

Hochleistungsrechnen in Hessen 2015

Forschungsbericht / Research Report



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
DARMSTADT



GOETHE
UNIVERSITÄT



JUSTUS-LIEBIG-
UNIVERSITÄT
GIESSEN

U N I K A S S E L
V E R S I T Ä T

Philipps



Universität
Marburg

Vorwort

Hochleistungsrechnen in Hessen

- 8 Hessisches Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen
- 10 Lichtenberg-Hochleistungsrechner - TU Darmstadt
- 12 LOEWE-CSC - Goethe-Universität Frankfurt
- 14 Hochleistungsrechner SKYLLA - JLU Gießen
- 16 Kassler Linux-Cluster - Universität Kassel
- 18 Marburger Rechen-Cluster MaRC2 - Philipps-Universität Marburg

Biologie, Medizin und Neurowissenschaften

- 22 Aktivitätstragene neuronale Repräsentation von Vorinformation in der visuellen Wahrnehmung
- 23 Computational Modeling of Biomolecules
- 24 Elektronendosimetrie in der Strahlentherapie
- 25 Monte Carlo Simulation of the Neutron Radiation Field around a Medical 18 MV Linac
- 26 Photonendosimetrie in der Strahlentherapie
- 27 Potential Barriers to Gene Flow in the Endangered European Wildcat (*Felis silvestris*)
- 28 Systembiologische Analysen mit dem Moos *Physcomitrella patens*

Chemie und Materialwissenschaften

- 32 Atomistic Computer Simulations of Amorphization in Metal/Metallic-Glass Multilayer Systems
 - 33 A Generic 3D-Diverse Fragment Library for Crystallographic Screening and Drug Discovery
 - 34 Beyond Ni-based Superalloys
 - 35 Density Functional Theory: Study on the Mechanism of the Chloride-Induced Aufbau of Perchlorinated Cyclohexasilanes
 - 36 Development and Implementation of New Methods for Crystal Structure Determination from Powder Diffraction Data
 - 37 Dichtefunktionaltheoretische Berechnungen von Vibrationsspektren oberflächen-aktiver Moleküle
 - 38 Electronic Structure Calculations for Si Anodes in Li Ion Batteries
 - 39 How does Toluene Dissolve Low-Molecular-Weight Polystyrene?
 - 40 Improvement of Methods for the Comparison of Protein Binding Sites
 - 41 Insight into Heterogeneous Catalysis through Simulation on the Atomic Level
 - 42 Ionenspezifische Effekte auf das Faltungsgleichgewicht von Polyacrylamiden
 - 43 Modellierung des elektrokalendarischen Effekts in bleifreien Relaxor-Ferroelektrika
 - 44 Modellierung of Extended Defects in CIGS Based Solar Cells
 - 45 Molecular Dynamics Simulations of Nanoglasses
 - 46 Molecular Models of Wetting and Adhesion Phenomena
 - 47 Molecular Perspective of Wetting: Simulation and Theory
 - 48 Peptide Backbone Effect on Hydration Free Energies of Amino Acid Side Chains
 - 49 The Simulation of Fluids for Psychophysical Studies
 - 50 Reaktive Intermediate - Dispersion
 - 51 Structure and Properties of Amorphous LiPON Electrolyte by First-Principles Simulations
 - 52 Theoretical Investigation of Electrocylic Reactions of Siloles
-

- 53 Thermodynamic Mechanism of the Osmolyte Effects on the Folding/Unfolding Equilibrium of (Bio)macromolecules in Aqueous Solution
- 54 Understanding the Mechanisms of Multidrug Transport Proteins
- 55 Untersuchung der Fehlordnungen in organischen Molekülkristallen
- 56 Von ungewöhnlichen Gold-Komplexen zu komplizierten Bandstrukturen
- 57 Well-Defined Iron Catalysts for the Acceptorless Reversible Dehydrogenation-Hydrogenation of Alcohols and Ketones

Geowissenschaften und Ökologie

- 60 Freshwater Species Distribution Models
- 61 Global Water Resources in a Global World
- 62 Gravity-Wave Breaking
- 63 Inverse Modellierung zur Verbesserung von Wettervorhersagen und Klimaprojektionen
- 64 Modelling Ecosystems, Biosphere-Atmosphere Interactions and Environmental Change with LPJ-GUESS
- 65 Properties and Climate Sensitivity of Convective Activity in Convective Permitting Models
- 66 The Impact of Marginal Seas on the Regional Climate

Ingenieurwissenschaften

- 70 Andauernde Weiterentwicklung eines Frameworks für numerische Simulationen auf Basis von Discontinuous Galerkin-Methoden
 - 72 CFD-Simulation der Fahrzeugumströmung - Einfluss unterschiedlicher Heckformen
 - 73 Computational Modeling of the Flow Past Stationary and Rotating Road Vehicle Wheel
 - 74 Development of Methods for the Simulation of Technical Combustion Systems
 - 75 Effiziente Berechnung von Fluid-Struktur-Interaktion mit Hilfe adaptiver Gitterverschiebung
 - 76 Enhanced Compact Heat Exchangers
 - 77 Hybride Modellierung turbulenter Strömungen
 - 78 Large Eddy Simulation of Auto-Ignition and Flame Propagation in a HCCI Engine Using a Progress Variable Approach
 - 79 Large Eddy Simulations of Lean Partially Pre-vaporized Turbulent Spray Flames
 - 80 Lärmreduktion durch Optimierung aeroakustischer Vorgänge
 - 81 LES of a Spark Ignition Engine Using Artificial Thickening and Flamelet Generated Manifolds
 - 82 Modeling of Turbulence Interface Interactions in Two-Fluid Systems
 - 83 Modellierung von Lärmquellen vorgemischter Verbrennungssysteme mit Hilfe der inkompressiblen Grobstruktursimulation
 - 84 Numerical Simulation and Optimization of Acoustics of Flight Turbine
 - 85 Numerical Simulation of Flame-Wall-Interaction
 - 86 Numerische Modellierung eines PKW-LKW Überholvorgangs
 - 87 Numerische Modellierung von Mehrphasenströmung im Hinblick auf oberflächenspannungsdominierte Strömungen
 - 88 Numerische Simulation der Verbrennung fester Brennstoffe in einer Oxyfuel-Atmosphäre
 - 89 Numerische Simulation von Verbrennungslärm und -instabilitäten mittels hybrider Berechnungsverfahren
 - 90 Numerische Strömungssimulation des DrivAer-Referenzkörpers bei Schräganströmung
 - 91 Numerische Untersuchung zur Spaltproduktrückhaltung in Wasservorlagen
 - 92 Reynolds Number Effect on Turbulent Drag Reduction by Active Means
 - 93 Scale-up of Calcium Carbonate Looping Technology for Efficient CO₂ Capture from Power and Industrial Plants
-

- 94 Simulation von Kohlenstoffnanoröhrchen
- 95 Turbulente Fluid-Struktur-Akustik (FSA) Simulation einer Zylinder-Platten Konfiguration
- 96 Untersuchung der Strukturintensität als Indikator für die Schallabstrahlung von Strukturen

Mathematik und Informatik

- 100 Adaptive Numerical Wavelet Frame Methods for Elliptic Parabolic Operator Equations, Inverse Problems, and Stochastic Evolution Equations
- 101 Automatische Hardwaresynthese für Löser von konvexen Optimierungsproblemen
- 102 Image and Scene Search in Historical Collections of DDR Television Recordings in the German Broadcasting Archive (DRA) by Automatic Content-based Video Analysis
- 103 Die Whitehead'sche Asphäritätsvermutung
- 104 Dynamics of Buoyant High Viscosity Droplets Rising Freely in an Ambient Liquid
- 105 Grundlagen der Informatik III Lehre 2013/2014
- 106 Management virtueller Maschinen in Linux High Performance Clustern
- 107 MATOG: Auto-Tuning On GPUs
- 108 Modeling and Numerical Simulation of Species Transfer in Bubbly Flows Using OpenFOAM
- 109 Numerical Methods for Viscoelastic Single- and Multiphase Flows
- 110 Numerical Study of Binary Droplet Collisions at High Weber Numbers
- 111 Performance Measurement Techniques
- 112 Preference Based Reinforcement Learning
- 113 Serial Hashtag Activism: An Ethnographic Embedment of Big Data
- 114 Thermocapillary Droplet Actuation on a Wall
- 115 Untersuchungen zu PGAS-Systemen: Programmierbarkeit, Synchronisation, Taskpools und Fehlertoleranz

Physik

- 118 Ab-initio Description of p-shell Hypernuclei
 - 119 Ab-initio-Untersuchung von Zinnoxiden
 - 120 ALICE Experiment - The Search for Signatures of the Quark-Gluon Plasma
 - 122 Advanced Electro-Optical Modeling of III-Nitride Light Emitters
 - 123 Centrality Dependence of the Direct Photon Emission
 - 124 Direct Photons from Partonic and Hadronic Sources
 - 125 Dynamical Simulation of Heavy Ion Reactions at FAIR
 - 126 Effektives Potential für ultrakurzpulslaser angeregtes Silizium
 - 127 Electronic Pairing in Low-Dimensional Systems from Lattice Density-Functional Theory
 - 128 Elektronische und phononische Struktur der Kupferoxide
 - 129 Evolution of Partonic and Hadronic Matter in Relativistic Heavy-Ion Collisions
 - 130 Extracting Hadron Masses from Lattice QCD Simulations at Fixed Topology
 - 131 Gitter-QCD-Berechnung der Massen von D- und D_s-Mesonen und von Charmonium
 - 132 Gitter-QCD-Untersuchung von Tetraquark-Kandidaten
 - 134 Gluonic Green's Functions of Quantum Chromodynamics
 - 135 Gravitational-Wave Modeling from Binary Neutron Stars on Loewe Cluster
 - 136 Hartree-Fock Many-Body Perturbation Theory
-

137	Highly-Excited Valence Electron Systems
138	Importance-Truncated Valence-Space Shell Model and Energy-Variance Extrapolation
139	Influence of Magnetic Material on Tunnel Magnetoresistance and Spin-Transfer Torque in MgO-based Tunnel Junctions
140	Simulationsrechnungen zur Photoproduktion von ω -Mesonen
141	In-Medium Similarity Renormalization Group for Nuclei
142	Lattice QCD on Loewe-CSC
143	MnAs nanocluster
144	Modelling of Neutron Star Properties
145	Monte Carlo Modelling of Ion-Beam Cancer Therapy on Sub-Micron Scales
146	Monte-Carlo-Simulationen der elektronischen Eigenschaften von Graphen
147	Monte-Carlo-Simulationen von G2-QCD bei endlicher Baryonendichte
148	Nuclear Matter in the Parity Doublet Model with Fluctuations
149	On the Properties of Hypermassive Neutron Stars Formed in Mergers of Spinning Binaries
150	Orbital-Dependent Exchange-Correlation Energy Functionals
151	Phasenstabilität und elektronische Bandstruktur von Kupferoxid
152	p-Pb collisions at 5.02 TeV in the PHSD Transport Approach
153	Random-Phase Approximation with Chiral NN+3N Interactions
154	RITSAT
155	Simulation von Zwei-Farb-Quantenchromodynamik
156	Simulationsrechnungen zum zukünftigen PANDA Experiment
157	Spectral Functions and Transport Coefficients of Matter under Extreme Conditions
158	SPP 1386 Nanostrukturierte Thermoelektrika - Wärmetransport in Silizium auf der Nanoskala
159	Structure and Dynamics of Meso-Bio-Nano Systems
160	Thermal Transport Properties in Magnetic Tunnel Junctions
161	Thermische Leitfähigkeit in Silizium-Isotopen-Vielfachschichten
162	Tuning the Magnetic Interaction Between Small Clusters on Metallic Surfaces by Means of Electric Fields
163	Turbulence in Rotating Shear Flows
164	Turbulenzübergang in der Kanalströmung
165	Zeitabhängige Simulation nuklearer Pastamaterie

Herausgeber:
Hessisches Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen

Redaktion:
Dr. Alexandra Feith
Hessisches Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen

Texte und Bilder:
Wissenschaftler und Wissenschaftlerinnen, die in den Jahren 2014 und 2015
an den Hochleistungsrechnern in Hessen gearbeitet haben.

Gestaltung:
Björn Pippert
keativ[werk] – arbeitsgemeinschaft für kommunikative lösungen

Druck:
Schmidt printmedien GmbH
Ginsheim-Gustavsburg

Gefördert durch | funded by HESSEN



Liebe Leserinnen, liebe Leser,

Sie halten den ersten Forschungsbericht über Hochleistungsrechnen in Hessen in der Hand, der vom Hessischen Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen zusammengestellt wurde. 2014 wurde mit dem Kompetenzzentrum ein leistungsfähiger Verbund geschaffen, an dem die Universitäten in Darmstadt, Frankfurt, Gießen, Kassel und Marburg beteiligt sind und vom Hessischen Ministerium für Wissenschaft und Kunst finanziert ist. Aufgabe ist es, hessenweit und koordiniert die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler in ihrer Forschungstätigkeit hinsichtlich aller Fragen der effizienten und nachhaltigen Nutzung der Hochleistungsrechner zu unterstützen. An den Standorten in Darmstadt, Frankfurt, Gießen, Kassel und Marburg stehen Mitarbeiter des Kompetenzzentrums für die persönliche Beratung bereit. Ein zusätzliches Weiterbildungsprogramm für die Nutzerinnen und Nutzer der hessischen Rechner, die Workshop-Reihe HiPerCH (High Performance Computing in Hessen), führt in die Grundlagen sowie erweiterten Kenntnisse des Hochleistungsrechnens ein. Diese Weiterbildungsveranstaltungen werden an allen oben genannten Standorten angeboten. Auf Basis eines ständigen Austausches der Kompetenzzentrumsmitarbeiter untereinander sowie jährlich stattfindenden Online-Umfragen wird ein bedarfsorientiertes Programm entwickelt, das die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler zu einer kompetenten Nutzung der unterschiedlichen Hochleistungsrechner führt.

In diesem Forschungsbericht stellen sich exemplarisch 128 Projekte aus sehr unterschiedlichen Bereichen vor, die für ihre Forschung Hochleistungsrechner benötigen. Mit den Hochleistungsrechnern wird Grundlagenforschung in der Chemie und Physik, aber auch Forschung im Bereich der Ingenieur- und Lebenswissenschaften unterstützt. So werden zum Beispiel Eigenschaften von Materialien und Molekülen berechnet, Strömungen und Verbrennungen für technische Anwendungen simuliert, Verhalten im Straßenverkehr (z. B. in Überholssituationen) untersucht, oder es wird an Programmier- und Analysewerkzeugen für die Hochleistungsrechner selbst geforscht.

Die Spannweite der Disziplinen belegt die Notwendigkeit, neben der Bereitstellung der Hard- und Software, auch eine Unterstützung in der Nutzung und Programmierung der sich wandelnden Hochleistungsrechner anzubieten. Das HKHLR engagiert sich mit *Brainware for Science* für die Forschungslandschaft in Hessen.

Prof. Dr. Christian Heiliger

Vorsitzender des Hessischen Beirates für das Hochleistungsrechnen

Hessisches Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen
(HKHLR)



Die fünf hessischen Universitäten kooperieren für eine leistungsstarke Forschung mit Hochleistungsrechnern. Die Zusammenarbeit zwischen den Standorten Darmstadt, Frankfurt, Gießen, Kassel und Marburg wird vom Hessischen Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen (HKHLR) mit dem Sitz in Darmstadt koordiniert.

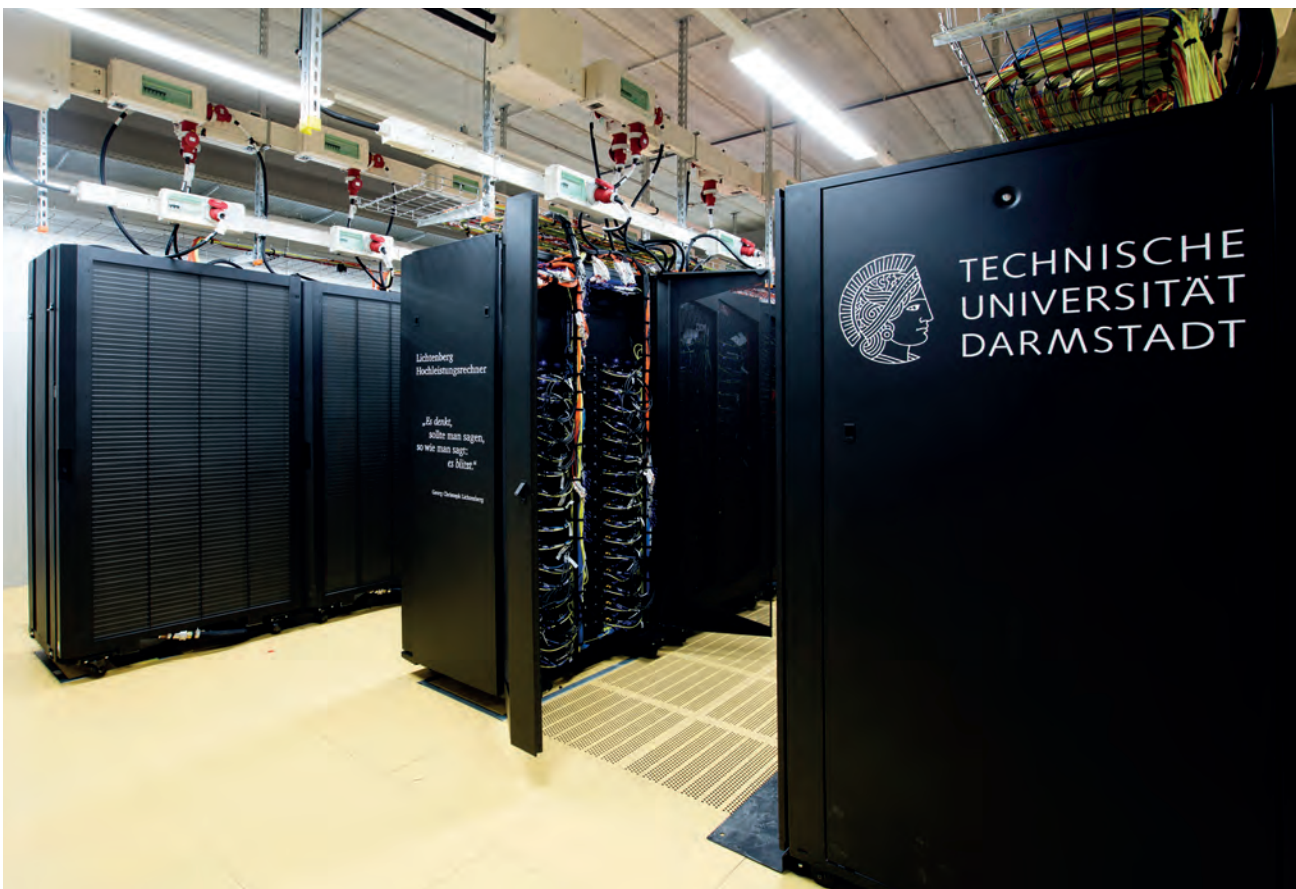
Fortschritt in Wissenschaft und Technik, insbesondere die Entwicklung von Zukunftstechnologien, braucht Hochleistungsrechnen. Simulationen von komplexen Prozessen, auf die eine Vielzahl von Einflussfaktoren einwirken, können anhand von Computer-Berechnungen sichtbar gemacht werden. Das hilft in den Ingenieurwissenschaften beispielsweise, Materialeigenschaften vorauszusagen, Maschinen und deren technische Komponenten zu optimieren. In den Naturwissenschaften erlaubt das wissenschaftliche Rechnen neue Erkenntnisse in den unterschiedlichsten Forschungsgebieten von der Physik der elementaren Materie bis zur Hirnforschung. Hochleistungsrechnen ist zu einem unverzichtbaren Werkzeug in der Grundlagenforschung sowie deren industriellen Anwendung geworden. Damit trägt es entscheidend zum Forschungs- und Industriestandort Hessen bei.

Eine große Anzahl von vernetzten Rechenknoten, in ihrer koordinierten Nutzung mit dem sogenannten parallelen Rechnen, ist die Voraussetzung für die hohe Rechenleistung im Hochleistungsrechnen. Ein wesentlicher Aspekt dabei, sind auch geeignete Algorithmen, die auf hohe Parallelität ausgelegte Programmiermodelle und Softwaretechniken. Dies ist deshalb wichtig, da sich die Rechnerarchitekturen circa alle fünf Jahre grundlegend wandeln, wohingegen sich die eingesetzten Programmsysteme stetig weiterentwickeln. Forschende müssen demnach in der Lage sein, sowohl neue Ideen auf den aktuellen Rechnern in Programme umzusetzen, als auch bestehende Programmsysteme auf neuen Architekturen weiterzuentwickeln. Der Nutzen von Hochleistungsrechnern und damit auch ihr Wirkungsgrad – Stichwort „Green Computing“ – wird durch Programmierung nachhaltig beeinflusst. Das hat nicht nur Einfluss auf die Darstellung des Ergebnisses der Forschung, sondern auch auf die Entwicklung der Hochleistungsrechner selbst. Einzelne Forschungsleistungen der hessischen Rechner finden Sie hier in diesem Bericht.

Das Hessische Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen koordiniert seit 2014 die Zusammenarbeit der einzelnen Standorte in Hessen und fördert z. B. durch Schulungen die Optimierung der Software auf den Hessischen Hochleistungsrechnern. Weitere Informationen zum Hessischen Kompetenzzentrum für Hochleistungsrechnen: www.hpc-hessen.de

Lichtenberg-Hochleistungsrechner

TU Darmstadt



Die Technische Universität Darmstadt betreibt den Lichtenberg-Hochleistungsrechner, der in mehreren Ausbaustufen in den Jahren 2013 bis 2015 erweitert wird. Bund und Land tragen gemeinsam die Investitionskosten in Höhe von 15 Millionen Euro. Darüber hinaus wurden im Rahmen des hessischen Hochschulbauprogramms HEUREKA weitere sieben Millionen Euro in den Neubau eines energieeffizienten Gebäudes investiert.

Der Lichtenberg-Hochleistungsrechner unterstützt Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der Hochschulen in ganz Hessen. Die vielfältige Architektur des Hochleistungsrechners bietet die beste Voraussetzung für eine flexible und effiziente Nutzung für rechenintensive Anwendungen. Sie unterstützt neben der effizienten Ausführung der Programme auf der für sie passenden Architektur auch die Entwicklung neuer Programme für Parallelrechner. Entwickler können hier das für ihre Algorithmik passende Programmiermodell nutzen und so die Produktivität bei der Softwareentwicklung optimieren.

Über 30 Institute der TU Darmstadt nutzen den Lichtenberg-Rechner. Darmstädter Forschungszentren, wie die Graduiertenschule Computational Engineering, das Center of Smart Interfaces oder der Sonderforschungsbereich CROSSING greifen für ihre Arbeiten auf die Ressource des Hochleistungsrechners zurück. Aktuelle Forschungsschwerpunkte sind neben Fragestellungen aus den Naturwissenschaften auch Simulationen für die Ingenieur- und Materialwissenschaften, um beispielsweise Materialeigenschaften vorauszusagen oder Produktelemente zu optimieren. Weiterhin forscht der Fachbereich Informatik zu Themen der Programmoptimierung für den Bereich des Hochleistungsrechnens und der Sonderforschungsbereich CROSSING zu Themen der Datensicherheit mit neuen Verschlüsselungsmethoden.

