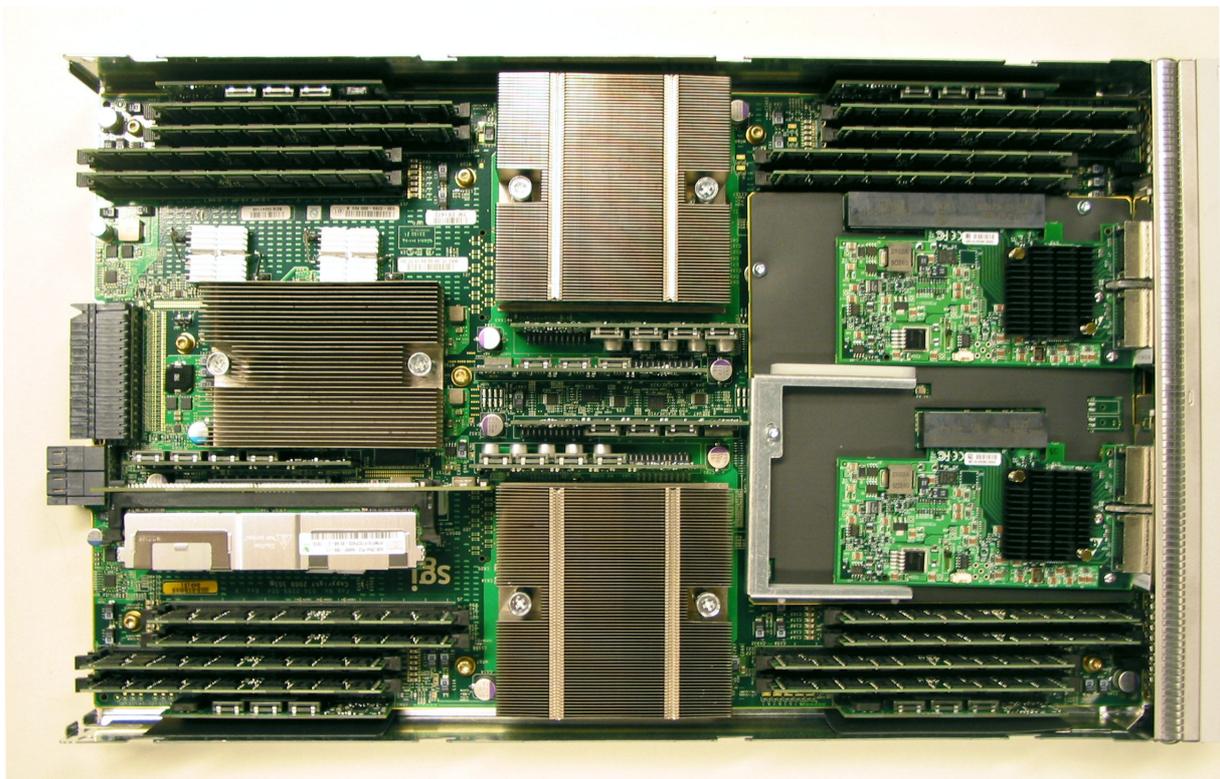


Abbildung 6: Geöffnetes UltraViolet-Blade.