LOEWE-CSC

Goethe-Universität Frankfurt



Das Center for Scientific Computing (CSC) betreibt in Zusammenarbeit mit dem Hochschulrechenzentrum der Goethe-Universität zwei Hochleistungsrechner, die in ihrer Leistungsklasse gestaffelt sind. Zur Grundversorgung am Standort Frankfurt ist seit April 2010 der Linux-Cluster FUCHS-CSC in Betrieb. Er wurde aus Mitteln der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) und des Ministeriums finanziert. Der Rechner wird genutzt von über hundert Arbeitsgruppen der hessischen Hochschulen und dem Frankfurt Institute for Advanced Studies (FIAS). Der Landeshochleistungsrechner LOEWE-CSC ist ein leistungsfähiges Hochleistungsrechnen-System, das mehrfach für sein innovatives GreenIT-Konzept ausgezeichnet wurde. LOEWE-CSC wurde im Jahr 2014 erweitert und bietet durch InfiniBand FDR vernetzte 832 Rechenknoten mit einer Rechenleistung von mehr als 400 TeraFlop/s an. Darüber hinaus verfügt der Rechner über insgesamt 3,5 PetaByte Festplattenspeicher. LOEWE-CSC wird finanziert aus Mitteln des hessischen Landesforschungsprogramms LOEWE und der DFG.

Mit der Entwicklung von LOEWE-CSC sind zwei unterschiedliche Ziele verknüpft worden. Zum einen der ‚Rechner als Forschungsobjekt‘ und zum anderen der ‚Rechner als Forschungsinfrastruktur‘ für Großforschungsprojekte mit heterogenem Nutzerprofil. Zum ‚Rechner als Forschungsobjekt‘ gehört die Entwicklung eines einfachen, robusten und preiswert realisierbaren Kühlsystems, mit dem der Anteil der Kühlung am Stromverbrauch des Rechners unter maximaler Last nur 7% beträgt sowie dem konsequenten Einsatz von Grafik Prozessoren (GPU), die bei geeigneter Programmierung zu einer erheblichen Einsparung von Rechenzeit führen. Der ‚Rechner als Forschungsinfrastruktur‘ hat sich sehr gut etabliert: Am LOEWE-CSC arbeiten 50 Arbeitsgruppen mit über 300 Mitarbeitern an sehr unterschiedlichen Forschungsprojekten, darunter Forschungsverbände mit überregionaler Bedeutung, den vier LOEWE-Zentren: Hic for FAIR, BiK-F, Synmikro, RITSAT, dem Cluster of Excellence Makromolekulare Komplexe (CEF-MC), des Transregio-Sonderforschungsbereich ‚Condensed Matter Systems‘ sowie des Bernsteinfokus ‚Neurotechnologie‘. Die beteiligten Arbeitsgruppen verfügen über ein Drittmittelbudget von über 60 Mio. Euro für die Zeit 2011-2014. In diesem Zeitraum wurden mehr als 400 wissenschaftliche Artikel veröffentlicht bzw. zur Veröffentlichung eingereicht. Dabei wären die meisten Projekte ohne eine ausreichende Hochleistungsrechner-Versorgung nicht durchführbar gewesen.

Hochleistungsrechner SKYLLA

JLU Gießen



Der Hochleistungsrechner SKYLLA der Justus-Liebig-Universität Gießen prägt seit der Anschaffung im Jahr 2009 das wissenschaftliche Rechnen in Gießen, welches durch den Einsatz von Landesmitteln und Mitteln der Hochschule ermöglicht wurde. Durch die Ausbauten in den Jahren 2010 und 2011 kann SKYLLA mittlerweile eine Vielzahl von universitären Nutzern mit Hochleistungs-Rechenleistung versorgen. Dies umfasst regelmäßige Nutzer aus Fachgebieten mit traditionell starkem Rechenbedarf wie Chemie und Physik, aber auch vermehrt Nutzer aus anderen Fachgebieten wie Psychologie, Biologie, Umweltmanagement, Agrarwissenschaften, Geographie, Wirtschaftswissenschaften und Sportwissenschaften. Zusätzlich gibt es auch Nutzer der Technischen Hochschule Mittelhessen. Das wissenschaftliche Einsatzgebiet von SKYLLA ist sehr breit gefächert von der Untersuchung der Grundbausteine der Materie über die Analyse der Gehirnaktivität bis hin zum Klimawandel. Darin enthalten ist zum Beispiel die Plasmasimulation, bei der ein Plasma im Inneren eines Ionentriebwerks simuliert wird. Die dabei gewonnenen Ergebnisse helfen, die grundlegenden physikalischen Prozesse zu verstehen und die Ionentriebwerke für zukünftige Raumfahrtmissionen zu optimieren. Weitere Projekte beschäftigen sich mit der Natur der chemischen Bindungen. Dazu werden komplexe Berechnungen mittels moderner quantenchemischer Methoden durchgeführt. Weiterführende Informationen zu diesen und weiteren Projekten finden Sie auf der SKYLLA-Homepage. Die Hardwarearchitektur von SKYLLA basiert auf 86 Mehrkern-Rechenknoten mit insgesamt 992 Kernen (AMD) und im Mittel 2,3 GB Hauptspeicher pro Kern. Sie erreicht damit eine theoretische Peak-Performance von 9,3 TFLOPS, wobei die Abwärme mittels Wasserkühlung abgeführt wird. Die Kommunikation erfolgt mit Infiniband (4xDDR). Weiterhin erlaubt ein paralleles Dateisystem (FhGFS) mit 18TB Kapazität das schnelle Verarbeiten großer Datenmengen. Die Rechenknoten werden mit CentOS betrieben, das Management der Rechenjobs erfolgt durch SGE.

Kassler Linux-Cluster

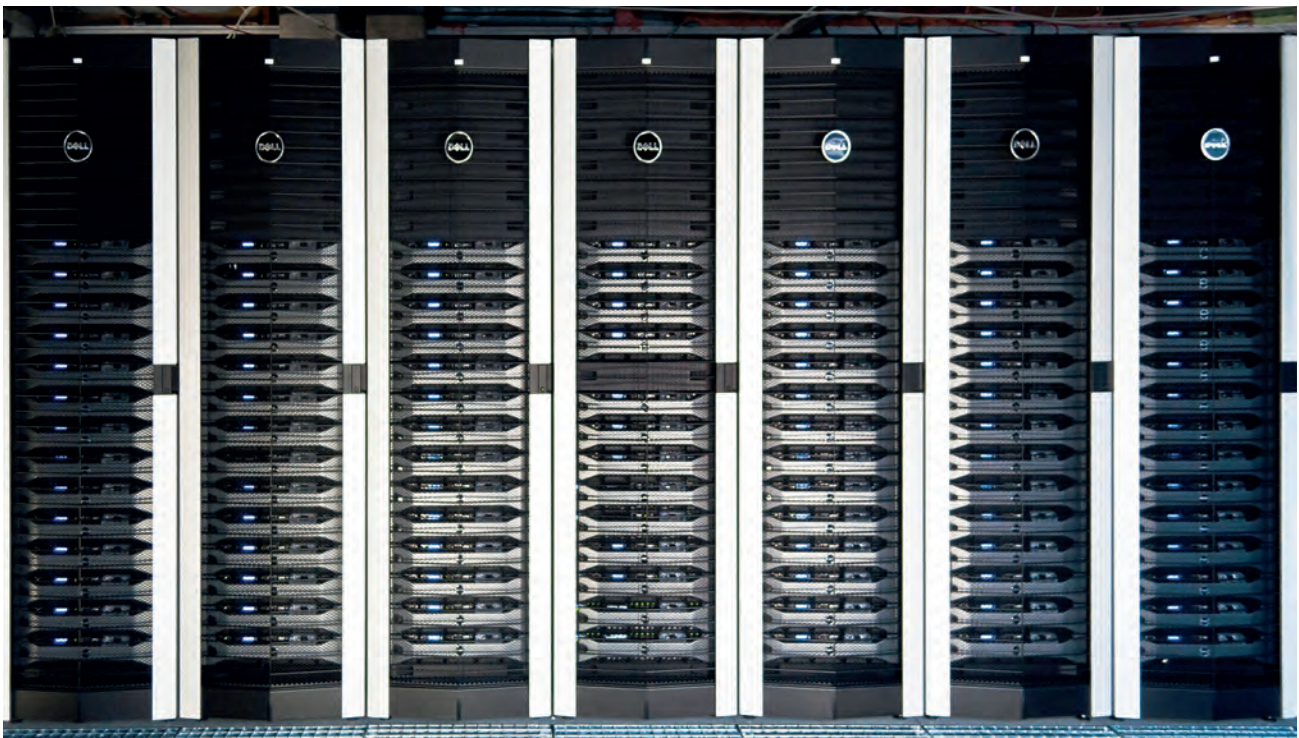
Universität Kassel



2012 und 2013 wurde der Kasseler Linux Cluster mit Unterstützung durch die Deutsche Forschungsgesellschaft (DFG) und das Hessische Ministerium für Wissenschaft und Kunst auf 182 Knoten mit 4068 CPU-Kernen ausgebaut, die mit Infiniband vernetzt sind. Mit diesem Ausbau wurde die Einführung von Scientific Linux 6 als Betriebssystem im Cluster und auf den Arbeitsplätzen verbunden. Ferner wurde der Ressourcenmanagers Torque/PBS durch SLURM ersetzt und damit eine Optimierung des Scheduling für Forschung und Lehre erreicht, sowie die Energieeffizienz deutlich verbessert. Die zusätzliche Nutzung von IP over InfiniBand erlaubt nun auch eine vollständige Portierbarkeit von Programmen aus Entwicklungsumgebungen in die produktive InfiniBand-Umgebung. Gegenwärtig wird der Cluster von etwa 60 Nutzern aus den Fachbereichen Mathematik und Naturwissenschaften, Maschinenbau und Elektrotechnik/Informatik zu etwa 80 Prozent ausgelastet und unterstützt die Forschung in den Feldern Hydrodynamik, Festkörpermechanik, Photonik, Nano-Elektronik, Umweltforschung, Festkörperphysik, Nanostrukturen, Magnetismus, Ultrakurzzeitphysik, Dynamik komplexer Systeme, Knowledge Engineering, Datenflusssimulation, Energiemanagement und Ökologische Landwirtschaft.

Marburger Rechen-Cluster MaRC2

Philipps-Universität Marburg



Die Philipps-Universität Marburg betreibt den Hochleistungs-Cluster „MaRC2“, bestehend aus 96 Knoten mit jeweils vier 16-Core Opteron Prozessoren (Interlagos 6276 oder 6376, 2.3 GHz). Jeder Knoten ist mit 256GB RAM und 2x1TB lokalen Festplatten ausgestattet. Die Vernetzung der Knoten erfolgt über QDR InfiniBand. Zur Datenspeicherung dienen zwei cluster-weite Filesysteme mit einer Nettokapazität von jeweils ca. 33TB. Die Beschaffung erfolgte über Landes- und Bundesmittel. Der Cluster wird überwiegend von Wissenschaftlern der Universität Marburg aus den Fachbereichen Physik, Chemie, Mathematik, Informatik, Biologie und Pharmazie genutzt.

Biologie, Medizin und
Neurowissenschaften

bio
med
neur

Glaucophytes/Rhod

Chlorophyta (8)

Charophyta (7)

Liverworts (25)

Hornworts (2)

Lycophytes (1)

Monilophytes (5)

Aktivitätsgetragene neuronale Repräsentation von Vorinformation in der visuellen Wahrnehmung

A. Brodski, M. Wibral

Fachgebiet Neurowissenschaften, Goethe-Universität Frankfurt und TU Darmstadt

Projektförderung
BMBF

Während der Wahrnehmung von visuellen Stimuli greifen wir ständig auf gespeicherte Informationen aus unserer bisherigen Erfahrung zurück. Doch welche neuronalen Mechanismen liegen dem Einfluss von visueller Vorinformation zugrunde?

Visuelle Vorinformationen sind im Allgemeinen als Gedächtnisinhalte in Form von verstärkten synaptischen Verbindungen zwischen Neuronen gespeichert. Um jedoch auf gespeicherte Informationen zurückzugreifen, und um sie für einen folgenden kognitiven Prozess nutzen zu können, müssen die jeweiligen Gedächtnisinhalte in eine Form gebracht werden, die zu anderen Teilen des Hirns übertragen werden kann, um dort für weitere Prozesse zur Verfügung zu stehen. Mit anderen Worten, die synaptisch gespeicherte Information muss als elektrische Hirnaktivität, als aktivitätsgetragener Informationsspeicher bereitgestellt werden. Dieses Bereitstellen von Vorwissen in Form eines aktivitätsgetragenen Informationsspeichers ist in unserer visuellen Wahrnehmung besonders wichtig, da wir hier in Bruchteilen von Sekunden auf all das Wissen zugreifen, das wir im Laufe unseres ‚visuellen‘ Lebens erworben haben, um uns im wahrsten Sinne des Wortes ‚ein Bild von der Welt zu machen‘. In der Vergangenheit war es jedoch schwierig, neuronale Korrelate des aktivitätsgetragenen Informationsspeichers von anderen Prozessen zu unterscheiden, da die entscheidenden Konzepte zur Quantifizierung der Informationsspeicherung in sich ständig verändernden Hirnsignalen fehlten. Eine neue informationstheoretische Methode, ‚local active information storage‘ (LAIS)¹, ermöglicht es nun jedoch solch einen aktivitätsgetragenen Informationsspeicher in den zuständigen Hirnregionen zu lokalisieren und das Vorhandensein über die Zeit zu quantifizieren. Deshalb verwenden wir LAIS, um die zugrunde liegenden neuronalen Korrelate bei der Nutzung von Vorinformationen in visueller Wahrnehmung zu untersuchen.

Wir kombinieren Magnetoenzephalographie (MEG) mit Elektroenzephalographie (EEG) um die neuronale Aktivität während einer visuellen Aufgabe zu erfassen, in der die Verwendung von Vorinformationen essentiell ist, um ein Erkennen des visuellen Stimulus zu ermöglichen. Anschließend werden die neuronalen Quellen mit Hilfe eines zeitaufgelösten Beamformer-Verfahrens² lokalisiert und deren Quellenzeitverläufe rekonstruiert. Anhand der Quellenzeitverläufe kann dann mit Hilfe von LAIS der aktivitätsgetragene Informationsspeicher der einzelnen Netzwerkknoten analysiert werden und mit Hilfe der Transferentropie Methode³ auch die Übertragung dieser Information im Netzwerk der Hirnregionen untersucht werden. Hierfür sind sehr aufwendigen Berechnungen notwendig, die sich momentan noch im Anfangsstadium befinden.

Literatur

1. J.T. Lizier, M. Prokopenko, and A.Y. Zomaya (2012). Local measures of information storage in complex distributed computation, *Information Sciences* 208:39-54.
2. J. Gross, J. Kujala, M. Hamalainen, L. Timmermann, A. Schnitzler, and R. Salmelin (2001), Dynamic imaging of coherent sources: Studying neural interactions in the human brain. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America* 98 (2): 694–699.
3. T. Schreiber (2000), Measuring Information Transfer. *Phys. Rev. Lett.* 85: 461–464.

Introduction

The rational design and engineering of biomolecules can be supported quite often by *in silico* investigations leveraging powerful compute architectures. These rational design choices steer experimental verification experiments and support the research focus synthetic biology at TU Darmstadt. In particular, we a) help our experimental colleagues to avoid unnecessary experiments and save costs, but also b) develop new hypotheses on the molecular mechanisms underlying the living cell, which frequently cannot be investigated experimentally, yet. We used the available system to address several, related questions: - ion channel design and modularity - molecular evolution and designability of biotechnological relevant enzymes

Results

First, we implemented an efficient, parallelized code to assess co-evolutionary measures, such as the mutual information, efficiently on multi-core architectures, especially GPUs. We developed an algorithm and proved its convergence properties, as well as implemented it, using it for publications and theses^{1,2}. This approach allowed us to understand the molecular evolution of ion channels, e.g. like the viral Kcv channel, in detail. From there, we used reduced molecular models and transferable parametrization of these effective theories to scan the „design space“ of various proteins for functional optimization: for ion channels like HCN³ or for DNA repair proteins like Rad54⁴. Detailed methodology development^{5,6} allowed us to analyze simulation results under the special requirements of biomolecular engineering processes - as is, e.g., common in our study program „B.Sc./M.Sc. Biomolecular Engineering“^{7,8}.

References

1. M. Waechter, K. Jaeger, D. Thuerck, S. Weissgraeber, S. Widmer, M. Goesele, K. Hamacher (2014), Using Graphics Processing Units to Investigate Molecular Coevolution, *Concurrency and Computation: Practice and Experience*, 26(6): 1278-1296.
2. M. Waechter (2011), Master thesis: Massively Parallel Computation of Null-Models Describing Molecular Co-Evolution.
3. S. Weißgraeber (2014), PhD thesis: Hyperpolarization-Activated Cyclic Nucleotide-Gated Channels – Structure and Evolution.
4. S. Knorr (2014), PhD thesis: In Silico Strategies to Modulate DNA Damage Response.
5. P. Boba (2011), Diploma thesis: Correlations in Protein Backbones- A Copula Approach.
6. F. Keul (2012), Diploma thesis: Enzymatic Co-Evolution.
7. S. Pape, F. Hoffgaard, M. Dür, and K. Hamacher (2013), Distance Dependency And Minimum Amino Acid Alphabets for Decoy Scoring Potentials, *J. Comp. Chem.*, 34: 10-20.
8. S. Jager (2013), Master thesis: Rationales Design der *Fusarium Solani* Cutinase.
9. H. Cordes (2011), Bachelor thesis: In silico analysis of dynamics and robustness of the glycolysis network based on reduced models.
10. S. Weißgraeber, F. Hoffgaard, and K. Hamacher (2011), Structure-Based, Biophysical Annotation of Molecular Coevolution of Acetylcholinesterase, *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, 79(11): 3144-3154.

Eventually leading to new insight on enzymes: e.g. in (Cordes)⁹ we showed the close function-evolution relation of the omega-loop in acetylcholinesterase (Fig. 1) - an important drug target and involved in several neurobiological processes.

Funding source

DFG HA 5261/3-1F

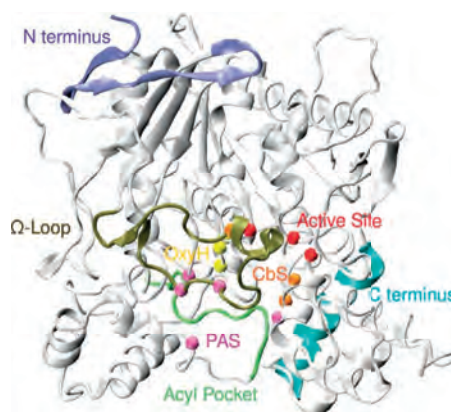


Fig. 1

Outlook

In our work, we tremendously benefit from the available compute resources and the support by the Lichtenberg Rechner and the respective infrastructure of hard-, soft-, and most importantly brainware. We hope to leverage this in the future and collaborate even more on fundamental questions in algorithms and parallelization based upon close collaboration with the groups of Michael Goesele and Andreas Koch, both Dept. of Computer Science, TU Darmstadt. In particular, on-line reparametrization approaches of the above mentioned coarse-grained models will be the next big issues we want to address, so as to have adaptive codes for large(r) biomolecular complexes.

Einführung

Eine erfolgreiche Strahlentherapie mit hochenergetischer Photonen- oder Teilchenstrahlung impliziert eine möglichst genaue Bestimmung der Dosis im Patienten. Ein wesentlicher Punkt dabei ist die Kalibrierung des Dosiswertes des Linearbeschleunigers unter definierten Bedingungen. In der perkutanen Strahlentherapie wird dies mittels Ionisationsdosimetrie realisiert. Verschiedenen nationale (DIN 6800-2 ¹) und internationalen Dosimetrieprotokolle (AAPM TG 51 ², IAEA TRS 398 ³) beschrieben die Grundlagen dazu.

Das Vorhandensein einer Luft gefüllten Ionisationskammer in einem Umgebungsmaterial führt zu verschiedenen Fluenzstörungen der hochenergetischen Photonen und Elektronenstrahlung. Eine dieser Störungen, der Verdrängungseffekt, kann auf zwei Arten korrigiert werden: mit einem Korrektionsfaktor oder eine Verschiebung des Detektors in den effektiven Messort (EPOM). Dies bedeutet dass die über das sensitive Volumen der Kammer gemittelten Ionisationen nicht dem Referenzpunkt sondern dem sogenannten effektiven Messort zugeordnet werden.

Methoden

Im Rahmen dieser Studie wurde der EPOM für vier verschiedene Flachkammern und zwei zylindrische Ionisationskammern in hochenergetischer Elektronenstrahlung mittels Monte-Carlo Simulationen bestimmt.

Ergebnisse

Die Positionierung der Kammern mit dem EPOM in der Messtiefe führt zu einem Korrektionsfaktor, der weitgehend tiefenunabhängig ist. Für alle Flachkammern wurde der EPOM für den gesamten Bereich klinischer Elektronenenergien bestimmt. Während für die Advanced Markus Kammer die Position des EPOM mit dem Referenzpunkt der Kammern übereinstimmt, müssen die anderen Flachkammern mehrere Zehntel Millimeter in Strahlrichtung verschoben werden. Für die zylindrischen Kammern ist eine zunehmende Verschiebung des EPOM mit ansteigender Elektronenenergie anzuwenden. Diese Verschiebung ist entgegen der Strahlenrichtung, d.h. von dem Bezugspunkt der Kammern in Richtung des Fokus. Für die höchste Elektronenenergie im Rahmen der Untersuchung ist die ermittelte Verschiebung des EPOM in guter Übereinstimmung mit der Empfehlung gültiger Dosimetrieprotokolle. Für die kleinste Energie zeigt sich eine Abweichung von etwa 30% zu diesen Empfehlungen.

Diskussion

Neben der Bestimmung des EPOM wurde der verbleibende Korrektionsfaktor zur Berechnung der Wasserenergiedosis für alle untersuchten Kammern über den gesamten Bereich der klinischen verwendeten Elektronenenergien berechnet. Die Anwendung der vorgeschlagenen effektiven Messorte führt zu einer Reduzierung der Messunsicherheit bei der Messung von Tiefendosiscurven in klinischen Elektronenfeldern mittels Ionisationskammern.

Literatur

1. DIN6800-2 (2008), Procedures of dosimetry with probe-type detectors for photon and electron radiation - part 2: Ionization chamber dosimetry of high energy photon and electron radiation.
2. P.R. Almond, P.J. Biggs, B.M. Coursey, W.F. Hanson, M.S. Huq, R. Nath, and D.W. Rogers (1999), Aapm's tg-51 protocol for clinical reference dosimetry of high-energy photon and electron beams, Med Phys 26 (9): 1847-1870.
3. P. Andreo, D.T. Burns, K. Hohlfeld, M.S. Huq, T. Kanai, F. Laitano, V. Smyth, and S. Vynckier (2000), Absorbed dose determination in external beam radiotherapy. An international code of practice for dosimetry based on standards of absorbed dose to water, Technical Reports Series TRS-398 (Vienna: International Atomic Energy Agency).

Monte Carlo Simulation of the Neutron Radiation Field around a Medical 18 MV Linac

D. Czarnecki, K. Zink, F. Horst

Fachgebiet Dosimetrie, TH Mittelhessen

Today the majority of cancer radiation therapy treatments are performed at medical electron linear accelerators (linacs). The accelerated electrons can be used directly for irradiation of the tumor or for the generation of highly penetrating bremsstrahlung photons inside a high Z target. The photon radiation field can be formed by primary collimators (jaws) and so called multi leaf collimators (MLC) generally made of tungsten to achieve a good tumor conformity. The use of higher photon energies has some advantages over lower energies such as the better sparing of tissue near the body surface due to a longer dose build-up. However photons with energies higher than ~ 7 MeV can additionally to the interaction with bound electrons undergo inelastic reactions with nuclei. These photonuclear reactions lead to the emission of fast neutrons which contaminate the primary photon field. The neutrons might penetrate through the collimators and deliver out-of-field dose to the patient when electrons with energies over 7 MeV are used for bremsstrahlung generation¹. Furthermore the materials inside the linac head as well as the air inside the treatment room get activated which might deliver dose to the medical employees even when the linac is not in operation. A detailed knowledge of these effects is essential for adequate radiation protection of the employees and an optimal patient treatment.

It is a common method to study the radiation fields of such medical electron linacs by means of Monte Carlo simulations². The most commonly used Monte Carlo code for that purpose is the EGSnrc code which

represents the gold standard in medical physics³. That code treats coupled electron-photon transport and does not include photonuclear reactions. Therefore a simulation of the neutron radiation field as well as the activation is not possible with EGSnrc. For the investigation of the effects caused by these photonuclear reactions a typical linac in high energy mode (Varian Clinac in 18 MV-x mode) as well as the surrounding bunker were modelled and simulated using the Monte Carlo code FLUKA which includes extensive nuclear reaction and neutron transport models additionally to electron-photon transport as well as capabilities for a detailed study of effective dose distributions and activation yields^{4,5}. Obtaining accurate results with low statistical uncertainties by such simulations is practically not feasible on one single CPU due to the complex nuclear reaction models in FLUKA. Therefore parallel computing on a cluster was applied.

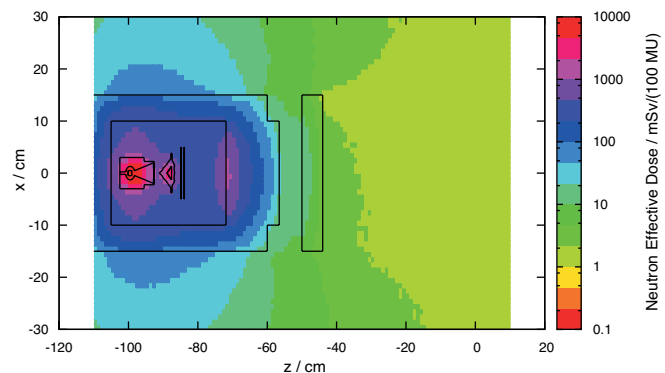


Fig.1 shows the simulated neutron effective dose distribution around the head of the Varian Clinac with closed jaws and MLC's. The patient is located near the isocentre (0/0). The neutrons penetrate through the shielding and collimators and cause an effective dose of some mSv per hundred monitor units (MU) in the plain where the patient would be located during a treatment. That causes additional out-of-field dose which might not be negligible when therapy techniques that require many hundred MU's per fraction as e.g. intensity modulated radiotherapy (IMRT) are applied.

References

1. D.S. Followill, F. Nüsslin, and C.G. Orton (2007), IMRT should not be administered at photon energies greater than 10 MV, Medical Physics 34(6): 1877-1879.
2. D. Sheikh-Bagheri and D.W. Rogers (2002), Monte Carlo calculation of nine megavoltage photon beam spectra using the BEAM code, Medical Physics 29(3): 391-402.
3. I. Kawrakow, and D.W. Rogers (2003), The EGSnrc Code System: Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport, NRCC Report PIRS-701.
4. T.T. Böhlen, F. Cerutti, M.P.W. Chin, A. Fassò, A. Ferrari, P.G. Ortega, A. Mairani, P.R. Sala, G. Smirnov, and V. Vlachoudis (2014), The FLUKA Code: Developments and Challenges for High Energy and Medical Application, Nuclear Data Sheets 120: 211-214.
5. A. Ferrari, P.R. Sala, A. Fassò, J. and Ranft (2005), FLUKA: a multi-particle transport code, CERN-2005-10, INFN/TC 05/11, SLAC-R-773.

Detailed studies of the neutron radiation field and the activation situation inside the treatment room and their consequences for radiation protection of the patients and the medical employees are planned for the future by use of the presented FLUKA model.

D. Czarnecki, W. Sperling, K. Kleinert, P. von Voigts-Rhetz, K. Zink
Fachgebiet Dosimetrie, TH Mittelhessen

In den vergangenen Jahren wurde durch die Entwicklung neuer Techniken in der Strahlentherapie ein enormer Fortschritt verzeichnet. Mit dem Aufkommen fluenzmodulierter Bestrahlungstechniken wie IMRT (intensity modulated radiotherapy) und VMAT (volumetric modulated arc therapy) ist es möglich geworden, die Dosisverteilung dem Zielvolumen (Tumor) deutlich optimaler anzupassen und gleichzeitig die Dosis im umliegenden gesunden Gewebe zu reduzieren. Diese Bestrahlungstechniken, die mit hoch-energetischer Röntgenstrahlung durchgeführt werden, bieten damit die Möglichkeit, die Dosis im Tumor zu steigern, damit die Wahrscheinlichkeit lokaler Rezidive zu verringern, ohne dass die Rate therapiebedingter Nebenwirkungen ansteigt. In diesen Bestrahlungstechniken werden sehr kleine Bestrahlungsfelder eingesetzt für die eine präzise Messung der Wasser-Energiedosis erforderlich ist (Ziel: Unsicherheiten ca. 1%). Einflüsse, welche das Ansprechvermögen von Dosimetern verändern, müssen durch Korrekturfaktoren berücksichtigt werden^{1,2}. Da das Verhalten von Dosimetern von der spektralen Teilchenfluenz abhängig ist und sich damit in unterschiedlichen Bestrahlungsfeldgrößen ändert, müssen diese detektorabhängigen Korrekturfaktoren untersucht und quantifiziert werden. In diesem Projekt wurde der Einfluss der Strahlenqualität sowie der Feldgröße auf das Messsignal von Ionisationskammern und Dioden mittels Monte-Carlo-Simulationen untersucht.

Das Strahlenfeld verschiedener Linearbeschleuniger der drei großen Hersteller Siemens, Varian und Elekta

mit nominellen Energien von 4 MeV bis 20 MeV sowie das Ansprechvermögen von Ionisationskammern und Dioden wurden mittels Monte-Carlo-Methode mit dem Programmpaket EGSnrc/BEAMnrc berechnet^{3,4}. Hierzu wurden anhand der Angaben der Hersteller Monte-Carlo-basierte Modelle der Linearbeschleuniger erstellt. Die Dosimeter wurden anhand von bereitgestellten technischen Zeichnungen der Firma PTW (Freiburg) modelliert.

Korrekturfaktoren zur Wasser-Energiedosismessung mit Ionisationskammern und Dioden für kleine Feldgrößen von $0,5 \times 0,5 \text{ cm}^2$ bis $4 \times 4 \text{ cm}^2$ konnten bestimmt werden^{5,6}. Die Ergebnisse zeigen, dass für die Ionisationskammern der Einfluss des sensitiven Volumens den größten Effekt auf den Korrekturfaktor hat. Zudem konnte gezeigt werden, dass nicht abgeschirmte Dioden am besten für die Dosimetrie kleiner Felder geeignet sind. Des Weiteren wurde der Einfluss des Ausgleichsfilters auf Strahlenqualitätsindikatoren und das Ansprechvermögen von Dosimetern untersucht. Teilergebnisse wurden bereits auf Fachtagungen präsentiert⁷⁻⁹. Die Ergebnisse zeigen eine unterschiedliche Abhängigkeit des Korrekturfaktors für ausgleichsfilterfreie und konventionelle Linearbeschleuniger als Funktion der Strahlungsqualität. Dies ist vermutlich zurückzuführen auf die Aufhärtung der Strahlung am Ausgleichsfilter und somit einer veränderten spektralen Photonenfluenz. Zur Klärung dieses Sachverhalts werden in den nächsten Monaten weitere Monte-Carlo-Simulationen durchgeführt werden.

Literatur

1. DIN Deutsches Institut für Normung (2008), Dosismessverfahren nach der Sondenmethode für Photonen- und Elektronenstrahlung, Teil 2: Ionisationsdosimetrie, Deutsche Norm DIN 6800-2.
2. R. Alfonso et al. (2008), A new formalism for reference dosimetry of small and nonstandard fields, *Med Phys*, 35(11): 5179-5186.
3. I. Kawrakow und D.W.O. Rogers (2000), The EGSnrc code system. NRC Report PIRS-701, NRC, Ottawa.
4. D.W.O. Rogers, B. Walters und I. Kawrakow (2001), BEAMnrc users manual, NRC Report PIRS 509, Ottawa.
5. D. Czarnecki und K. Zink (2014), Corrigendum: Monte Carlo calculated correction factors for diodes and ion chambers in small photon fields. *Physics in medicine and biology*, 59(3): 791-794.
6. D. Czarnecki und K. Zink (2013), Monte Carlo calculated correction factors for diodes and ion chambers in small photon fields. *Physics in medicine and biology*, 58(8): 2431-2444.
7. D. Czarnecki, P. Von Voigts-Rhetz und K. Zink (2014), A study on ionization chamber perturbation corrections in flattening filter free beams. In: 3. Ländertagung der ÖGMP, DGMP und SGSMP, Zürich.
8. D. Czarnecki, P. Von Voigts-Rhetz und K. Zink (2014), TH-E-BRE-06: Challenges in the Dosimetry of Flattening Filter Free Beams. *Medical Physics*, 41, 566.
9. D. Czarnecki, K. Kleinert, W. Sperling und K. Zink (2013), Herausforderungen in der Dosimetrie – Flattening-Filter-Freier Linearbeschleuniger – eine Monte-Carlo basierte Untersuchung. In: 44. Jahrestagung der Deutschen Gesellschaft für Medizinische Physik, Köln.

Potential Barriers to Gene Flow in the Endangered European Wildcat (Felis silvestris)

S. Hartmann, K. Steyer, R. Kraus, C. Nowak

Fachgebiet Naturschutzgenetik, Senckenberg Gesellschaft

The European wildcat (*Felis silvestris silvestris*) is protected and needs conservation actions in many countries in Europe. The severe population declines in the 19th century lead to extinction or at least isolation accompanied by population bottlenecks in most parts of its range. Also in Germany, habitat suitable for wildcats is judged to be highly fragmented. We thus investigated fine-scale genetic structure of wildcat populations in Central Germany across two major potential barriers, the Rhine River with its valley and a major highway, by the analysis of 260 hair and tissue samples collected between 2006 and 2011 in the Taunus and Hunsrück mountain ranges (3,500 km² study area). With 14 microsatellite loci we found 188 individuals in our sample, which displayed significant genetic substructure in the study area. Both the Rhine River and the highway were identified as significant barriers to gene flow. The river seems to have a long-term effect with genetic differentiation. Estimates of current gene flow and relatedness across the two barriers indicated a similar or even stronger barrier effect to ongoing wildcat dispersal of the highway. Despite these barrier effects, we found evidence for the presence of recent migration across both the river and the highway.

The study of migration was particularly aided by making use of a coalescent modeler called migrate-n. This software suite calculates coalescence trees from genetic data of individuals within and between populations. In this way the partitioning of genetic diversity is modelled through time and migration events between populations are inferred. Multi-population models become impossible to solve exactly and Bayesian statistics is used to approximate parameter values in the complex solution space. Arriving at the optimal solution of the coalescence tree requires Monte-Carlo Markov-chain implementations of the Bayesian algorithms. The Markov-chain needs to explore a vast parameter space and approaches the global maximum of posterior likelihood by continuously updating its parameter values. To avoid getting trapped in local maxima and miss the global maximum, it is important to run many independent chains in parallel. The CSC cluster FUCHS has implemented a „message parsing interface“ (mpi) to facilitate the process of computing many coalescence trees in parallel. This offered us the possibility to estimate migration rates with very high precision in a rather short runtime.

The results of our analyses suggest that although wildcats have the capability of dispersal across major anthropogenic and natural landscape barriers, these structures still lead to an effective isolation of populations as reflected by genetic analysis. Our findings show that currently ongoing national strategies of wildcat conservation aiming for large scale habitat connectivity are important and will be successful in connecting even more the currently fragmented wildcat habitat.

Systembiologische Analysen mit dem Moos *Physcomitrella patens*

F. Donges, K. Ullrich

Fachgebiet Zellbiologie, Philipps-Universität Marburg

In Zeiten des „next-generation-sequencing“ sind komparative genomische Analysen nicht mehr auf eine geringe Anzahl an Spezies beschränkt, da quasi monatlich neu sequenzierte Genome veröffentlicht werden. Stattdessen ermöglichen frei verfügbare Sequenzdatensätze die evolutionäre Analyse von verschiedensten Spezies in einem Speziesbereich, der sowohl nah als auch fernverwandte Arten mit einschließt. Im Zuge des Projekts „Systembiologische Analysen mit dem Moos *Physcomitrella patens*“ wurden sowohl Genom- als auch Transkriptomdaten verwendet, um den phylogenetischen Ursprung von *Physcomitrella patens* Genen herauszufinden. Neben frei verfügbaren Datensätzen lagen uns noch nicht veröffentlichte Daten des „One thousands plants (1KP) Projects“ (www.onekp.com) vor, um die Speziesdichte innerhalb der Moose zu erhöhen und zusätzlich Genomduplikationen innerhalb der Moose zu bestimmen. Das Genalter einzelner *Physcomitrella patens* Gene wurde mit der Hilfe von einem vorhandenen phylogenetischem Baum¹ und phylostratigraphischen Methoden² bestimmt. Hierzu wird zunächst eine individuelle phylostratigraphische Karte von *Physcomitrella patens* erstellt (Abb. 1). Nach rechenintensiven Sequenzvergleichen³ werden die Gene

mittels eigens entwickelter python Skripte in einzelne Phylostrata (PS) einsortiert und erhalten damit einen Zeitstempel. Dieser Zeitstempel bzw. das Genalter kann dann genutzt werden, um Genexpressionswerte oder andere Merkmale der Gene zu korrelieren, wie es an anderer Stelle schon gezeigt werden konnte⁴. Zusätzlich können die Ergebnisse auch helfen die Evolution von einzelnen Genfamilien der Moose zu entschlüsseln. Für diese Analysen werden Sequenzabgleiche mit Genpositionen auf den einzelnen Chromosomen zusammengeführt, um zunächst syntenische Bereiche zu finden. Diese Information über orthologe Proteine kann dann wiederum mit dem Genalter korreliert und in chromosomweiten Abbildungen visualisiert werden (circos.ca). Die Analyse konnte zeigen, dass innerhalb von *Physcomitrella patens* eine Vielzahl speziesspezifischer Gene „orphan genes“ vorliegen, die nicht in anderen Moosen vorhanden sind. Für einen Teil dieser „orphan genes“ konnten andere Forschergruppen bereits eine Funktion entschlüsseln⁵, für andere Gene im Organismus steht diese Aufgabe noch aus und muss in weiteren Studien geklärt werden. Die Analyse der Genomduplikationen innerhalb der Moose deutet auf einen Anreicherung von Duplikationsevents vor 70 Millionen Jahren hin, wie sie aus anderen Veröffentlichungen schon vorhergesagt wurde⁶. Dieser phylostratigraphische Ansatz ist natürlich nicht auf das Moos *Physcomitrella patens* beschränkt und wird in Kooperation mit Ivo Grosse von der Martin-Luther Universität Halle (Saale) in einem kritischen Licht beleuchtet, um die Gruppierung in die einzelnen PS zu optimieren und biologisch zu verifizieren. Ziel ist es anhand der gefundenen Ergebnisse Schlüsselereignisse innerhalb der Evolution von Landpflanzen zu detektieren und mit dem ersten Erscheinen von Genfamilien innerhalb bestimmter Spezies in Einklang zu bringen.

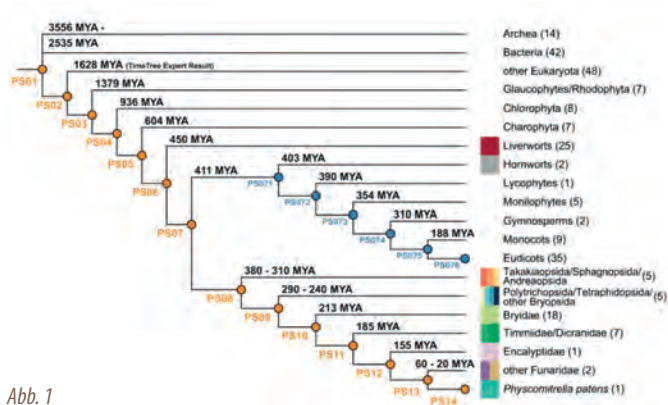


Abb. 1

Literatur

1. A.E. Newton and R. Tangney (2007), *Pleurocarpus Mosses: Systematics and Evolution*, Chapter: 17, Publisher: CRC Press: 337-366.
2. T. Domzset-Lozo, J. Braikovic, and D. Tautz (2007), A phylostratigraphy approach to uncover the genomic history of major adaptations in metazoan lineages. *Trends in Genetics* 23: 533-539.
3. S.F. Altschul, W. Gish, W. Miller, E.W. Meyers, and D.J. Lipman (1990), Basic local alignment search tool. *Journal of molecular biology* 215: 403-410.
4. M. Quint, H.G. Drost, A. Gabel, K.K. Ullrich, M. Bönn, and I. Grosse (2012), A transcriptomic hourglass in plant embryogenesis. *Nature* 490: 98-101.
5. A.K. Beike, D. Lang, A.D. Zimmer, F. Wüst, D. Trautmann, G. Wiedemann, P. Beyer, E.L. Decker, and R. Reski (2015), Insights from the cold transcriptome of *Physcomitrella patens*: global specialization pattern of conserved transcriptional regulators and identification of orphan genes involved in cold acclimation. *New Phytologist* 205: 869-881.
6. K. Vanneste, G. Baele, S. Maere, and Y. Van de Peer (2014), Analysis of 41 plant genomes supports a wave of successful genome duplications in association with the Cretaceous-Paleogene boundary. *Genome Research* 24: 1334-1347.

Chemie und
Materialwissenschaften

chemie
materie



Atomistic Computer Simulations of Amorphization in Metal/Metallic-Glass Multilayer Systems

T. Brink, D. Şopu, K. Albe

Fachgebiet Materialmodellierung, TU Darmstadt

Funding source

DFG

Metals show a strong tendency to form crystalline, i.e., ordered phases. For unalloyed metals, the thermodynamically stable phase is always crystalline. Amorphous metal samples can be synthesized by „freezing“ them in the disordered state. This can be achieved for example by employing high cooling rates or depositing atoms with high energies or velocities. The resulting amorphous state is metastable. This metastable state can be made more favorable, although not stable, by alloying. This material is then called a metallic glass. Apart from these amorphization processes driven by kinetic reasons, there are a few circumstances in which metals amorphize for energetic reasons. A well-known example is the interface between two different crystal phases: The order of the two phases is incompatible, making a sharp interface of two adjacent crystals energetically very unfavorable. The interface becomes disordered in a process called solid state amorphization (SSA).

Due to their rarity, amorphous metals are interesting phases from a theoretical standpoint, and may well be useful for novel or improved practical applications. Amorphous glass/iron multilayer systems, e.g., are promising candidates for magnetic tunnel junctions.¹ One recently discovered way of synthesizing such a system was developed by Ghafari et al.: By sputtering iron on a metallic glass substrate, they obtained a thin amorphous film of iron, as long as the film was not too thick.² Usually, iron will not be stable in an amorphous state, even if sputtered on an already disordered substrate. The question of interest is if the observed process is simply due to the conditions of the deposition process, or if

the reasons for the amorphization of iron are energetic. To that end we conducted molecular dynamics computer simulations using the software LAMMPS. We chose a simple model system of a Cu-Zr based metallic glass with an embedded copper nanolayer. Just like iron, copper has a very strong tendency to form ordered phases.

The simulation setup is shown in figure 1 on the left: We embedded crystalline copper nanolayers (Cu) of different thickness in the metallic glass (MG). By starting from a crystalline state, we can exclude that any transformation is due to deposition conditions that freeze the copper in an disordered state. Instead, any SSA-like effect must be due to energetic reasons. It can be seen in the three simulation snapshots on the right of figure 1, that a thin film of copper will indeed amorphize. We found a critical thickness of about 1 nm, above which the copper will stay crystalline. The order of magnitude of this number agrees with the experiments by Ghafari et al.² The reason for the phase transition is the interface energy: Despite the fact that there is no interface between two mismatched crystals, the glass-glass interface energy is lower than the crystal-glass interface energy. This can compensate the unfavorable amorphous copper phase up to a critical thickness.³

Using computer simulations, we could prove that the amorphization in the presented composite system is energetically driven. It stands to reason that this phenomenon also appears in different metallic multilayer systems. Due to the energetic nature of the transition, the synthesis of these systems should be easily achievable.

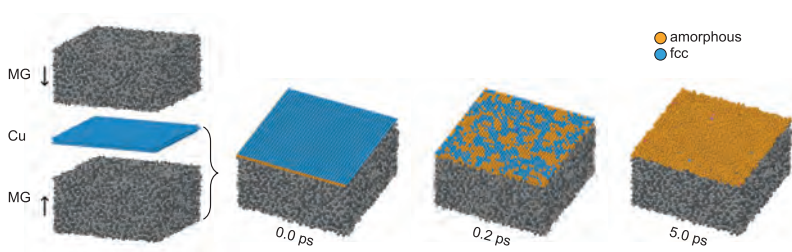


Fig. 1:

Solid state amorphization of copper. The left picture shows the simulation setup: A copper nanolayer (blue) is inserted into a metallic glass matrix (grey). The three simulation snapshots on the right show a cut through the nanolayer: A thin layer becomes amorphous almost immediately. Disordered copper atoms are shown in orange.

Literatur

1. L. Gao, X. Jiang, S.H. Yang, P.M. Rice, T. Topuria, and S.S.P. Parkin (2009), Increased Tunneling Magnetoresistance Using Normally bcc CoFe Alloy Electrodes Made Amorphous without Glass Forming Additives, *Phys. Rev. Lett.*, 102: 247205.
2. M. Ghafari, H. Hahn, R.A. Brand, R. Mattheis, Y. Yoda, S. Kohara, R. Kruk, and S. Kamali (2012), Structure of iron nanolayers embedded in amorphous alloys, *Appl. Phys. Lett.*, 100: 203108.
3. T. Brink, D. Şopu, and K. Albe (2015), Solid state amorphization of Cu nanolayers embedded in a $\text{Cu}_{64}\text{Zr}_{36}$ glass, *Phys. Rev. B.*, 91: 184103.

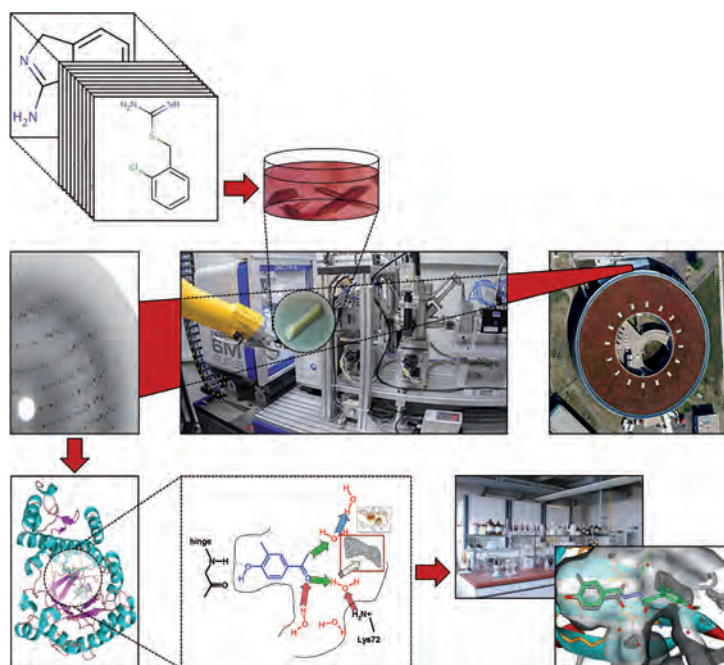
A Generic 3D-Diverse Fragment Library for Crystallographic Screening and Drug Discovery

A. Metz, J. Schiebel, F. Huschmann, U. Müller, M. Weiss, A. Heine, G. Klebe
Pharmazeutische Chemie, Philipps-Universität Marburg

Ligand binding pockets differ regarding their shape and arrangement of potential interaction sites. Thus, we design a general-purpose 3D-diverse fragment library for crystallographic fragment screening that can address a great variety of binding sites while providing particularly suitable starting points for subsequent drug discovery efforts. To facilitate fragment-to-lead evolution after hit identification, this library must adequately cover the accessible chemical space of fragments including substructures of drug-like ligands. A reasonable coverage of chemical space aims at fully exploiting the fact that already a small selection of ~103 appropriate fragments covers a much larger proportion of the overall chemical fragment space (~107 compounds) than a typical high-throughput screening collection (105 – 106 compounds) with respect to the drug-sized chemical space (~1063 compounds, MW < 500 Da). Despite the relatively low affinity of fragments to their target, their high ligand efficiency (affinity divided by number of non-hydrogen atoms) makes them excellent starting points for drug discovery. In addition, fragments often bypass the strict steric requirements for the binding of larger drug-like ligands, thus leading to high hit rates up to 15%. This allows direct crystallographic screening by crystal soaking of a small and preferably target- or structure-based selection of 102 – 103 fragments. To complement our established in-house 364-fragment library,¹ we now compile a set of 1000 high-quality fragments that are particularly suited for crystal soaking, immediate fragment-to-lead evolution, and prepared for computer-aided subset selection and lead design.

This expanded library will be part of the Frag2Xtal service facility for crystallographic fragment screening, which will be available at semi-automated crystallographic beamline 14.2 at the BESSY II storage ring (Berlin). Aiming at a representative coverage of chemical space, all sufficiently available and reasonable fragments (> 250,000 compounds adopting > $1.4 \cdot 10^6$ conformational and molecular states) were clustered into groups of 3D-similar compounds. To this end, > 1012 pairwise molecular similarities were calculated as the 3D overlap of the volume and spatial distribution of interaction features (charges, hydrogen bond donors/acceptors, aromatic ring, etc.) using the program ROCS (rapid overlay of chemical structures).² Based on these similarities, a hierarchical clustering using the software SparseHC³ was carried out at the Marburg HPC cluster MaRC2 taking advantage of its large memory capacity. Selecting favorable representative fragments from each cluster will allow covering the available chemical space with fragments that are particularly suited for crystallographic fragment screening and as starting points for drug discovery projects.

Funding source
BMBF-Projekt
05K13RM1



References

1. H. Köster, T. Craan, S. Brass, C. Herhaus, M. Zentgraf, L. Neumann, A. Heine, and G. Klebe (2011), A Small Nonrule of 3 Compatible Fragment Library Provides High Hit Rate of Endothiapepsin Crystal Structures with Various Fragment Chemotypes, *Journal of Medicinal Chemistry*, 54, 7784–7796.
2. fastROCS, OpenEye Scientific Software. Santa Fe, NM, USA, URL: www.eyesopen.com
3. T.D. Nguyen, B. Schmidt, and C.K. Kwok (2014), SparseHC: a memory-efficient online hierarchical clustering algorithm, *Procedia Computer Science*, 29: 8-19.

O. Lenchuk

Fachgebiet Materialmodellierung, TU Darmstadt

Funding source

DFG in the frame of the research unit 727 „Beyond Ni-based Superalloys“

Nickel-based superalloys, traditionally used to sustain the most stressed parts of turbine blades, have a limited service temperature (around 1000 °C).^{1,2} Applying materials with higher melting points would allow to operate these components with increased gas inlet temperatures and to optimize the thermodynamic behaviour leading to a reduction of fuel consumption, emissions and costs. Mo-based alloys combine high strength and stiffness at elevated temperatures with high thermal conductivity and a low coefficient of thermal expansion desired for high-temperature applications.³⁻⁵ Because of their creep and corrosion resistance they bear good prospects to be used in turbine blades.⁶ In order to meet the requirements for the desired applications, other material properties such as ductility and fracture toughness have to be comparable with traditionally used Ni-based superalloys. Experimental studies show that microalloying with Zr is an efficient way to increase the fracture toughness and ductility of Mo⁷ and Mo-based alloys.^{6,8,9} However, the physical origin of this effect is not clear. At this point, total-energy calculations based on the density-functional theory (DFT) are useful for obtaining a detailed understanding of the energetics on the atomic scale.

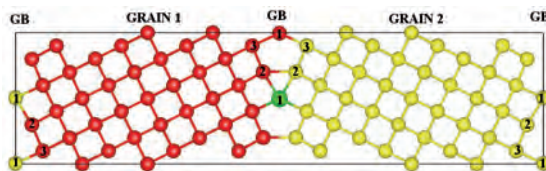


Fig. 1: Atomic structure of Zr alloyed tilt $\Sigma 5(310)[001]$ GB in molybdenum. For distinguishing between Mo atoms that belong to different grains, red and yellow spheres are used. Green sphere represents Zr atom.

Our calculations are carried out in the framework of the density-functional theory (DFT)^{10,11} using the program package VASP.^{12,13} The GGA-PBE¹⁴ functional for describing exchange-correlation interactions is employed and Blöchl's projector augmented wave (PAW) method¹⁵ to define pseudopotentials. The tilt $\Sigma 5(310)[001]$ grain

boundary (GB) is modeled in a periodic supercell of 160 atoms and consists of two equivalent GBs. The calculations are done using a planewave energy-cutoff of 450 eV and the Brillouin zone is sampled with a grid of a $2 \times 6 \times 8$ generated by Monkhorst-Pack method.¹⁶ Atoms are relaxed while keeping the cell parameters fixed until the maximum force acting on each of them was less than 0.05 eV/Å.

The tilt $\Sigma 5(310)[001]$ GB is constructed by tilting the bcc Mo cell by an angle of 36.9° around the [001] axis (see Figure 1). We replace one Mo atom by Zr on each non-equivalent lattice site within the GB and optimize the structure. By comparing the formation energy of Zr in the GB relative to Zr in the bulk, we determine a thermodynamical driving force for segregation. The formation energy is defined as: $H_f = E_{GB+y,Zr} - E_{GB} - y \cdot \epsilon_{Mo_2Zr} + (1 + 2y) \cdot \epsilon_{Mo}$.

Here, $E_{GB+y,Zr}$ and E_{GB} are the total energies of the GB model with and without Zr, respectively. The total energy of bulk molybdenum per Mo atom is represented by ϵ_{Mo} . Mo_2Zr is used as a reference state for Zr, since the pure Mo phase is in equilibrium with the Mo_2Zr phase if the Zr content is increased.¹⁷ Changes in the formation energy of Zr occupying non-equivalent lattice sites within the GB relative to a position in the bulk Mo ($H_f(\text{bulk Mo}) = 0.27$ eV) are -0.51 eV for the position "1", -0.17 eV for the position "2" and -0.15 eV for the position "3". The negative values correspond to the reduction in energy which reveals the existence of a strong driving force for GB segregation. Zr being an oversized alloying additive relative to Mo atom prefers to occupy sites with a sufficient free volume, which is a site "1" (see Figure 1).

Our results reveal the driving force of Zr to segregate to Mo GB. As the next step, the effect of Zr on the GB cohesive strength has to be investigated. To obtain results independent of the GB orientation, another GB configuration should be constructed.

References

1. J. Schneibel et al., Mo-Si-B alloy development, 2005.
2. M. Heilmaier et al., JOM 61, 61 (2009).
3. M. Miller et al., Scripta Mater. 46, 299 (2002).
4. M. Mousa et al., Ultramicroscopy 111, 706 (2011).
5. S. Chakraborty et al., J. Alloy. Compd. 477, 256 (2009).
6. J. Schneibel, P. Tortorelli, R. Ritchie, and J. Kruzic, Metall. Mater. Trans.: A 36, 525 (2005).
7. J. Fan et al., Int. J. Refract. Met. H. 27, 78 (2009).
8. H. Saage et al., Acta Mater. 57, 3895 (2009).
9. M. Krüger et al., Intermetallics 16, 933 (2008).
10. P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, B864 (1964).
11. L. Sham and W. Kohn, Phys. Rev. 145, 561 (1966).
12. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B 54, 11169 (1996).
13. G. Kresse and J. Furthmüller, Comp. Mater. Sci. 6, 15 (1996).
14. J. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. 77, 3865 (1996).
15. P. Blöchl, Phys. Rev. B 50, 17953 (1994).
16. H. Monkhorst and J. Pack, Phys. Rev. B 13, 5188 (1976).
17. H. Okamoto, J. Phase Equilib. Diff. 25, 485 (2004).

Density Functional Theory: Study on the Mechanism of the Chloride-Induced Aufbau of Perchlorinated Cyclohexasilanes

L. Meyer, J.I. Schweizer, M.C. Holthausen

Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Goethe-Universität Frankfurt

Nano- and micrometer-scaled silicon structures are essential components not only in microelectronic but also in photovoltaic and optoelectronic applications. Oligo- and polymeric (perchloro)silanes are suitable precursors for the formation of silicon wires or thin silicon films. The mechanism of the amine-induced disproportionation of perchlorinated silanes affording neo-Si₅Cl₁₂ was recently established.^{1,2} A surprisingly simple preparative procedure, the addition of Si₂Cl₆ to a solution of [nBu₄N]Cl in dichloromethane, leads to the formation of a chloride-complexed cyclic dianion [Si₆Cl₁₂·2Cl]²⁻ and a variety of its silyl-substituted structural analogs, depending on the reaction conditions. The underlying reaction mechanism has been elucidated by DFT calculations (Fig. 1). It reveals the chloride ion itself as a Lewis base to trigger a disproportionation of perchlorinated silanes with a subsequent buildup of dianions containing up to eight silicon atoms.³ The mechanistic insights gained provide the fundament required for the targeted synthesis of oligosilane precursors suitable for microelectronic applications.

Funding source
Beilstein-Institut,
Frankfurt am Main,
NanoBiC
(project eNet)

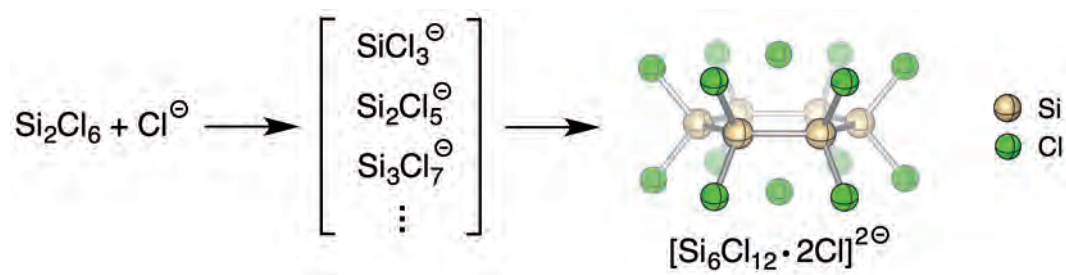


Fig. 1: Chloride induced formation of [Si₆Cl₁₂·2Cl]²⁻.

References

1. F. Meyer-Wegner, A. Nadj, M. Bolte, N. Auner, M. Wagner, M.C. Holthausen, and H.-W. Lerner (2011), The Perchlorinated Silanes Si₂Cl₆ and Si₃Cl₈ as Sources of SiCl₂, Chem.-Eur. J. 17, 4715-4719.
2. J. Tillmann, F. Meyer-Wegner, A. Nadj, J. Becker-Baldus, T. Sinke, M. Bolte, M. C. Holthausen, M. Wagner, and H. W. Lerner (2012), Unexpected Disproportionation of Tetramethylethylenediamine-Supported Perchlorodisilane Cl₃Si-SiCl₃, Inorg. Chem. 51, 8599-8606.
3. J. Tillmann, L. Meyer, J.I. Schweizer, M. Bolte, H.W. Lerner, M. Wagner, and M.C. Holthausen (2014), Chloride-Induced Aufbau of Perchlorinated Cyclohexasilanes from Si₂Cl₆: A Mechanistic Scenario, Chem.-Eur. J. 20, 9234-9239.

Development and Implementation of New Methods for Crystal Structure Determination from Powder Diffraction Data

S. Habermehl, P. Mörschel, P. Eisenbrandt, L. Totzauer, M.U. Schmidt
Fachgebiet Festkörperchemie, Goethe Universität Frankfurt

A new method for the determination of organic crystal structures from powder diffraction data has been developed. The method is based on a new algorithm using cross-correlation functions.

The preferable method for the determination of crystal structures of organic compounds uses diffraction data of a single crystal. In many cases, however, crystallization of a single crystal of sufficient size fails or the characterization of a powder is required, and only powder diffraction data is available. Important examples are industrial organic pigments or pharmaceutical formulations. Crystal structure determinations from powder data generally require indexing of the powder diffraction data as a first step, which relates peak positions in the powder diagram to crystal symmetry and lattice parameters. In practice, however, a considerable percentage of the powder diagrams resists reliable indexing. The main reasons are insufficient crystallinity resulting in broad peaks, or mixtures containing other phases disturbing the indexing procedure. Without prior indexing, most methods for structure solution cannot be applied and the structures remain undetermined.

A new method has been developed, which is also suitable for unindexed powder data, powder diagrams of very low quality and powder diagrams of non-phase-pure samples. The program FIDEL (Fit with DEviating Lattice parameters)¹ implements this method, which is based on a similarity measure using the cross- and auto-correlation functions of a simulated and an experimental powder pattern.² The molecular geometry and relevant degrees of freedom are modelled based on quantum-mechanical³ and force-field calculations⁴ as well as chemical and crystallographic experience. The lattice parameters, molecular position, molecular orientation

and selected intramolecular degrees of freedom are optimized until the similarity measure reaches a maximum. The final stage of a crystal structure characterization based on powder data is a Rietveld refinement. FIDEL provides crystal structure candidates suited for validation and refinement using the Rietveld method. The program can perform an automatic follow-up Rietveld refinement process using TOPAS.⁵

The developed method has shown to be very powerful. The method was used to determine various crystal structures of organic compounds from laboratory X-ray powder data, including the crystal structure of pharmaceutical compounds and organic pigments. This has been shown for structures initially derived from isostructural compounds (e.g. a solvate, hydrate or chemical derivative), or from crystal data measured at a different temperature or pressure. Accuracy, robustness and performance of the approach implemented in FIDEL also allows structure determination by screening of a large number of structure candidates, e.g. from crystal structure predictions by standard force-field methods. FIDEL is capable of indentifying favourable structure candidates with a correct crystal symmetry and molecular packing and can fit them to the experimental data sufficiently accurate for Rietveld refinement.

Recent development focussed on making the systematic structure determination from diffraction data of very poor quality feasible, even if only the chemical composition and some probability of certain space group symmetries is known.

References

1. S. Habermehl, P. Mörschel, P. Eisenbrandt, S.M. Hammer, and M.U. Schmidt (2014), Structure determination from powder data without prior indexing, using a similarity measure based on cross-correlation functions, *Acta Crystallographica Section B*, 70(2): 347-359.
2. R. de Gelder, R. Wehrens, and J.A. Hageman (2001), A generalized expression for the similarity of spectra: application to powder diffraction pattern classification, *J. Comput. Chem.*, 22(3): 273-289.
3. M.J. Frisch et al. (2009), GAUSSIAN09, Revision A.2. Gaussian Inc., Wallingford, USA.
4. M.U. Schmidt and H. Kalkhof (1998), CRYSCA. Clariant GmbH, Frankfurt am Main, Germany.
5. A.A. Coelho (2007), TOPAS-Academic, Version 4.1. Coelho Software, Brisbane, Australia.

Dichtefunktionaltheoretische Berechnungen von Vibrationspektren oberflächen-aktiver Moleküle

M. Kind, A. Terfort

Fachgebiet Chemie, Goethe-Universität Frankfurt

Eines der Hauptarbeitsgebiete unserer Gruppe ist die gezielte Modifikation von Oberflächen. Zu diesem Zweck setzen wir oft selbstanordnende Monolagen (SAMs) ein.

Eine der wichtigsten von uns genutzten Methoden zur Charakterisierung von SAMs und von SAM-bildenden Molekülen ist die Vibrationspektroskopie. Zur Interpretation der experimentellen spektroskopischen Daten berechnen wir die Moleküle und ihre Infrarot (IR)- und Raman-Spektren mittels Dichtefunktionaltheorie (DFT). Im Zeitraum 2013-14 haben wir in drei Studien DFT-Rechnungen eingesetzt:

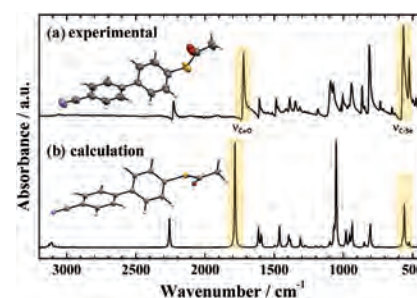
Bei den meistuntersuchten SAMs sind organische Reste mittels eines Schwefelatoms an Metalloberflächen angebunden.¹ Alternativ kann die Anbindung mit dem höheren Homologen Selen erfolgen. Ein kürzlich abgeschlossenes Projekt unserer Gruppe ist die Synthese von aromatischen Selenoacetaten, die als SAM-bildende Moleküle eingesetzt werden können. Vier dieser Moleküle wurden mittels Röntgenstrukturanalyse und Infrarot-Spektroskopie charakterisiert.² Mit Hilfe von DFT-Rechnungen wurden die Strukturen dieser Moleküle diskutiert und ihre charakteristischen Vibrationsbanden (1717 cm^{-1} und 571 cm^{-1}) identifiziert.²

Die Hydrophobizität, Temperaturbeständigkeit und chemische Inertheit fluorierter Alkanthiolat-SAMs auf Metall- oder Halbleiteroberflächen macht diese attraktiv z. B. für den Einsatz als Korrosionsschutz. Wir haben mit Kooperationspartnern von der Universität Heidelberg eine homologe Serie partiell fluorierter Alkanthiole auf Gold- und erstmals auf Galliumarsenid-Oberflächen aufgebracht.^{3,4} Die resultierenden SAMs wurden u.a. mittels Infrarot-Reflexions-Absorptions-Spektroskopie (IRRAS) charakterisiert. Mit Hilfe von DFT-Rechnungen konnten wir aus den IR-Daten Informationen zum Ordnungsgrad,

zur Konformation und zur Orientierung der adsorbierten Moleküle relativ zur Substratoberfläche gewinnen. So konnte gezeigt werden, dass die Moleküle auf den Oberflächen weitgehend aufrecht stehen.^{3,4}

Die stabile Anbindung von Organothiolat-SAMs an Goldoberflächen wurde genutzt, um in einer Studie über Goldsubstrate für oberflächenverstärkte Raman-Spektroskopie (SERS) den „worst case“ zu testen: Zweck derartiger Substrate ist die Verstärkung des Raman-Effektes, um auch sehr kleine Substanzmengen (z. B. Monolagen) detektieren zu können. Wünschenswert ist die Wiederverwendbarkeit der Substrate nach einem geeigneten Recycling. In einer gemeinsamen Studie mit der Universität Heidelberg und dem Paul-Scherrer-Institut (Villigen, Schweiz) konnten wir zeigen, dass selbst kovalent an die Goldoberfläche angebundene Monolagen durch Behandlung mit Ozon rückstandsfrei entfernt werden konnten.⁵ Die wiederholte Aufbringung und vollständige Entfernung verschiedener Thiolat-SAMs auf die Substrate wurde mittels SERS überprüft. Die gewonnenen experimentellen Spektren wurden mit Hilfe von DFT-Rechnungen ausgewertet.

Abb. 1: Beispiel für die in einer unserer Studien untersuchten aromatischen Selenoacetate. Oben: experimentelle, unten: berechnete Struktur. Die für diese Stoffklasse charakteristischen Banden sind im experimentellen (oben) und im berechneten (unten) Infrarot-Spektrum farblich hervorgehoben.



Gegenwärtig verstärken wir in einer Vielzahl von Projekten den Einsatz der Vibrationspektroskopie zur Charakterisierung von oberflächengebundenen Molekülen. DFT spielt bei der Interpretation der experimentellen Daten eine zunehmend wichtige Rolle.

Literatur

1. J.C. Love, L.A. Estroff, J.K. Kriebel, R.G. Nuzzo, and G.M. Whitesides (2005), Self-Assembled Monolayers of Thiolates on Metals as a Form of Nanotechnology, *Chem. Rev.*, 105: 1103-1169.
2. K. Grenader, M. Kind, L. Silies, A. Peters, J.W. Bats, M. Bolte, and A. Terfort (2013), Structural Characterization of a Series of Aryl Selenoacetates, *Journal of Molecular Structure*, 1039: 61-70.
3. H. Lu, D. Zeysing, M. Kind, A. Terfort, and M. Zharnikov (2013), Structure of Self-Assembled Monolayers of Partially Fluorinated Alkanethiols with a Fluorocarbon Part of Variable Length on Gold Substrate, *J. Phys. Chem. C*, 117: 18967-18979.
4. H. Lu, M. Kind, A. Terfort, and M. Zharnikov (2013), Structure of Self-Assembled Monolayers of Partially Fluorinated Alkanethiols on GaAs(001) Substrates, *J. Phys. Chem. C*, 117: 26166-26178.
5. T. Siegfried, M. Kind, A. Terfort, O.J.F. Martin, M. Zharnikov, N. Ballav, and H. Sigg (2013), Reusable Plasmonic Substrates Fabricated by Interference Lithography: A Platform for Systematic Sensing Studies, *Journal of Raman Spectroscopy*, 44: 170-175.

J. Rohrer, K. Albe

Fachgebiet Materialmodellierung, TU Darmstadt

Funding source
DFG SPP 1473
WeNDeLIB

Silicon (Si) is one of the most attractive anode materials for Li-ion batteries.^{1,2} However, despite high specific capacity (~4200 mAh/g), large capacity losses and low cyclability have so far prevented commercialization of Si anodes. The main factors leading to capacity losses are the large volume changes during (de)lithiation and the instability of the solid electrolyte interphase (SEI) layer. Formation of the SEI layer typically results from decomposition of electrolyte components during the first (de)lithiation cycles. In subsequent cycles the SEI then acts as a protective layer that prevents the electrolyte from further decomposition and thus stabilizes electrochemical reactions in Li batteries. A detailed understanding of the formation and composition of the SEI on Si is therefore key to functionalize Si anodes for commercial applications.

In this work we use density functional theory (DFT) calculations to study the interaction of a particular electrolyte component, namely ethylene carbonate (EC) with the most stable Li-covered Si surfaces [Si(100), Si(110) and Si(111)].³ The EC molecule was initially placed on various surface sites with different orientations relative to the surface. Using the projector-augmented plane-wave code VASP⁴ in conjunction with the Perdew-Burke-Ernzerhof⁵ parametrization of the exchange-correlation functional, atomic-structure optimizations were performed as to identify favorable adsorption geometries. For details we refer to (Rohrer and Kaghazchi).⁶

Figure 1.a and b show the energy spectrum of all considered adsorption geometries (after relaxation) and the optimized atomic structure of the lowest-energy configurations on Li-covered Si surfaces. On Si(100) and Si(110), the EC molecule stays intact and enters a polar bond (for details on the electronic structure)⁶. On Si(111), the molecule dissociates into a C₃H₄O₂ fragment that is covalently bonded to Si via a C atom and a Li-O dimer. The formation of a Li-O dimer can be seen as a precursor of Li₂O, Li₂CO₃ or Li₄SiO₄ which have been experimentally identified as constituents of the SEI on Si.⁷ Figure 1.c details the dissociation pathway of EC on Si(111). The dissociation barrier is as low as 220 meV. Prior to the dissociation step an energy of 500 meV is released in the adsorption and because of the low thermal conductivity of Si the barrier can easily be overcome. We have also performed ab initio molecular-dynamics simulations to search for dissociation pathways of EC on the other two facets. However, within simulation times of 20 ps no dissociation was observed at room temperature.

This work contributes to an enhanced understanding of the SEI on Si anodes. In particular we find indications that SEI growth starts as soon as a few Li ions start covering the (111) facets while SEI growth on other facets seems to be retarded. In the future this study may be supplemented and extended by exploring other electrolyte components and other relevant anode surfaces.

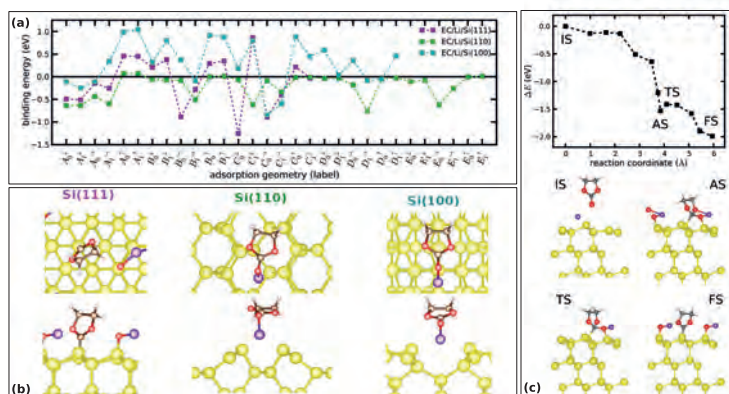


Fig. 1. Adsorption and dissociation of EC at different Si surfaces.

(a) Energy spectrum of various adsorption geometries (arbitrary labeling);

(b) Energetically most favourable adsorption geometries for each surface orientation;

(c) Dissociation pathway of EC on Si(111).

References

1. C.K. Chan, H. Peng, G. Liu, K. McIlwrath, X.F. Zhang, R.A. Huggins, and Y. Cui (2008), Nat. Nanotechnol. 3, 31.
2. U. Kasavajjula, C. Wang and A. J. Appleby (2007), J.Power Sources 163, 1003.
3. P. Kaghazchi (2013), Appl. Phys. Lett. 102, 093901.
4. G. Kresse and J. Furthmüller (1996), Phys. Rev. B 54, 11169; Comput. Mater. Sci. 6, 15 (1996); G. Kresse, D. Joubert (1999), Phys. Rev. B 59, 1758.
5. J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof (1996), Phys. Rev. Lett. 77, 3865.
6. J. Rohrer and P. Kaghazchi (2014), Chem. Phys. Chem. 15, 3950.
7. B. Philippe, R. Dedryvere, J. Allouche, F. Lindgren, M. Gorgoi, H. Rensmo, D. Gonbeau, and K. Edström (2012), Chem. Mater. 24, 1107.

How does Toluene Dissolve Low-Molecular-Weight Polystyrene? —

N. van der Vegt, V. Marcon

Computational Physical Chemistry, TU Darmstadt

Many industrial applications, like nanolithography, gas separation based on membranes, plastic recycling and drug delivery, rely for their performance on a deep knowledge of the mechanisms involved in polymer dissolution. When a solvent gets in contact with a polymer, two distinct processes occur: (I) the solvent diffuses into the polymer and (II) the polymer chains at the surface get solvated. The diffusion of the solvent and the consequent formation of a swollen layer (i.e. a layer with a lower polymer density due to the presence of the solvent) favour the detachment of the chains from the surface.

Recent studies have shown how polymer dissolution can be relevant also for wetting properties. Even if much is understood about the wetting of non-soluble substrates, much is still to be understood in the case of soluble substrates.

Due to the experimental difficulties, the penetration of solvent in thin polymer films is rarely investigated. However the molecular level details of polymer surfaces are accessible also by computer simulations.

We investigated with atomistic simulations¹ the swelling of low-molecular-weight polystyrene induced by toluene, a solvent for polystyrene. The simulation box is shown in the left panel of Fig.1. We overcome the intrinsic difficulties of obtaining an equilibrated atomistically detailed polymer surface structure with a hierarchical simulation approach. Based on a low-resolution model² for polystyrene we have obtained polystyrene chain conformations and chain packing at the surface, which are independent from our initial setup.³ With an inverse-mapping procedure⁴ we then obtained the high-resolution atomic-scale picture of the polymer.

In our simulations we were able to track the real time evolution of the processes involved when a glassy polymer substrate is brought in contact with a solvent. We observed in our simulations that the polymer chains detach from the surface within a few nanoseconds, during which the solvent enters a nanometer thick surface layer. This, extremely rapid, surface swelling is probably favoured by the roughness of the disordered polymer surface. After this initial swelling, both the dilution of the chains due to the penetration of the solvent in the polymer film and the detachment of the chains from the surface take place concurrently.⁵ The schematic time sequence is shown in the right panel of Fig.1.

An accurate quantification of the kinetics of dissolution is at the atomistic scale however not possible. In order to obtain a better statistics and to investigate the dissolution on longer polymer chains, simulations with low-resolution models are necessary. We are currently developing models,⁶ which keep the original relative dynamics of the atomistic system. These models will then be used to quantify the kinetics of dissolution.

Funding source
DFG

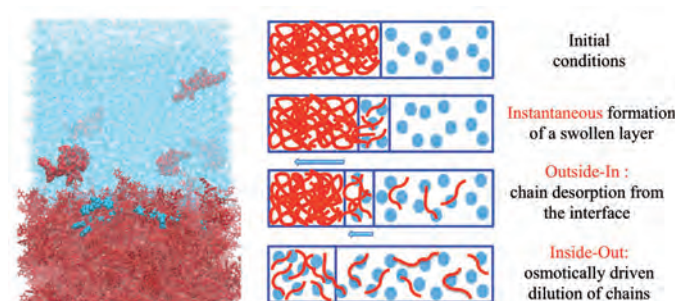


Fig. 1: Left: Simulation box after 60 ns atomistic molecular dynamics simulation. Polystyrene chains are shown in red, toluene molecules in blue. Highlighted are the solvated polystyrene molecules and the toluene molecules that diffused in the polymer matrix. Right: Schematic description of the sequence of phenomena taking place. The simulation box on the left represents the atomistic snapshot of the Outside-In mechanism.

References

1. B. Hess, C. Kutzner, D.V. van der Spoel, and E. Lindahl (2008), GROMACS 4: Algorithms for Highly Efficient, Load-Balanced, and Scalable Molecular Simulation. *Journal of Chemical Theory and Computation* 4: 435-447.
2. D. Fritz, V.A. Harmandaris, K. Kremer, and N.F.A. van der Vegt (2009), Coarse-Grained Polymer Melts Based on Isolated Atomistic Chains: Simulation of Polystyrene of Different Tacticities. *Macromolecules* 42: 7579-7588.
3. V. Marcon, D. Fritz, and N.F.A. van der Vegt (2012), Hierarchical modelling of polystyrene surfaces. *Soft Matter* 8: 5585-5594.
4. D. Fritz, C.R. Herbers, K. Kremer, and N.F.A. van der Vegt (2009), Hierarchical modeling of polymer permeation. *Soft Matter* 5: 4556-4563.
5. V. Marcon V. and N.F.A. van der Vegt (2014), How does low-molecular-weight poly-styrene dissolve: osmotic swelling vs. surface dissolution *Soft Matter*, 10: 9059-9064.
6. G. Deichmann, V. Marcon, and N.F.A. van der Vegt (2014), Bottom-up derivation of conservative and dissipative interactions for coarse-grained molecular liquids with the conditional reversible work method *J. Chem. Phys.*, 141: 224109.

Improvement of Methods for the Comparison of Protein Binding Sites

T. Krotzky, T. Rickmeyer, T. Fober, E. Hüllermeier, G. Klebe
Pharmazeutische Chemie, Philipps-Universität Marburg

Funding source
LOEWE
Synmikro

The detection of structural similarities between protein binding sites is an important challenge in medicinal drug discovery. Drug molecules most often bind in depressions on the surface of a protein, as pictured in Figure 1. Comparing such cavities of different proteins can thus help to understand selectivity considerations or to predict unexpected cross-reactivity of drugs as similar binding pockets will be able to bind the same drug molecules.

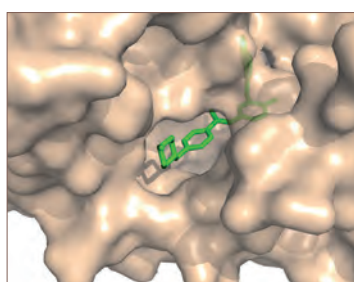


Fig. 1. Illustration of the drug imatinib (brand name Gleevec®, shown in green) bound in a deep cavity of the tyrosine-kinase ABL2. By its binding mode, the drug is able to inhibit the protein and is therefore being used for the treatment of chronic myeloid leukemia.

To this end, Cavbase was developed as a tool for the automated detection and storage of protein surface cavities. The database entries (currently about half a million binding pockets) can also be mutually compared in 3D space, which is computationally very demanding if large amounts of similarities have to be calculated. With the help of the Marburg HPC cluster MaRC2, we were able to exhaustively test different parameterizations of cavity comparison methods newly developed.

In this context, we have developed a novel graph-based comparison method which employs additional information about the shape of the protein surface.¹ This is to compensate the main drawback of most other graph-based models which are solely based on physicochemical properties and hence result in a loss of information about the surface shape. Furthermore, the detection of the maximum common substructure could be accelerated, the most time-consuming step in a comparison. Thus, we proposed a novel and efficient modeling formalism that does not increase the size of the hitherto used graph model, but leads to equal-sized graphs that contain considerably more information and allows for much shorter runtimes.

In a following study, another method called RAPMAD (RAPid Pocket MAtching using Distances) was developed, a new evaluation formalism for Cavbase entries that allows for ultrafast similarity comparisons.² Here, protein binding sites are represented by sets of

histograms that are both generated and compared very quickly. Since RAPMAD attains a speed of more than 20,000 comparisons per second, screenings across large data sets and even entire databases become easily tractable. RAPMAD reaches better success rates than the comparison formalism originally implemented into Cavbase and several alternative approaches developed in recent time, while requiring only a fraction of their runtime. The practical use of the method was proven by a successful prospective virtual screening study that aims for the identification of inhibitors of the NMDA receptor, an important target protein for the treatment of various neurological disorders, such as depression, Alzheimer's disease, or Parkinson's disease.

Finally, it could be shown that the extraction of binding sites in close neighborhood of bound molecules („ligands“) makes later comparisons very simple.³ Methods for comparing binding sites are frequently validated on data sets of pockets that were obtained simply by extracting the protein area next to the bound ligands. Thus, any unoccupied cavity will remain unconsidered and a large amount of ligand-biased shape information is predefined, inclining the subsequent comparisons as rather trivial. We used a very simplistic and shape-biased comparison approach, which stressed that unrestricted and ligand-independent cavity extraction is essential to enable cross-reactivity predictions among proteins and function annotations of orphan proteins. Such an unrestricted pocket extraction can be achieved by using an automated binding site detection algorithm. Also in this case, MaRC2 was utilized for both preparing the half a million pockets and computing similarities with the different evaluated comparison methods.

References

1. Krotzky, T.; Fober, T.; Hüllermeier, E.; Klebe, G. Extended Graph-Based Models for Enhanced Similarity Search in Cavbase. *IEEE/ACM Transactions on Computational Biology and Bioinformatics*, 11(5):878-890, 2014.
2. Krotzky, T.; Grunwald, C.; Egerland, U.; Klebe, G. Large-scale Mining for Similar Protein Binding Pockets: With RAPMAD Retrieval on the Fly Becomes Real. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 55(1):165-79, 2015.
3. Krotzky, T.; Rickmeyer, T.; Fober, T.; Klebe, G. Extraction of protein binding pockets in close neighborhood of bound ligands makes comparisons simple due to inherent shape similarity. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 54(11):3229-3237, 2014.

Insight into Heterogeneous Catalysis through Simulation — on the Atomic Level

F. Heß, H. Over

Fachgebiet Chemie, JLU Gießen

Funding source
Graduierten-
stipendium
der JLU

Industrial chemistry intensively employs chlorine as oxidizing agent in a variety of organic chemical reactions, in order to introduce functional groups into a variety of molecules. Chlorine is required for the production of two thirds of all chemical products. In about 30 % of the products the chlorine is eliminated in the form of HCl during subsequent processing, resulting in chlorine-free chemicals. Although HCl can be used industrially, it cannot be absorbed by the market entirely, resulting in a severe toxic waste problem.¹

A solution to this problem has been proposed in 1874 by Henry Deacon. In the Deacon process, HCl is oxidized with oxygen from air over a copper catalyst, resulting in Cl₂ and water as a by-product. In practice, the Deacon process suffers, however, from lack of catalyst stability and activity. Instead, the Chloralkali process (electrolysis of a sodium chloride solution) is the industrial standard by which most chlorine is produced nowadays. Unfortunately, electrolysis is very energy consuming, sparking new interest in the more energy efficient Deacon process. There has been a recent breakthrough in catalyst design by Sumitomo Kagaku who proposed a ruthenium dioxide (RuO₂) catalyst supported on rutile (TiO₂). This new catalyst exhibits excellent stability and activity.²

This discovery has initiated a series of research projects, seeking to understand the extraordinary activity and stability of the Sumitomo catalyst under the extremely corrosive conditions. The elementary reaction steps of the HCl oxidation have been elucidated by surface science experiments under ultra high vacuum (UHV) conditions.¹ Surface sensitive experiments that allow for detailed insight into the reaction under industrial conditions are difficult to conduct because of the corrosive atmosphere, so that important aspects of the reaction remain a matter of debate.

With all elementary steps being known, atomistic simulations in the form of lattice-based kinetic Monte Carlo (kMC) simulations are possible. Such simulations allow for the modeling of the catalyst surface over a wide range of reaction conditions, employing only the activation energies of the elementary steps and the adsorption energies of reactants (including interaction energies between each other). For the calculation of the adsorption energies, the commercial density functional theory program package VASP is used.³ For the determination of the activation energies, a home-brewed implementation of the Growing String Method (GSM) is employed and for the actual kinetic Monte Carlo simulation, a dedicated program was developed.⁴

Our results confirm that RuO₂ is indeed a very active catalyst for the oxidation of HCl. Extensive chlorination of the catalyst is also not evident, even at high temperatures and high HCl excess. This finding indicates that RuO₂ remains stable and catalytically active, even under harsh reaction conditions, in good agreement with available experimental data. An excess of oxygen in the reactant stream was experimentally found to promote the reaction. Such a promoting effect was also found within the simulations and could be linked to a lower surface chlorination degree under more oxidizing conditions. Interactions between the intermediates seem to govern the reactivity over a broad range of conditions and therefore constitute a very important aspect of the reaction.

Lattice-gas kinetic Monte Carlo simulations are a valuable method in heterogeneous catalysis for modeling the surface in order to learn more about the reaction under conditions which are experimentally inaccessible. Especially when experiments are severely complicated by corrosive atmosphere, simulations are invaluable to gain more insight into and a molecular understanding of a surface reaction.

References

1. H. Over (2012), Atomic-Scale Understand of the HCl Oxidation Over RuO₂, A Novel Deacon Process, *J. Phys. Chem. C*, 12(116): 6779-6792.
2. K. Seki (2010), Development of RuO₂/Rutile-TiO₂ Catalyst for industrial HCl Oxidation Process, *Catal. Surv. Asia*, 4(14): 168-175.
3. G. Kresse and J. Furthmüller (1995), Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set, *Comput. Mater. Sci.*, 1(6): 15-50.
4. F. Hess and H. Over (2014), Kinetic Monte Carlo simulations of heterogeneously catalyzed oxidation reactions, *Catal. Sci. Technol.*, 3(4): 583-598.

Ionenspezifische Effekte auf das Faltungsgleichgewicht von Polyacrylamiden

D. Rosenberger, F. Rodriguez-Ropero, N. van der Vegt
Computational Physical Chemistry, TU Darmstadt

Projektförderung
Exzellenzcluster
Center of Smart
Interfaces
(bis Ende Okt. 2014)

Im Rahmen einer Masterarbeit wird der Einfluss von Ionen auf das Faltungsgleichgewicht von Polyacrylamiden, im Speziellen von Poly(N,N-dimethylacrylamid) (kurz PDMA), untersucht. Polyacrylamide sind kettenartige Makromoleküle, die je nach Rahmenbedingungen (Druck, Temperatur, pH Wert) in wässrigen Lösungen bevorzugt in einem ausgestreckten oder einem zusammengefalteten Zustand vorliegen. Die niedrigste Temperatur bei der ein Übergang zwischen den beiden Zuständen beobachtet wird, nennt sich untere kritische Lösungstemperatur (engl. lower critical solution temperature, kurz: LCST).¹

Salze wie Natriumphosphat und Natriumiodid können diese Temperatur erhöhen oder erniedrigen. Das bereits erwähnte Polyacrylamid PDMA besitzt eine untere kritische Lösungstemperatur von etwa 180°C.² Das bedeutet das Molekül liegt bei Raumtemperatur in einer wässrigen Lösung immer im ausgestreckten Zustand vor. Fügt man nun zu dieser Lösung Natriumphosphat in einer gewissen Konzentration hinzu, wird diese Temperatur stark gesenkt auf ca. 30°C. Wird nun zusätzlich ein zweites Salz wie Natriumiodid hinzugefügt, so sinkt die untere kritische Lösungstemperatur zunächst weiter ab bis ein Minimum erreicht wird. Erhöht man die Konzentration von Natriumiodid weiter, steigt die LCST wieder an auf etwa 80°C. Ein ähnliches Verhalten wird auch beobachtet, ersetzt man Natriumiodid durch andere Salze wie Natriumperchlorat und Natriumthiocyanat. Die experimentellen Ergebnisse sind noch nicht veröffentlicht.

Ziel der Arbeit ist es, ein Verständnis über die ablaufenden Mechanismen auf mikroskopischer Ebene zu erlangen und Erkenntnisse über die Triebkraft hinter den experimentellen Beobachtungen zu gewinnen. Hierfür werden molekulardynamische Simulationen durchgeführt. Um diese Simulationen durchführen zu können, wurden zunächst Modelle für das Polyacrylamid und Natriumphosphat entwickelt. Für Natriumiodid wurde ein in der Literatur veröffentlichtes Modell verwendet.³ Aus diesen Simulationen konnte auf Basis struktureller Untersuchungen folgende Erkenntnisse gewonnen werden:

Natriumphosphat besitzt keine bevorzugten Wechselwirkungen mit dem PDMA Molekül. Um die Fläche für die unvorteilhaften Wechselwirkungen zu verkleinern, faltet sich das Poly(N,N-dimethylacrylamid) in Anwesenheit der Phosphate. Natriumiodid besitzt dagegen anziehende Wechselwirkungen. Im ausgestreckten Zustand kann die Polyacrylamidkette mehr dieser bevorzugten Wechselwirkungen ausbilden, weshalb Nal ein Entfalten der Kette bewirkt.

Zukünftige Untersuchungen zielen auf die Verifizierung der erhaltenen Erkenntnisse. Andere Salze, wie z.B. Natriumisothiocyanat und Natriumperchlorat, zeigen einen ähnlichen Einfluss auf die untere kritische Lösungstemperatur von PDMA wie Natriumiodid. Es gilt die Frage zu beantworten, ob diese Salze ein ähnliches Wechselwirkungsprofil zeigen. Auch muss die Frage beantwortet werden, warum die untere kritische Lösungstemperatur im unteren Konzentrationsbereich des zweiten Salzes neben Natriumphosphat auf ein Minimum abfällt.

Literatur

1. M. Rubinstein and R. H. Colby (2003), *Polymers Physics*. Oxford.
2. F. Fischer, D. Zufferey, and R. Tahoces (2011), *Polymer Int.*, 60: 1259-1262.
3. M.B. Gee (2011), *J. Chem. Theory Comput.*, 7 (5): 1369–1380.

Modellierung des elektrokalendarischen Effekts in bleifreien Relaxor-Ferroelektrika

M. Gröting, K.-C. Meyer, K. Albe

Fachbereich Materialmodellierung, TU Darmstadt

Natrium Bismut Titanat (NBT) gehört zu der Gruppe der dielektrische Materialien (auch Isolatoren genannt). Dielektrika spielen heute in allen Bereichen der Technik eine wichtige Rolle, wobei diese sehr unterschiedlicher Natur sein können, vor allem weil Dielektrika verschiedenste Eigenschaften besitzen können. Sie können beispielsweise piezoelektrisch (eine Verformung des Kristalls erzeugt eine elektrische Spannung, z. B. Drucksensoren) oder pyroelektrisch (eine Temperaturerhöhung erzeugt eine Spannung, z. B. Temperatursensoren) sein. Interessant und relevant für Anwendungen sind auch die Umkehrungen dieser Effekte. So kann eine Verformung durch Anlegen eines E-Feldes erzeugt werden (Aktuatoren) oder eine Abkühlung durch Anlegen eines E-Feldes erreicht werden (elektrokalendarischer Effekt).

NBT gehört zu einer Untergruppe der Dielektrika, den Relaxor Ferroelektrika, kurz Relaxoren. Diese weisen Eigenschaften auf, die zu beiden Kategorien, den Paralelektrika und Ferroelektrika gehören und sind besonders interessant für Anwendungen zum Kühlen und Wärmen, da sie in einem großem Temperaturbereich eingesetzt werden können. Fokus des Projekts ist das Verstehen des elektrokalendarischen Effekts auf atomistischer Ebene in Materialien wie NBT, die eine Perowskit-Struktur aufweisen (chemische Formel ABO_3). Im Gegensatz zu herkömmlichen Materialien wie Metalle und anderen Festkörper, die eine regelmäßige Gitterstruktur (mit einem bestimmten Grad an Defekten) ist die Struktur von Relaxoren noch ungeklärt. Die beobachtbaren Eigenschaften werden oft auf Unordnungen auf der atomistischen Skala zurückgeführt, jedoch ist unklar, was diese Unordnungen hervorruft.

Es ist bekannt, dass NBT bei Raumtemperatur eine rhomboedrische Struktur aufweist, das bei Temperaturerhöhung zu einer tetragonalen wird.¹ Auch ist bekannt, dass die jeweiligen Strukturen durch das Kippen der Sauerstoffoktaeder zustande kommt.^{1,2} Jedoch müssen Unordnungen in den Strukturen vorhanden sein, welche für die beobachtbaren Eigenschaften

verantwortlich sind. Experimentelle Methoden konnten kein einheitliches Bild für die atomistische Konfiguration liefern, weswegen wir in unserer Arbeit versuchen, das Problem mit atomistischen Simulationen zu verstehen. Mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie (DFT) bauen wir verschiedene Defekte in die regelmäßigen Strukturen ein (siehe Abb. 1 mit orthorhombischen Defekten (schwarz) in einer rhomboedrischen Matrix (grau)) und berechnen die jeweiligen Energien. Daraus lässt sich folgern, welche Arten von Unordnungen und Defekten wahrscheinlich sind und welche mit hoher Wahrscheinlichkeit nicht in der Natur vorkommen.³ Mit diesem Wissen können wir Modelle aufstellen, die erklären, was strukturell bei einer Temperaturerhöhung passiert, wenn man von der rhomboedrischen zu der tetragonalen Struktur übergeht.

Zusätzlich ermöglichen uns diese atomistischen Simulationen weitere mesoskopische Simulationen auf größeren Längenskalen zu erstellen, mit deren Hilfe wir die Temperaturänderung des Materials berechnen können, wenn wir ein E-Feld in unsere Simulation einbringen. Ziel ist durch Variieren der Zusammensetzungen (z.B. NBT und einige Prozent eines weiteren Materials) die Temperaturänderungen weiter zu erhöhen und den Effekt zu maximieren.

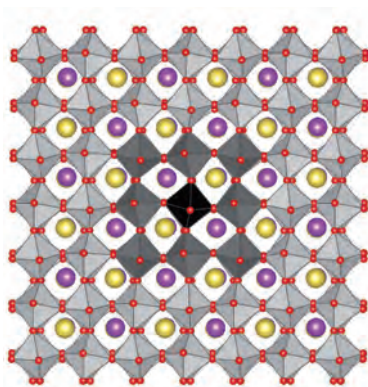


Abb. 1:
NBT Superzelle (Bi: Lila, Na: Gelb, O: Rot) mit rhomboedrischer Oktaeder Verkipfung (grau) und einem orthorhombischen Defekt (schwarz). Auch zum Defekt benachbarte Oktaeder (dunkelgrau) sind aus ihrer ursprünglichen Konfiguration verkippt.

Literatur

1. G.O. Jones and P.A. Thomas (2002), Investigation of the structure and phase transitions in the novel, A-site substituted distorted perovskite compound $Na_{0.5}Bi_{0.5}TiO_3$, Acta Crystallographica Section B, 58(2): 168-178.
2. I. Levin und I.M. Reaney (2012), Nano- and Mesoscale Structure of $Na_{1/2}Bi_{1/2}TiO_3$: A TEM Perspective, Advanced Functional Materials, 22(16): 1616-3028.
3. K.C. Meyer, M. Gröting und K. Albe (2015), Octahedral tilt transitions in the relaxor ferroelectric $Na_{1/2}Bi_{1/2}TiO_3$. Journal of Solid State Chemistry 227: 117-122.

Projektförderung

DFG SPP 1599:
Caloric Effects in
Ferroic Materials:
New Concepts for
Cooling

Funding source
Helmholtz
Gesellschaft

Chalcopyrite $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ (CIGSe) are one of the most successful materials used as absorber layer in thin-film solar cells^{1,2}. The optical and electronic properties of these compounds can be tuned with Ga-In ratio and depend strongly on the presence of defects. Point defects and their properties have been studied extensively.^{3,4} One further type of defect that has captured a great deal of attention are grain boundaries. Their properties are interesting since polycrystalline CIGS-based solar cells overcome their crystalline counterparts.^{5,6} In spite of substantial research efforts, a complete understanding of the physics behind the influence grain boundaries have on the device performance is still lacking. Besides grain boundaries, other extended defects have been identified. This includes twin boundaries, stacking faults and dislocations. However, no much theoretical research has been conducted in order to clarify the role played by dislocations in CIGS even when their presence is undeniable. By means of transmission electron microscopy, high dislocation densities up to 10^{10} - 10^{11} cm^{-2} were found in solar cells with power-conversion efficiencies up to more than 15%.⁷ Contrary to what is found in polycrystalline silicon,^{8,9} the fact that decent efficiencies are reached with such high presence of dislocations is a remarkable property and is necessary to answer which electrical properties of dislocations in CIGSe layers allow for such behavior.

The resources appointed in the Lichtenberg cluster have been used to study the structural parameters, electronic structure and formation energies of the relaxed glide and shuffle dislocation cores with smallest Burgers vectors (b) in a chalcopyrite structure, the screw and the 60° types. To achieve such goal we have used density functional theory (DFT) and a Hubbard corrected local density approximation (LDA+U)¹⁰ approach as implemented in the Vienna Ab-Initio Simulation Package VASP.¹¹

References

1. I. Repins, M.A. Contreras, B. Egaas et al. (2008), *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 16, 235.
2. P. Jackson, D. Hariskos, E. Lotter et al. (2011), *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* 19, 894.
3. S. B. Zhang, S.-H. Wei, A. Zunger, and H. Katayama-Yoshida (1998), *Phys. Rev. B* 57, 9642.
4. J. Pohl and K. Albe (2013), *Phys. Rev. B* 87, 245203.
5. C. Persson and A. Zunger (2003), *Phys. Rev. Lett.* 91, 266401.
6. S. S. Schmidt, D. Abou-Ras, S. Sadewasser et al. (2012), *Phys. Rev. Lett.* 109, 095506.
7. J. Dietrich, D. Abou-Ras, S.S. Schmidt et al. (2014), *Journal of Applied Physics* 115, 103507.
8. C. Donolato (1998), *Journal of Applied Physics* 84.
9. T. Kieliba, S. Riepe, and W. Warta (2006), *Journal of Applied Physics* 100, 093708.
10. S.L. Dudarev, G.A. Botton, S.Y. Savrasov, C.J. Humphreys, and A. P. Sutton (1998), *Phys. Rev. B* 57, 1505.
11. G. Kresse and J. Furthmüller (1996), *Phys. Rev. B* 54, 11169.

The results obtained show that in both CuInSe_2 and CuGaSe_2 , the ternary parent compounds of CIGSe, screw dislocations present distorted bonds but the atoms configurations after relaxation are such that full coordination is maintained. On the other hand, relaxed structures of the 60° mixed dislocations do not show reconstruction and dangling bonds are patent. As expected, DOS of the relaxed core structures show shallow defect states for all structures under study and two deep defect states for the glide 60° dislocation. The defect states were further studied by means of the charge density associated with them. A clear feature observed for all states was localization in the volume surrounding the cores.

Finally, the calculated core formation energies, figure 1, show that for the positive doping regime (p-type), only the glide 60° dislocations in CuInSe_2 prefer a positively charged state. For the same regime and in the most relevant region of it, all the other dislocation types studied here are charge neutral and therefore, electrically inactive.

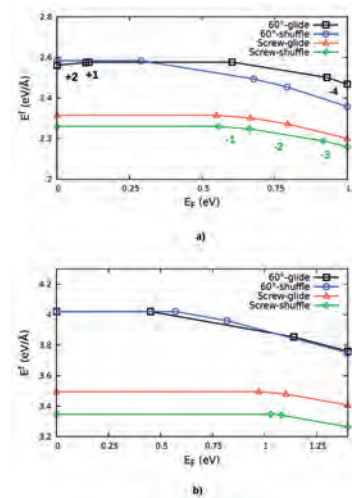


Fig. 1

This results are a first and relevant step towards understanding the apparent harmless nature of dislocations in the $\text{Cu}(\text{In,Ga})\text{Se}_2$ based solar cells.

Metallic glasses (MGs) are of great technological interest because of their high strength and hardness.¹ However, when MGs are exposed to an external load then they fail catastrophically along a single shear band.² On a microscopic scale, shear bands in MGs are considered to be controlled by the activation of shear transformation zones that represents local shearing of approximately 100 atoms.³ To avoid the catastrophic failure in MGs and improve their ductility, predeformed samples and glasses with nanocrystalline inclusions have been studied in the past.^{3,4} The main findings of these studies is that the presence of such microstructural inhomogeneities in the samples prevent the formation of the shear band, which could cause catastrophic failure. Recently, a new class of MGs have been proposed, the so-called metallic nanoglasses (NGs).⁵ Metallic NGs have been produced by consolidating nanometer-sized glassy spheres which are prepared by inert-gas condensation⁵ (Figure 1). Recent experimental studies have shown that metallic NGs present enhanced ductility^{5,6} and ferromagnetism⁷ when compared with MGs. In addition, NGs are promising candidates as materials for medical applications.⁸

The properties of materials are strongly controlled by their microstructure. Despite the improved properties of NGs, their microstructure is not well understood. Atomistic simulations are useful tools to gain insights on the atomic level into the structure of a material. Several microstructural models for NGs have been proposed based on atomistic simulations. Although those models have offered explanations on the origin of enhanced ductility in NGs, a proper structural model which could explain the experimental observations on the structure of NGs, is still lacking. We have performed large-scale molecular dynamics simulations, as implemented in the LAMMPS software,⁹ to investigate the microstructure of the NGs. Our results reveal that NGs are amorphous materials with inhomogeneous microstructure which consists of glassy grains connected with glass-glass interfaces (Figure 1). Structural analysis show that the glass-glass interfaces in NGs are characterized by a lack of short range order compared to MGs and a width of about 1 nm. In addition, they have a different composition than the glassy grains. The present microstructure for NGs is consistent with experimental analysis by means of small-angle X-ray scattering measurements and element mapping data on the Sc-Fe NGs.⁵

In the future, we plan to perform molecular dynamics simulations to study the deformation mechanisms in NGs. It is proposed that the glass-glass interfaces prevent strain localization. We will perform a set of mechanical tests in order to get a better understanding on how glass-glass interfaces in NGs influence their mechanical properties.

Funding source
DFG

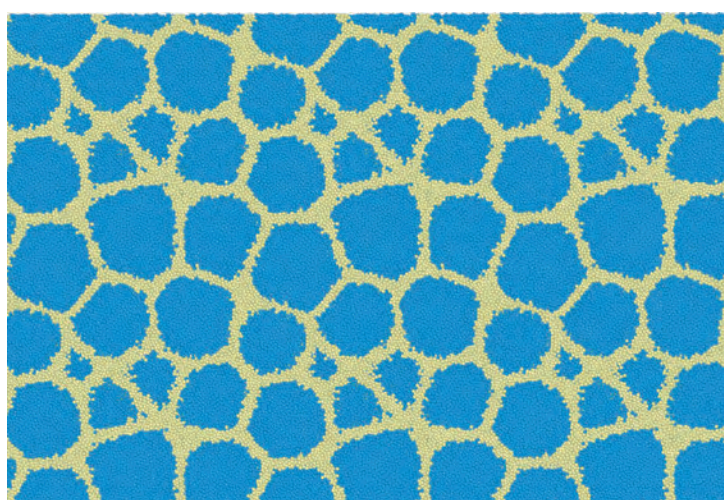


Fig. 1: Microstructure of metallic NGs. Glassy grains are shown with the blue color and glass-glass interfaces with yellow color.

References

1. M. Telford (2004), *Mater. Today* 7, 36.
2. D. Şopu et al. (2011), *Phys. Rev. B* 83, 100202(R).
3. M. Zink et al. (2006), *Phys. Rev. B* 73, 172203.
4. Albe et al. (2013), *Mech. Mater.* 67, 94.
5. J. X. Fang et al. (2012), *Nano Lett.* 12, 458.
6. X. L. Wang et al. (2015), *Scripta Mater.* 98, 40.
7. R. Witte et al. (2013), *Appl. Phys. Lett.* 103, 073106.
8. H. Gleiter (2013) *Beilstein J. Nanotechnol.* 4, 517.
9. URL: <http://lammmps.sandia.gov/>

F. Leroy, F. Müller-Plathe

Theoretical Physical Chemistry, TU Darmstadt

Funding source
DFG

Our research activity deals with interfaces and especially with adhesion and wetting phenomena between liquids and soft or solid substrates. Adhesion of a polymer on a metal, spreading of a paint, self-cleaning of surfaces or liquid flow on a chip for medical diagnosis are typical examples of such phenomena. They are driven by the interactions at the interface between the considered substrate and liquid or polymer. Relatively little is known about the structure of fluids at solid interfaces due to the difficulty to probe experimentally the relevant length scale (i.e. a few angstroms from the surface), although the recent period has witnessed important methodological developments in this direction. From another side, numerous classical molecular simulation works and recent quantum calculations strongly suggest that liquids have a non-ideal structure in the vicinity of attractive surfaces, with oscillations in the mass distribution perpendicular to the interface. By means of molecular dynamics (MD) simulations and statistical thermodynamics, we address the question as to how the fluid interfacial structure affects wetting and adhesion properties.

Our approach is twofold:

1. We quantify the solid-liquid interactions through the work of adhesion. This clearly defined thermodynamic quantity represents the work to separate unit areas of solid and liquid. We have derived the phantom-wall algorithm (see Research Report 2010/2011) and the dry-surface method to calculate the work of adhesion¹ from MD simulations.
2. We relate the fluid structure properties next to the solid surface obtained from MD simulations to the work of adhesion depending on the solid-liquid intermolecular interaction parameters.^{1,2}

This approach has led us to obtain quantitative results with respect to the wetting properties of water on hydrophobic surfaces. We could show that the adhesion properties of water on super-hydrophobic surfaces with nanometer sized structures could be predicted by continuum thermodynamics without resorting to molecular parameters.³ We could also explain and rationalize the experiments that showed that the contact angle of water on monolayer graphene is not strongly different of what it is on graphite.⁴

We discussed why the entropy contribution to the work of adhesion should not be neglected and introduced theoretical frameworks both to understand the origin and to predict the magnitude of this entropy contribution.^{1,2} We also discussed the effect of the size of droplets on their evaporation mechanism.⁵

In our future activity, fluids with increased complexity will be studied with the same approach. We intend to study ionic liquids with a focus on the effect of the relative size between anions and cations on the ionic liquids wetting properties. We will also address the adhesion properties of polymers on metal surfaces and nanowires. We aim to implement our numerical approach to obtain the work of adhesion in the framework of mesoscopic models so that we address polymer nanocomposites.

The connection between the interfacial heat transfer and the work of adhesion at polymer-metal interfaces will be investigated. The relationship between the friction at the solid-liquid interface and the work of adhesion will be addressed to better understand the connection between static and dynamic wetting.

References

1. F. Leroy and F. Müller-Plathe (submitted), Dry-surface simulation method for the determination of the work of adhesion of solid-liquid interfaces.
2. F. Taherian, F. Leroy, and N.F.A van der Vegt (2013), Interfacial entropy of water on rigid hydrophobic surface", *Langmuir* 29, 9807-9813. URL: <http://dx.doi.org/10.1021/la401995v>
3. F. Leroy and F. Müller-Plathe (2012), Can Continuum Thermodynamics Characterize Wenzel Wetting States of Water at the Nanometer Scale?, *J. Chem. Theo. Comp.* 8, 3724-3732. URL: <http://dx.doi.org/10.1021/ct300089j>
4. F. Taherian, V. Marcon, N.F.A van der Vegt, and F. Leroy (2013), What is the contact angle of water on graphene?, *Langmuir* 29, 1457-1465. URL: <http://dx.doi.org/10.1021/la304645w>
5. J. Zhang, F. Leroy, and F. Müller-Plathe (2014), Influence of contact line curvature on the evaporation of nanodroplets from solid substrates, *Phys. Rev. Lett.* 113, 046101. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.113.046101>

Funding source

DFG

In our daily life and many of industrial applications, we usually find fluids which interact with solid substrates. Although a lot of researches have been carried out and new developments have been made to understand the wetting phenomena at the macroscopic scale, little is known at the nanoscale due to the limitation of the experimental methods. Wetting in general can be defined as the process where three phases which at least two of them are fluids are brought together. In most of the situations, a solid surface is wetted by a liquid in the saturated vapor of the liquid. The vapor interface can be also replaced with an immiscible liquid. The interactions between the solid, liquid and the gas phases at the molecular scale determine how the liquid wets the surface. We can see wetting phenomena in our daily life for example the rain droplets on the window of car or dispersing the powders in milk for breakfast, and also in different industrial and biological applications. We can name some of the industrial applications such as reducing friction between moving surfaces by using different liquids, lab-on-a-chip systems,¹ coating by polymers to protect surfaces,² printing applications³ and penetration of liquids into porous environments.⁴ In different applications where properties of a surface are important, very often it is needed to characterize and control the wetting properties of the surface by a liquid. One way to influence the wetting properties of a surface is by changing the surface chemistry, and substantial research has been carried out to control the wetting characteristics of a surface by functionalizing the surface with different chemical groups. The interaction energy of the surface with the liquid and the vapor can be modified with different polar and non-polar groups.

The structure and dynamic properties of liquids at solid surfaces have been extensively studied by experimental and theoretical investigations due to their high interest in different applications. The wetting and drying properties of solid surfaces are controlled by the molecular interfacial properties, which in turn are governed by the interfacial intermolecular interactions. The range of the intermolecular interactions is in the order of few nanometers. Such length scales can now be studied with different experimental methods like atomic force microscopy. However, experimental research of interfacial properties has always been a difficult and challenging task. Beside the experimental techniques, molecular dynamics (MD) simulations can be used to get new insights into the topic of wetting phenomena.

In the last decade, MD simulations have been used to understand different properties of pure liquids, mixture of different liquids and also liquid interfaces. With the development of molecular simulation techniques, it is possible to obtain information at the molecular scale like the orientation of molecules where the solid, liquid and gas phases meet. Such information is impossible or hard to obtain from experiments. In defining the wetting characteristics of a solid surface by a liquid, there are several interaction terms (like the solid-liquid and the liquid-liquid interactions) that are contributing. The contribution of different terms, however, cannot be separated in experiments. Changing one of these parameters will lead to change some other parameters. MD simulations can be used as a tool to investigate the effect of different parameters separately. The behavior of a liquid near a surface depends upon the strength and the range of the intermolecular (liquid-liquid and liquid-substrate) interactions and on the structural properties of the substrate. The main goal of this project is to understand the wetting behavior of a system in terms of the molecular interactions, and identify the contribution of different interactions to the wetting properties by using the computer simulation.

References

1. Y. Yang and J. Liu (2009), Flexibly driving micro flow in a Lab-on-Chip system via dry porous structure. *Forschung im Ingenieurwesen*, 73 (4): 219-229.
2. J. Gray and B. Luan (2002), Protective coatings on magnesium and its alloys - a critical review. *Journal of alloys and compounds*, 336 (1): 88-113.
3. F. Il'darkhanova, G. Mironova, K. Bogoslovsky, V. Men'shikov, and E. Bykov (2012), Development of paint coatings with superhydrophobic properties. *Protection of Metals and Physical Chemistry of Surfaces*, 48 (7): 796-802.
4. J. Bear (2013), *Dynamics of fluids in porous media*. DoverPublications.com.

Peptide Backbone Effect on Hydration Free Energies of Amino Acid Side Chains

T. Hajari, N. van der Vegt

Physikalische Chemie, TU Darmstadt

Funding source

DFG

The driving forces of different biological processes like protein folding and protein-protein association are very important to understand. After more than 60 years of scientific research, these phenomena are not well understood and molecular level mechanism are still lacking. Our research focus is to explore the detail molecular level explanation behind those processes. Proteins are macromolecules and are consist of different types of amino acid residues. So the amino acids are the building blocks to form a long chain polymer or protein. We are mainly interested in understanding the solvation behavior of those amino acid building blocks in water medium as all these biological processes take place in water. There are two kinds of amino acids (polar and nonpolar) which exist in protein. Polar amino acids which interact favorably with water and this type of amino acids likes to see more water around it. Whereas nonpolar amino amino acids does not have favorable interaction with water and avoid water. The reason behind protein folding or forming a compact structure for protein is explained in the following way. As water do not want to see nonpolar amino acids around it, protein folds to a compact structure to hide all nonpolar amino acids from water. Alternative views in literature instead explain based on the hydrogen bonding in peptide backbone. The nature of the interaction between amino acids and water can be quantified by computing thermodynamic quantity like solvation free energy, solvation entropy and solvation enthalpy of amino acids in water. We have estimated these thermodynamic quantities and our work reveals that the role of nonpolar amino acids is less important than what is expected

from previous existing solvation data. Our key observation is that the nonpolar amino acids can interact with water in less unfavorable way than what is known based on different works done in past.¹ Our works provide some new insight on the debate whether nonpolar side-chains plays the major role on protein folding. We also computed the solvation entropy and enthalpy which provide more detail of thermodynamic behavior of these amino acids. We also observed that simple small molecular date is not enough to mimic protein folding.

The ionic solutions of water commonly exist in many biological systems and have huge role in different biological processes. Hofmeister ordered different ions based on their ability to precipitate proteins and hence the ranking of ions depending on their efficiency in precipitating proteins is known as Hofmeister series. The Hofmeister effect is not only limited there, the ion specific effect on water surface tension or the stability of colloids, the viscosity B coefficient of salt solutions, salting out of nonpolar molecules by Hofmeister ions, propensity of ions to stay next to solid surface; all follow similar trends like Hofmeister ion series. So it is clear that there is some common aspect happening in all these different phenomena. We also work on the thermodynamic behavior of different ionic solution of Hofmeister ions next to nonpolar surfaces. These are very useful in understanding the interface behaviors of different ions which help to interpret many chemical processes that occur in water-solid interfaces and also the mechanism behind the Hofmeister effect.

Reference

1. T. Hajar and N.F.A. van der Vegt (2014), Peptide Backbone Effect on Hydration Free Energies of Amino Acid Side Chains, *Journal of Physical Chemistry B*, 118: 13162-13168.

Most research on visual recognition focuses on objects, which are defined primarily by their shape. By contrast, fluids and other deformable materials have highly mutable shapes – visibly influenced by forces and object interactions – that evolve over time. To identify liquids, the visual system must ‘abstract’ those features that are common to different samples, despite radical differences in shape, volume, and surface appearance. Thus, by studying how the brain makes sense of fluids, we not only stand to gain new insights which contribute to our understanding of material perception, but also more general principles of how statistical properties of surfaces are represented.

The dynamic nature of fluids makes it hard to generate controlled stimuli that allow controlled variations to study perception without giving in on physical correctness. Computer generated liquid stimuli provide this flexibility but especially the physical correctness of the simulations comes with high computational costs. There are industrial solutions used in aeronautics and marine engineering and software used in the VFX (visual effects) industry. We use RealFlow 2014 to simulate our liquids, which is developed by Next Limit one of the industry leaders in VFX fluid simulations. Next Limit is a partner in our research network PRISM (Perceptual Representation of Illumination, Shape & Material) and therefore provides us with required licenses and direct support from their development team.

The calculations performed on Skylla at Justus-Liebig-Universität Giessen can be divided in three types of calculations. There are the particle simulations, meshing of the particles and rendering the meshes with optical material properties. The hardware requirements are

different for each process. The particle simulations run best on one single thread with a high clocking speed and large amounts of RAM memory. Using multiple threads will speed up the processes to a certain extent but also introduces variability between threads which can result in incorrect results. Using multiple threads for the meshing process would be beneficial but this is combined with the particle calculations for automation purposes. The rendering process is fully parallelizable. Here it is useful to use all threads available and the costs for memory are low.

The use of Next Limit RealFlow and Maxwell render has brought our stimuli to a new level of realism, which is very important to expose certain behavioral patterns in our perception more distinctively. The increase of detail and photorealism will help to limit the noise introduced in our data by imperfections or unnatural behavior in the computer generated stimuli. The first experiments are currently running with the new stimuli computed on Skylla and the data shows clear differences in properties we associate with liquids with different optical material appearances and viscosities. The cues triggering these associations we would like to study further.

The software is capable of even higher levels of realism but this is currently not utilized because of the increase in computational costs, which with current available hardware would take too long to simulate. Skylla is in computational power a bit outdated especially with the 64-thread limit imposed on a single user account. The performance available for a single user account can nowadays be matched by a single high-end workstation.

Funding source
EU FP7 Marie Curie
Initial Training
Networks,
project PRISM

Reaktive Intermediate - Dispersion

J.P. Wagner, M. Linden, D. Gerbig, P.R. Schreiner
Institut für Organische Chemie, JLU Gießen

Projektförderung
DFG,
Deutsch-Israelisches
Kooperationsprojekt
(DIP)

Kohlensäure. Durch die Entwicklung einer neuen Methode zur Darstellung der molekularen Kohlensäure in der Gasphase mittels Esterpyrolyse konnte gezeigt werden, dass Kohlensäure nicht wie seit über 20 Jahren vermutet in zwei Festkörper-Polymorphen existiert, sondern dass es sich bei dem zunächst postulierten „alpha-Polymorph“ um dessen Monomethylester handelt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde die Konformerlandschaft der Kohlensäure mittels focal-point Analyse (CCSD(T) Energien mit Basissätzen bis zu cc-pV5Z) mit chemischer Genauigkeit ($< 1 \text{ kcal mol}^{-1}$) berechnet. Die resultierenden Ergebnisse stellen die bisher genauesten Berechnungen zu diesem System dar.¹

Ladderane. Durch teils aufwendige ab initio Wellenfunktionsmethoden (MP2, CCSD(T), SCS-MP2) wurden die Dimerisierungsenergien molekularer Leitern auf bis zu CCSD(T)/CBS Niveau ermittelt und mit den Ergebnissen moderner Dispersions-korrigierter Dichtefunktionale verglichen. Die Natur nutzt diese Strukturen in Membranen von Anammox-Bakterien, da sie eine besonders hohe Dichte und nur geringe Durchlässigkeit aufweisen. Es konnte gezeigt werden, dass die besonders starken Dispersionswechselwirkungen die Stabilität der biologischen Membran nachhaltig beeinflussen.²

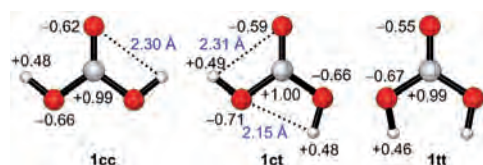


Abb. 1:
Optimierte Struktur der Konformere der Kohlensäure auf CCSD(T)/cc-pVQZ mit natürlichen Ladungen berechnet auf CCSD(T)/cc-pVTZ.

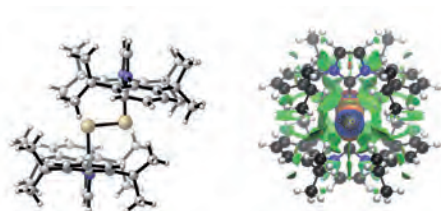


Abb. 3:
NHC-stabilisiertes Disilizium(0), Si=Si, optimiert mit B3LYP D3/6-311G(d,p). Grüne Flächen kennzeichnen Bereiche starker Dispersionswechselwirkungen.

Literatur

1. H.P. Reisenauer, J.P. Wagner und P.R. Schreiner (2014), Angew. Chem. Int. Edit. 53, 11766–11771. Selected as “hot paper” featured on the front cover.
2. J.P. Wagner und P.R. Schreiner (2014), J. Chem. Theory Comput. 2014, 10, 1353–1358.

Niedervalente Hauptgruppenkoordinationsverbindungen. Eine Vielzahl von Stickstoffatom-substituierter, cyclischer Carbene als Liganden in niedervalenten Hauptgruppenverbindungen zeigt wider Erwarten hohe thermische Stabilität. Der Vergleich von Ergebnissen moderner Dispersions-korrigierter Dichtefunktionalrechnungen (B3LYP-D3, M06-2X-D3 und andere) mit jenen weit verbreiteter, unkorrigierter Funktionale zeigt, dass die London-Dispersion einen erheblichen Beitrag zur Stabilität leistet. Entsprechende molekulare Systeme werden bevorzugt Reaktionen eingehen, in denen diese Stabilisierung erhalten bleibt.

Chiral deuterierte Verbindungen. Bei d_6 -Neopentan handelt es sich um das kleinste denkbare Alkan mit quarternärem Kohlenstoff-Zentrum, welches durch gezielten Austausch einzelner Wasserstoffatome durch Deuterium in den Methyl-Positionen über ein stereogenes Zentrum und damit über chirale Information verfügt. Die asymmetrische Synthese von chiral deuteriertem d_6 -Neopentan kann dabei unter anderem mit Hilfe von Zirconocen-basierten Katalysatoren gelingen. Die absolute Konfiguration der entsprechenden Enantiomere wurde spektroskopisch anhand von Messungen des Vibrationszirkulardichroismus (VCD) bestimmt. Gemessenen Spektren wurden dazu den auf B3LYP/aug-cc-pVDZ Niveau berechneten gegenübergestellt.

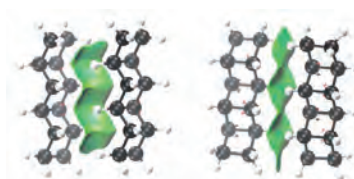


Abb. 2:
Modell der Ladderane in Zellmembranen der Anammox-Bakterien optimiert auf MP2/aug-cc-pVDZ. Grüne Flächen kennzeichnen Bereiche starker Dispersionswechselwirkungen.



Abb. 4:
Enantiomere des chiral deuterierten d_6 -Neopentans. IR- und VCD-Spektren wurden auf B3LYP/aug-cc-pVDZ zum Nachweis der absoluten Konfiguration simuliert.

Structure and Properties of Amorphous LiPON Electrolyte by First-Principles Simulations

S. Sicolo, K. Albe

Fachgebiet Materialmodellierung, TU Darmstadt

Amorphous materials belonging to the family of Lithium Phosphorus Oxynitrides (LiPON) are increasingly popular solid electrolytes for thin-film Li-ion batteries. RF-sputtering of a lithium orthophosphate target in a nitrogen plasma leads to the deposition of amorphous glasses.¹ Besides a fairly high ionic conductivity and very low electronic conductivity, LiPON exhibits remarkable chemical and physical stability to such an extent that its use as a protective layer for cathode materials has been suggested.² Rationalization of the transport properties rests on a valid structural model for these glassy structures, whose simulation represents a main challenge from a computational point of view also because of their non-trivial compositions. The motivation for this study is the desire to assess the structural, electronic and transport properties of an amorphous member of the LiPON family with non-trivial composition and cross-linking. The issue of structure prediction for a given composition is a longstanding problem even for the simplest crystalline solids. The problem is further complicated in the case of an amorphous material, as the potential energy landscape that describes the glassy region exhibits a large number of minima of varying depths. We circumvented the problem by using an evolutionary algorithm (USPEX)³ to find a stable structure for a given composition and subjecting it to ab-initio simulated annealing (VASP)⁴ to create disorder (Fig. 1). In this work we present the results of Density Functional Theory calculations. After characterizing the structural and electronic properties of our material, we addressed the issue of ionic conductivity by calculating the defect formation energies of neutral and charged point defects with respect to two different Li reservoirs, namely a typical anode, metallic lithium, and a typical cathode, lithium cobalt oxide (LCO), (Fig. 2). We found that charged defects dominate over neutral ones, as expected of an ionic conductor. At the interface with metallic lithium, charged interstitials are favored, whereas at the interface with LCO the relative stability of point defects

is reversed and vacancies dominate over interstitials. This trend is consistent with the spontaneous flow of Li ions from the anode (Li) to the cathode (LCO) through the solid electrolyte during the battery discharge. Additionally, the formation of neutral interstitials at the interface with metallic lithium is a competitive process that results in the chemical reduction of LiPON and the disruption of the network compatibly with what experimentally observed⁵. Future studies will address the diffusion of lithium ions across the relevant interfaces with the electrodes and the thermodynamics of side reactions. This tasks imply in turn the investigation of the stability of the interfaces between LiPON and several surfaces of metallic lithium and especially LCO.

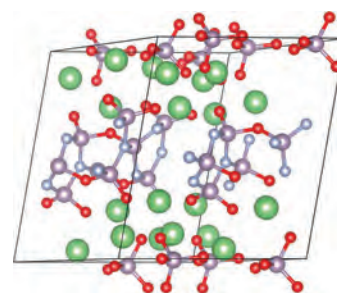


Fig. 1: Structure of LiPON.

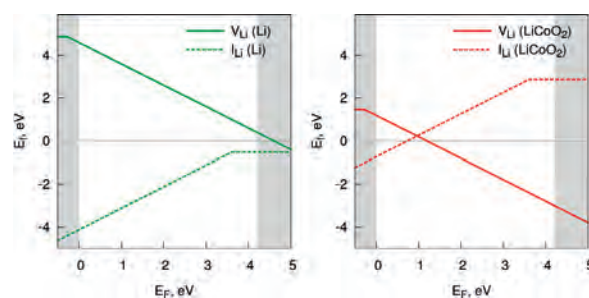


Fig. 2: Defects formation energies as a function of the Fermi level energy with respect to metallic Li (left) and LCO (right). The VBM coincides with $E_F = 0$ and the grey areas represent the valence and conduction bands. The green and red areas locate the estimated positions of Li and LCO Fermi levels, respectively.

References

1. J.B. Bates, N.J. Dudney, B. Neudecker, A. Ueda, and C.D. Evans (2000), Thin-film lithium and lithium-ion batteries, *Solid State Ionics* 135: 33–45.
2. J. Song, S. Jacke, D. Becker, R. Hausbrand, and W. Jaegermann (2011), Stabilization of Thin Film LiCoO₂ Electrode by LiPON Coating, *Electrochem. Solid-State Lett.*, 14 2: A11.
3. A.O. Lyahkov, A.R. Oganov, H.T. Stokes, and Q. Zhu (2013), New developments in evolutionary structure prediction algorithm USPEX. *Comp. Phys. Comm.*, 184: 1172-1182.
4. G. Kresse and J. Furthmüller (1996). Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 54, 11169.
5. A. Schwöbel, R. Hausbrand, and W. Jaegermann (in preparation).

Theoretical Investigation of Electrocyclic Reactions of Siloles

J.H. Wender, K. Falahati, T. Porsch, M.C. Holthausen
Computational Chemistry, Goethe Universität Frankfurt

Funding source
Nanobic

Siloles are five-membered heterocyclic dienes, in which a silicon atom replaces one of the carbon atoms of cyclopentadiene. Silole derivatives find application as building units for σ - and π -conjugated compounds for use in organic electroluminescent devices,¹ and their synthesis, reactions, and properties have been subject to intensive studies.² In an earlier investigation, the 1-chlorosilacyclopentene **1** has been obtained starting from perchlorinated silanes, $\text{Li}[\text{Si}(\text{tBu})_3]$, and 2,3-dimethylbutadiene³ and siloles can readily be obtained from this compound by deprotonation and LiCl elimination. In a recent combined experimental and theoretical study we have shown that the resulting siloles are very reactive and can isomerise, dimerise or be trapped by reagents like cyclohexene or 2,3-dimethylbutadiene, and the mechanisms underlying these reactions have been investigated in detail by means of double-hybrid density functional theory calculations.⁴

Silole **2** can easily isomerise to the more stable silole **3** (Figure 1) via hydrogen shift. Alternatively, it can also dimerise to yield several products: two dimers are formed via Diels-Alder reactions (2+3 and 2+2) and the last one is an head-to-head dimer of **2** and its isomer **3**. This latter, more unusual product is accessible via both singlet and triplet intermediates (Figure 1).

Further, compound **2** can be trapped prior to isomerisation or dimerisation by addition of excess cyclohexene yielding the racemate of the [4+2] cycloadduct. Under similar conditions, the reaction of **2** with 2,3-dimethylbutadiene yields the [2+4] and [4+2] cycloadducts and hence, **2** acts as silene (dienophile) as well as diene. Our results show that both reaction steps occur without activation barriers (Figure 2).

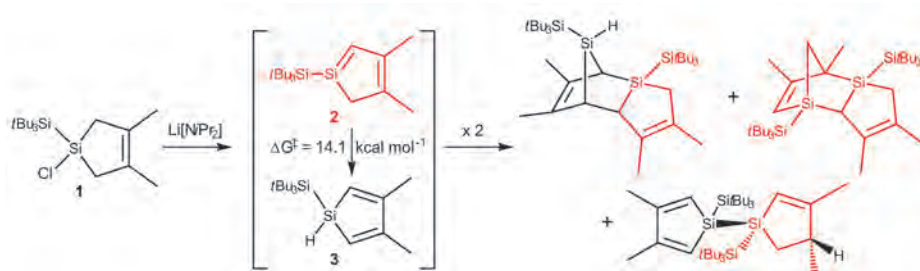


Fig. 1: Formation of silole **2** (and subsequent isomerisation to silole **3**) which can dimerise to three different products.

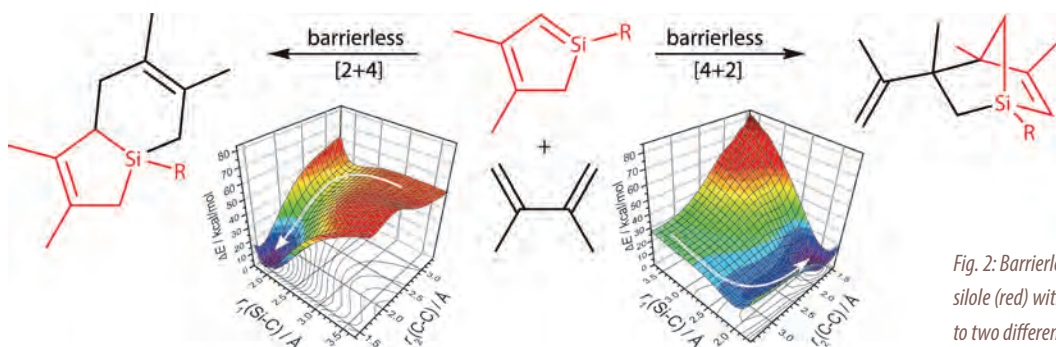


Fig. 2: Barrierless Diels-Alder reaction of the silole (red) with 2,3-dimethylbutadiene can lead to two different products.

References

1. S. Yamaguchi and K. Tamao (1998), *J. Chem. Soc. Dalton Trans.* 22: 3693–3702.
2. J. Dubac, A. Laporterie, and G. Manuel (1990), *Chem. Rev.*, 1 (90): 215–263.
3. F. Meyer-Wegner, A. Nadj, M. Bolte, N. Auner, M. Wagner, M.C. Holthausen, and H.-W. Lerner (2011), *Chem. Eur. J.*, 17 (17): 4715–4719.
4. F. Meyer-Wegner, J.H. Wender, K. Falahati, T. Porsch, T. Sinke, M. Bolte, M. Wagner, M.C. Holthausen, and H.-W. Lerner (2014), *Chem. Eur. J.*, 16 (20): 4681–4690.

Thermodynamic Mechanism of the Osmolyte Effects on the Folding/Unfolding Equilibrium of (Bio)macromolecules in Aqueous Solution

F. Rodriguez-Ropero, N. van der Vegt
Computational Physical Chemistry, TU Darmstadt

Macromolecules in aqueous solution, such as water soluble polymers or proteins, coexist as an ensemble of folded states in equilibrium with an ensemble of unfolded states. This equilibrium can be perturbed either to one or the other state by altering the thermodynamic conditions (temperature or pressure) of the medium or by changing the chemical composition of the solution upon addition of chemical compounds. Chemical compounds that preferentially bind to the folded state are called protective osmolytes and shift the equilibrium towards the folded state. Denaturants on the other hand preferentially bind to the unfolded state and shift the equilibrium towards the unfolded state. The molecular mechanisms that drive preferential binding are important in questions related to protein stability and polymer coil-to-globule transitions; a complete understanding is however still lacking.

Traditionally it has been considered that protective osmolytes are depleted from the macromolecule first solvation shell, leading to entropic stabilization of the folded state. However recent theoretical and experimental studies suggest that protective osmolytes may directly interact with the macromolecule. As an exemplary and experimentally well-characterized system, we have studied poly(N-isopropylacrylamide) (PNiPAM) in water whose folding/unfolding equilibrium shifts toward the folded state in the presence of urea. Based on fully atomistic Molecular Dynamics we show that urea preferentially accumulates in the first solvation shell of PNiPAM driven by attractive Van der Waals dispersion forces.¹

Solvation thermodynamics analysis of the folded and unfolded states discards direct urea/macromolecule interactions as driving force of the folding mechanism. We instead find that entropic penalization of unfolded polymer chains upon increasing urea concentration drives the collapse of the polymer chain. Unfavorable entropy contribution to the excess chemical potential of unfolded PNiPAM chains results from two urea effects: (1) an increasing cost of cavity formation with increasing urea, (2) larger fluctuations in the energy component corresponding to PNiPAM-(co)solvent attractive interactions. These energy fluctuations are particularly relevant at low urea concentrations (< 3 M) and result from attractive polymer-urea Van der Waals interactions that drive the formation of urea clouds but bias the spatial distribution of urea and water molecules with a corresponding reduction of the entropy.²

The proposed mechanism provides a new angle on relations between the properties of protecting and denaturing osmolytes, salting-in or salting-out effects, and the emergent indirect role of bulk thermodynamic properties of the binary solvent on folding equilibria. We are currently studying the effect of different biologically relevant protective osmolytes, denaturants and ions on the conformational folding/unfolding equilibrium of different kinds of water soluble polyacrylamides and other biopolymers.

Funding source
DFG

References

1. F. Rodriguez-Ropero and N.F.A. van der Vegt (2014), Direct osmolyte-macromolecule interactions confer entropic stability to folded states, *The Journal of Physical Chemistry B*, 118 (26): 7327 - 7334.
2. F. Rodriguez-Ropero and N.F.A. van der Vegt (under review), On the urea induced hydrophobic collapse of a water soluble polymer, *Physical Chemistry Chemical Physics*.

Understanding the Mechanisms of Multidrug Transport Proteins

M. Prieß, O. Fisetto, K. Reichel, A. Kuhn, S. Gopal, L. Schäfer
Biomolekulare Simulation, Ruhr-Universität Bochum

Funding source
DFG
Emmy Noether
Programm

The Schäfer group is driven by the aim to understand life at the molecular level: can we describe biomolecular systems from the basic principles of chemistry and physics. Molecular dynamics (MD) computer simulations can provide a deep and causal understanding of the structural dynamics and energetics underlying biomolecular processes, and are thus one of the most powerful tools to achieve this goal. One of the major bottlenecks of conventional all-atom MD is the huge computational effort involved, which limits the time- and length-scales that are accessible by simulation. Therefore, the group is active in the development and application of computationally efficient methods for describing large biomolecular assemblies on long time scales. This requires efficient classical molecular dynamics (MD) type simulations, in which Newton's equations of motion are iteratively solved in small time steps and empirical potentials (force fields) are employed for describing the interatomic interactions. In addition to using conventional all-atom MD simulations, the group also contributes to improving the accuracy of efficient coarse-grained approaches, and to the development of hybrid multiscale methods that combine different levels of resolution.

The following case study highlights the application of MD to membrane proteins. These nano-machines are not only of great interest due to their intriguing chemical and biophysical principles, but also because of their pharmaceutical importance: about half of all current drugs target membrane proteins. We use MD simulations to probe their structure, dynamics, and the driving forces behind their working mechanisms at the molecular level. Recent work focused on the ATP binding cassette transporter TAP (transporter associated with antigen processing), in collaboration with Robert Tampé at Goethe-University Frankfurt.¹ To enable experimental characterization, TAP was embedded in a special nanodisc environment (see Figure 1). Intriguingly, biochemical experiments indicated that as little as 22 lipid molecules (grey) were surrounding the TAP protein (cyan and orange). This small number raised the question whether these suffice to isolate TAP from the

scaffold proteins of the nanodisc, which wrap around the disc in a double-belt fashion (yellow). The detailed atomic-level structure of this protein/nanodisc complex, as shown in the Figure, could not be obtained by experiment, but only from the MD simulations. Since the overall simulation system is very large (ca. 200.000 atoms, including explicit water), these simulations were only possible through the HPC resources available at CSC.

In summary, the MD simulations show how computational techniques can synergistically complement experiments by probing the interactions between the different components (proteins, lipids, water molecules) that govern the structure and dynamics – and hence the function – of proteins. Fostered by the continuous increase in HPC development, in the near future, detailed MD simulations of even larger protein complexes will become feasible, which are abundant in the cell and steer numerous processes of life.

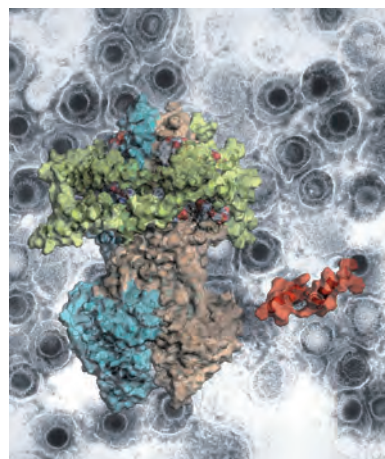


Fig. 1: Snapshot from MD simulation of transporter associated with antigen processing (TAP) embedded in a lipid nanodisc. TAP is shown in cyan and orange, whereas the nanodisc proteins and lipids are colored yellow and grey, respectively. The red molecule at the right is the ICP47 protein from herpes simplex virus, a high-affinity inhibitor of TAP. The transmission microgram in the background shows the preparation of herpes simplex virus.

Reference

1. S. Eggensperger, O. Fisetto, D. Parcej, L.V. Schäfer, and R. Tampé (2014), An annular lipid belt is essential for allosteric coupling and viral inhibition of the antigen translocation complex TAP, *J. Biol. Chem.*, 289(48): 33098-33108.

Als Standardverfahren zur Strukturbestimmung von Kristallen dient in erster Linie die Röntgenbeugung an Einkristallen oder kristallinen Pulvern. Die routinemäßige Auswertung von Röntgenbeugungsexperimenten an Kristallen liefert jedoch nur eine zeitlich und räumlich gemittelte Struktur des Festkörpers. So ergeben sich in der ermittelten Kristallstruktur manchmal neben vergleichsweise schlechten Gütekriterien auffällige Strukturmerkmale wie große, stark anisotrope Auslenkungsfaktoren oder problematische Atompositionen.¹ Diese Phänomene werden oft vernachlässigt und daher nur unvollständig ausgewertet. Deren Auftreten deutet jedoch auf das Vorhandensein von Kristallfehlordnungen (Besetzungs-, Orientierungs-, Stapelfehlordnung) hin. Im Falle einer Fehlordnung werden in der Regel überlagerte Strukturen erhalten, die zu einer chemisch unsinnigen Atomanordnung führen. Die Informationen über die Nahordnung sind dann nur unvollständig. Lokale Änderungen der Molekülpositionen und -orientierungen sind für die physikalischen und chemischen Eigenschaften des Festkörpers allerdings von großer Bedeutung.¹

Einige Aminosäuren sowie viele organische Pigmente bilden Schichtstrukturen. Röntgen- und Elektronenbeugungsdaten zeigen bei diesen Verbindungen teils starke diffuse Streuung. Die genaue Struktur, die Stapelwahrscheinlichkeiten und die lokalen Anordnungen der Moleküle in den Kristallpackungen sind noch unbekannt.

Im Rahmen des Projekts wird an Kristallen zweier Aminosäuren und eines organischen Pigments, welche diffuse Streuung zeigen, das mögliche Vorliegen von Fehlorderungen sowie deren Charakterisierung untersucht. Ziel ist es, die tatsächliche Kristallstruktur zu bestimmen und die Ursache für das Auftreten von Fehlorderungen zu verstehen. Dazu wurden systematisch Modellstrukturen aller kombinatorisch möglichen Stapelvarianten innerhalb einer Stapelhöhe aufgestellt, anschließend Gitterenergieminimierungen mittels rechenzeitsparenden Kraftfeldverfahren (Programmpaket Materials Studio, Accelrys, 2008)³ und, für eine höhere Genauigkeit, Gitterenergieminimierungen der energetisch günstigsten Modellstrukturen mittels dispersionskorrigierter Dichtefunktionaltheorie (DFT-d)⁴ unter Verwendung von CASTEP⁵ durchgeführt. Die erhaltenen energetischen Minima der Strukturmodelle liefern die Lokalstrukturen der untersuchten Festkörper. Diese Lokalstrukturen geben sowohl die bevorzugte lokale Anordnung als auch die Verzerrung der einzelnen Moleküle wieder, die aus den Positionen und Orientierungen der Nachbarmoleküle resultieren.

In weiteren Untersuchungen sollen die Kristallstrukturen von zwei weiteren fehlgeordneten organischen Verbindungen mit ein- bzw. zweidimensionaler Fehlordnung berechnet werden. Die Verbindungen wurden bereits von Dr. T. Gorelik (Universität Mainz) mit Elektronenkrystallographie untersucht, wobei starke diffuse Streuung festgestellt wurde. Die genaue Art der Fehlordnung muss jetzt durch Gitterenergieminimierungen aufgeklärt werden.

Literatur

1. W. Massa (2009), *Kristallstrukturbestimmung*, Vieweg + Teubner, Wiesbaden.
2. K. Wynne und J. Crystal (1984), *Molecular Structure of Chloro(phthalocyaninato)gallium(III), Ga(Pc)Cl, and Chloro(phthalocyaninato)aluminum(III), Al(Pc)Cl*, *Inorganic Chemistry*, 23: 4659-4663.
3. Accelrys (2008), *Materials Studio Release Notes*. Accelrys Software Inc., San Diego, USA.
4. S.J. Grimme (2006), *Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction*, *Comput. Chem.*, 27: 1787-1799.
5. S.J. Clark, M.D. Segall, C.J. Pickard, P.J. Hasnip, M.I.J. Probert, K. Refson und M.C. Payne (2005), *First principles methods using CASTEP*. *Z. Kristallogr.*, 220: 567-570.

Von ungewöhnlichen Gold-Komplexen zu komplizierten Bandstrukturen

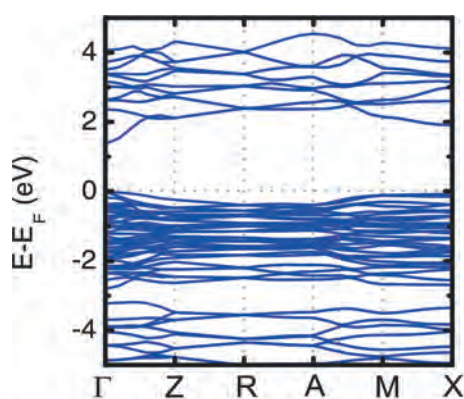
G. Thiele, L. Guggolz, S. Dehnen

Anorganische Chemie, Philipps-Universität Marburg

In unserem Arbeitskreis wurden folgende Projekte mit Hilfe des Rechenclusters MaRC2 durchgeführt. Aufgrund der enormen Größe der berechneten Systeme, war der Einsatz eines Rechenclusters zwingend erforderlich. In Kooperation mit einem Arbeitskreis am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) wurden im Rahmen einer Promotionsarbeit¹ Goldkomplexe synthetisiert. Dabei konnte unter anderem die Verbindung $[\text{Au}_{10}\text{S}_6(\text{PPh}_2)_2(\text{dppma}_2)_4(\text{dppma}_3)] \cdot [\text{Au}_6\text{S}_4(\text{dppma}_2)_2(\text{dppma}_3)]$ hergestellt werden. Der Komplex besteht aus zwei neutralen Untereinheiten. Die größere Untereinheit beinhaltet zwei $\{\text{Au}_5\}$ -Fragmente. Sie umschließt die kleinere Untereinheit hufeisenförmig, welche ein $\{\text{Au}_6\}$ -Fragment beinhaltet. Zur Untersuchung möglicher Gold-Gold-Wechselwirkungen (Aurophilie) und zur Aufklärung der intermolekularen Bindungssituation wurden quantenmechanische Berechnungen, nämlich simultane Optimierungen der geometrischen und der elektronischen Struktur, mit Hilfe des Programmsystems TURBOMOLE V6.5² durchgeführt. Dabei kamen Methoden der Dichtefunktionaltheorie (DFT) zum Einsatz. Zunächst musste überprüft werden, ob die angewandte Prozedur passend für die Aufgabenstellung sei. Hierfür wurden die experimentell erhaltenen Werte, wie Bindungslängen und -winkel, mit den Ergebnissen der Berechnung verglichen. Experiment und

Theorie stimmten sehr gut miteinander überein, sodass die gewählte Methode als geeignet angesehen werden kann. Als nächstes wurde untersucht, ob die zwischen Goldatomen typischen aurophilen Wechselwirkungen beobachtet werden könnten, die durch die relativ kurzen Gold-Gold-Abstände impliziert wurden. Eben diese Abstände korrelierten allerdings nicht mit den berechneten shared electron numbers (SEN), sodass die Vermutung nahe liegt, dass die Goldatome durch die sie umgebenden Strukturen in die beobachteten Konformationen gezwungen wurden. Als letztes wurden die intermolekularen, dispersiven Wechselwirkungen zwischen den beiden neutralen Untereinheiten untersucht. Hierbei konnte gezeigt werden, dass die beiden Komplexhälften durch lediglich zwölf Wasserstoffbrückenbindungen zusammengehalten werden. Der Vergleich zwischen der totalen Energie des Komplexes und der Summe der totalen Energien der beiden Untereinheiten ergab eine Stabilisierung von insgesamt ca. $-649,5 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$. Es konnte mit Hilfe der angestellten quantenmechanischen Berechnungen gezeigt werden, dass die verwendete Methode geeignet ist, um die geometrische und elektronische Struktur des zuvor synthetisierten Gold-Komplexes zu optimieren. Ferner konnte dargelegt werden, dass es keine nennenswerten aurophilen Wechselwirkungen gibt und dass beide Untereinheiten des Komplexes über Wasserstoffbrücken zusammengehalten werden. Neben solch großen Komplexverbindungen untersuchen wir auch „einfache“ ternäre Phasen der allgemeinen Formel $\text{A}_x\text{M}_y\text{Ch}_z$ (A: Alkalimetall, M: Gruppe 12-14 (Halb-)Metall, Ch: Chalkogen). Solche Materialien besitzen zumeist Halbleitereigenschaften und werden im Arbeitskreis sowohl synthetisiert und experimentellen Untersuchungen unterzogen, als auch mithilfe quantenchemischer Rechnungen mit periodischen Randbedingungen (Vienna Ab-Initio Simulation Package, VASP) bezüglich ihrer elektronischen Struktur untersucht. Mithilfe solcher Berechnungen können die Bandstrukturen von isolierten und hypothetischen Materialien bestimmt werden und somit ein fundamentales Verständnis der Struktur-Eigenschaften-Beziehungen gewonnen werden.

Abb. 1 zeigt eine solche Bandstruktur für ein Material, welches ein Prototyp für thermoelektrische Eigenschaften, also für die Umwandlung von Wärme in Elektrizität, darstellen könnte.



Literatur

1. W. Yu (2014), PhD thesis: Synthese und Charakterisierung von Münzmetall-Chalkogen-Komplexen mit 2,3-Bis(diphenylphosphino)maleinsäure-anhydrid und dessen Derivate als Liganden, Cuvillier Verlag Göttingen: 43ff.
2. TURBOMOLE V6.5 (2013), A development of University of Karlsruhe and Forschungszentrum Karlsruhe GmbH, 1989-2007, TURBOMOLE GmbH, since 2007; available from <http://www.turbomole.com>.

Well-Defined Iron Catalysts for the Acceptorless Reversible Dehydrogenation-Hydrogenation of Alcohols and Ketones

M.C. Holthausen, M. Förster

Institut für Anorganische und Analytische Chemie, Goethe-Universität Frankfurt

Funding source
Center for Electrocatalysis, Transport Phenomena, and Materials (CETM) for Innovative Energy Storage (Kooperationspartner)

The oxidation of alcohols to esters and the reverse reaction (reduction of esters to alcohols) is an important chemical transformation frequently used in industry and academia. The two classical protocols for the reduction of esters are the use of stoichiometric amounts of a hydride reagent on the one side and the catalytic heterogeneous hydrogenation on the other side. Both processes come along with substantial drawbacks, i.e., the toxicity of the reagents in the former case and the poor chemoselectivities for heterogeneous catalysts. To perform the desired reaction under milder conditions, the development of homogeneous catalysts is a promising approach. However, most homogeneous catalysts are based on ruthenium as the active transition metal, which poses environmental concerns. In the year 2014, several working groups independently developed iron complexes for the transformation from alcohols to esters (see structures A1). The use of an earth-abundant and non-toxic metal in these systems, combined with high catalytic activities and chemoselectivities, clarify the possible great impact of the iron catalysts in both industry and academia¹⁻³ (see reference⁴ for a detailed review on iron catalyzed dehydrogenation reactions).

In cooperation with the groups of Schneider (Goettingen University), Hazari (Yale University), Bernskoetter (Brown University) and Jones (University of Rochester) a combined experimental and density functional theory (DFT) study was performed to investigate the substrate scope for the alcohol dehydrogenation and to gain deeper insight into mechanistic details of the catalytic cycle.³

The resulting catalytic cycle, as depicted in figure 1, is composed of two separate parts: the dehydrogenation of methanol (blue) and the dehydrogenation of the hemiacetale formed in-situ (red). The computations revealed a moderate activation barrier of 16.1 kcal/mol for the dehydrogenation of methanol (TS_A2, see figure 1). Subsequent elimination of H₂ occurs with an activation barrier of 25.1 kcal/mol (TS_A6, see Figure 1). In this step, metal-ligand cooperativity of the catalyst plays a crucial role. The second part of the reaction pathway (red) is combined with a significantly lower overall activation barrier of 15.0 kcal/mol (TS_B6). The overall rate-limiting step of the catalytic cycle is given by the H₂ elimination from complex A5. Dihydrogen is liberated by a methanol-assisted proton shuffle mechanism (TS_A6) with a barrier height of 25.1 kcal/mol.

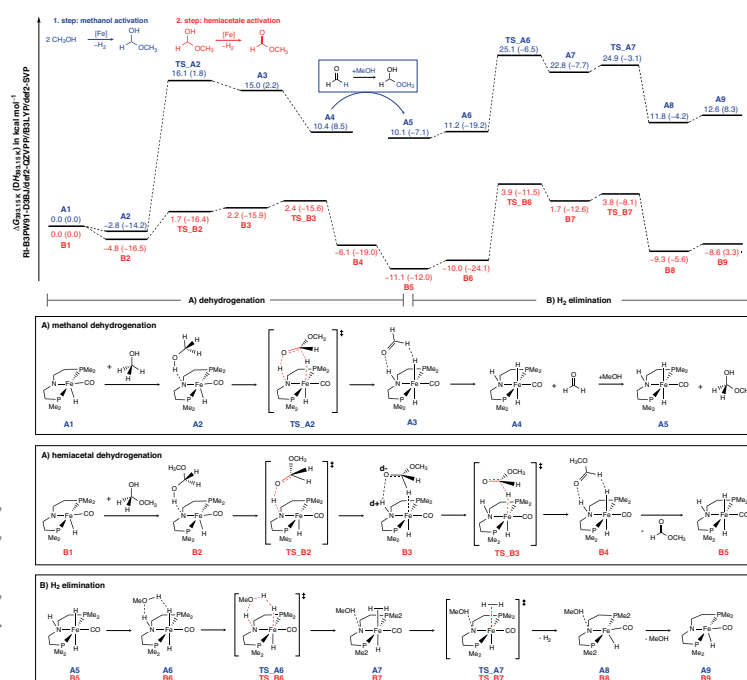


Figure 3: Computed lowest free energy Pathways for the dehydrogenation of methanol.

References

1. S. Chakraborty, H. Dai, P. Bhattacharya, N.T. Fairweather, M.S. Gibson, J.A. Krause, and H. Guan (2014), *J. Am. Chem. Soc.*, 136, 7869.
2. S. Werkmeister, K. Junge, B. Wendt, E. Alberico, H. Jiao, W. Baumann, H. Junge, F. Gallou, and M. Beller (2014), *Angew. Chem. Int. Ed.* 2014, 53, 8722; *Angew. Chem.*, 126, 8722.
3. S. Chakraborty, P.O. Lagaditis, M. Förster, E.A. Bielinski, N. Hazari, M.C. Holthausen, W.D. Jones, and S. Schneider (2014), *ACS Catal.*, 4, 3994.
4. P. Dupau, M.L. Tran, S. Gaillard, and J.L. Renaud (2014), *Angew. Chem. Int. Ed.*, 53, 13004.

Geowissenschaften
und Ökologie

geographie
ökologie



ow
ogjie

15° E

Freshwater Species Distribution Models

M. Kuemmerlen, S. Domisch, D.N. Shah, S. Jähnig, S. Pauls, S. Stoll, P. Haas,
Senckenberg Forschungsinstitut und Naturmuseum Frankfurt und Goethe-Universität Frankfurt

Studies applying species distribution models (SDMs) have multiplied exponentially over the last years, however only few deal with freshwater ecosystems. As streams and rivers have environmental conditions that diverge strongly from terrestrial and marine habitats, adaptations have been explored on how SDMs can be applied in freshwater ecosystems in order to improve model performance and prediction accuracy¹⁻³. SDMs are mostly applied to large areas, from the regional to the continental scale (> 10.000 km²) at rather coarse spatial resolutions (> 1 km²). These models support research for large taxonomic groups across wide areas⁴. The main outcomes of such models are continuous distribution predictions for single species and the relative importance of the environmental predictors that drive the distribution model. Frequently, predictions for the future are also made, based on future climate scenarios. These distribution predictions give hints on possible developments in the occurrence ranges of single species. In most cases, warm-adapted species expand their predicted distributions, while endemic and cold-adapted species see their suitable habitats reduced⁵. Freshwater SDMs have also been applied to much smaller scales (< 10.000 km²), at finer spatial resolutions (< 1 km²) (Fig. 1). This approach has focused on the catchment, using the stream network as a modeling extent, rather

than continuous surfaces. In this way, environmental predictors unique to freshwater ecosystems can be included, such as discharge and flood events⁶. In addition, common predictors such as land use are adapted as to portray the hierarchical framework of stream networks³. The combination of these properties has yielded improved predictions and model performance. Small scale freshwater SDMs have many potential applications as a regionally focused decision support tool in scientific monitoring, environmental conservation and landscape planning. Models developed have mainly focused on Europe and particularly Germany, but there are also experiences in China (Fig. 1). Large and small scale SDMs are built as ensemble models and consist of several replicates using different algorithms and allocation of pseudo-absences (random non-occurrences required to calibrate the model). Thus, for each species modeled, replicates can easily exceed 100 and many species are frequently modeled in parallel, which makes remote computing power absolutely necessary. Ongoing research further develops small scale (high resolution) freshwater SDMs applied to the Kinzig catchment (Hessen) using data from Senckenbergs long term ecological research (LTER) site Rhein-Main-Observatorium. Further applications are also ongoing or planned at regional and continental scales.

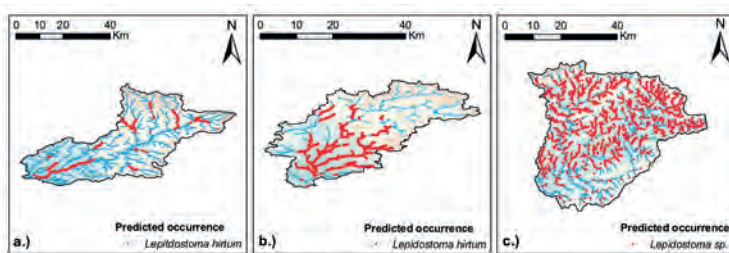


Fig. 1:
Mapped predicted probability of occurrence for *Lepidostoma hirtum* or *Lepidostoma sp.* in 3 different catchments:
a) Kinzig River catchment in Hesse, Germany;
b) Treene River catchment in Schleswig-Holstein, Germany;
c) Changjiang River catchment in Anhui and Jiangxi, China.

References

1. S.C. Jähnig, M. Kuemmerlen, J. Kiesel, S. Domisch, Q. Cai, B. Schmalz et al. (2012), Modelling of riverine ecosystems by integrating models: conceptual approach, a case study and research agenda. *J Biogeogr.* 39: 2253–2263. doi:10.1111/jbi.12009.
2. S. Domisch, M. Kuemmerlen, S.C. Jähnig, and P. Haase (2013), Choice of study area and predictors affect habitat suitability projections, but not the performance of species distribution models of stream biota. *Ecol Model.* 257: 1–10. doi:10.1016/j.ecolmodel.2013.02.019.
3. M. Kuemmerlen, B. Schmalz, B. Guse, Q. Cai, N. Fohrer, and S.C. Jähnig (2014), Integrating catchment properties in small scale species distribution models of stream macroinvertebrates. *Ecol Model.* 277: 77–86. doi:10.1016/j.ecolmodel.2014.01.020.
4. D.N. Shah, S. Domisch, S.U. Pauls, P. Haase, and S.C. Jähnig (2014), Current and Future Latitudinal Gradients in Stream Macroinvertebrate Richness Across North America. *Freshw Sci.* 33: 1136–1147. doi:10.1086/678492.
5. Domisch, M.B. Araújo, N. Bonada, S.U. Pauls, S.C. Jähnig, and P. Haase (2013), Modelling distribution in European stream macroinvertebrates under future climates. *Glob Change Biol.* 19: 752–762. doi:10.1111/gcb.12107.
6. M. Kuemmerlen, S. Domisch, B. Schmalz, Q. Cai, N. Fohrer, and S.C. Jähnig (2012), Integrierte Modellierung von aquatischen Ökosystemen in China: Arealbestimmung von Makrozoobenthos auf Einzugsgebietsebene. *Hydrol Wasserbewirtsch.* 56: 185–192. doi:10.5675/HyWa_2012,4_3.

To achieve a sustainable development of the planet Earth, water resources need to be managed well. This requires an assessment of the current water situation, an understanding of historic developments and the generation of scenarios of the future. A global-scale freshwater assessment helps to understand the global water system and how it is impacted by humans, as in a globalized world, freshwater assessments can no longer be restricted to the river basin scale. To support these tasks, we have developed the global-scale water model WaterGAP that computes both water resources and water use with a spatial resolution of $0.5^\circ \times 0.5^\circ$ (55 km at the equator), and we keep improving the model.

Funding source

DFG

We have harmonized model versions developed at the University of Kassel and the University of Frankfurt (WaterGAP 2.2) and evaluated the sensitivity of global freshwater fluxes and storages to input data, hydrological model structure, human water use and calibration¹. In cooperation with geodesists, we evaluate simulated seasonal water storage variations against GRACE gravity field and GPS observations². We participated in the ISI-MIP effort to estimate the impact of climate change on freshwater resources, applying a number of bias-corrected climate model outputs³. Using a recent model version that takes into account groundwater recharge from surface water bodies in semi-arid regions of the globe, we estimated global-scale groundwater depletions and its contribution to sea-level rise⁴. We found that groundwater depletion is likely to be lower than formerly estimated due to deficit irrigation in depletion regions. About one-tenth of total sea-level rise around the turn of the century can be attributed to groundwater depletion.

We currently participate in another ISI-MIP multi-model experiment regarding historical land and water use effect, and are developing an improved WaterGAP 2.2b model version that will allow easy integration in data assimilation efforts.

References

1. H. Müller Schmied, S. Eisner, D. Franz, M. Wattenbach, F.T. Portmann, M. Flörke, and P. Döll (2014), Sensitivity of simulated global-scale freshwater fluxes and storages to input data, hydrological model structure, human water use and calibration. *Hydrol. Earth Syst. Sci.* 18: 3511-3538. doi:10.5194/hess-18-3511-2014.
2. P. Döll, M. Fritsche, A. Eicker, and H. Müller Schmied (2014), Seasonal water storage variations as impacted by water abstractions: Comparing the output of a global hydrological model with GRACE and GPS observations. *Survey in Geophysics.* 35 (6): 1311-1331. doi: 10.1007/s10712-014-9282-2.
3. F.T. Portmann, P. Döll, S. Eisner, and M. Flörke (2013), Impact of climate change on renewable groundwater resources: assessing the benefits of avoided greenhouse gas emissions using selected CMIP5 climate projections. *Environ. Res. Lett.* 8 024023. doi:10.1088/1748-9326/8/2/024023.
4. P. Döll, H. Müller Schmied, C. Schuh, F.T. Portmann, and A. Eicker (2014), Global-scale assessment of groundwater depletion and related groundwater abstractions: Combining hydrological modeling with information from well observations and GRACE satellites, *Water Resour. Res.*, 50 (7): 5698-5720. doi:10.1002/2014WR015595.

S. Borchert, M.D. Fruman, J. Muraschko, F. Rieper, U. Achatz
Fachgebiet Meteorologie, Goethe-Universität Frankfurt

Funding source
DFG

The explicit examination of the smallest scales of atmosphere and ocean dynamics is the subject of research on the dynamics of breaking inertia-gravity waves (GWs). One motivation for this work is the important role of gravity-wave breaking in the middle atmosphere. Via this process and the ensuing acceleration or deceleration of the middle-atmosphere circulation gravity waves play a decisive role in middle-atmosphere dynamics. Incorporation of the latter into climate models, however, is crucial for correct simulations of our climate variability on decadal and longer time scales. Moreover, gravity waves also form an essential direct connection between the smallest-scale turbulence and the synoptic (daily-weather) scales in the troposphere. There are indications that future progress in weather prediction and climate modelling will depend crucially on a better understanding of the corresponding processes. Also in the oceanic context gravity waves are thought to be a key element in the generation of turbulence. The latter is vital for a mixing which is sufficiently strong so as to keep the thermohaline circulation in motion. GWs being too small in scale to be explicitly resolvable in weather and climate models, their effect must be parameterized by corresponding modules. These parameterizations should be tested against simulations that

can accommodate both the propagation of the waves (requiring domains of tens to hundreds of kilometres in all three spatial dimensions) and their breaking (requiring resolutions of between centimetres and a few metres, depending on the altitude). Only large-eddy simulation (LES) is suited for this task. On the other hand, since LES treats the small-scale turbulence by parameterizing the sub-grid-scale (SGS) physics, it also needs to be validated against turbulence-resolving direct numerical simulation (DNS). Recent work^{1,5,2} has provided fully resolved direct numerical simulations of breaking monochromatic inertia-gravity waves under conditions appropriate to the upper mesosphere. Several test cases were considered, each exhibiting turbulence with varying degrees of intensity and intermittency in time and space. These direct numerical simulations have then been used as reference cases for testing two large-eddy simulation schemes: the dynamic Smagorinsky method and the implicit Adaptive Local Deconvolution Method (ALDM)³, originally developed for modelling isotropic incompressible turbulence but adapted for use with stratified turbulence⁴, as it occurs in the atmosphere. The schemes have been compared in terms of how well they reproduce the decay of the wave and the energy dissipation as functions of time during the breaking process, with results varying considerably with the type of wave-breaking event considered. For a case involving strong turbulence ALDM turns out to be the better choice, while for cases with weak turbulence and a partially laminar flow field the dynamic Smagorinsky method has advantages⁶.

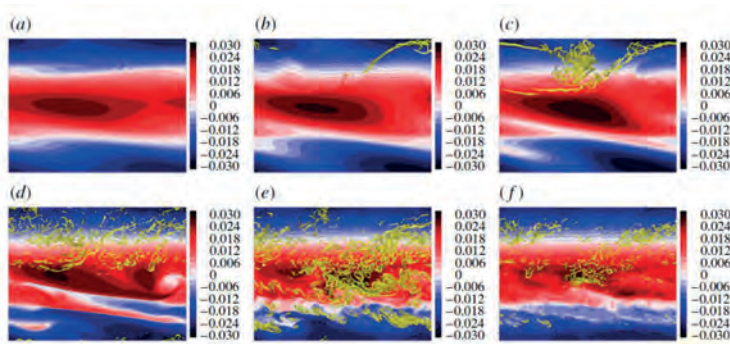


Figure: Temporal evolution of the cross-section of total buoyancy (colors) from 3D a direct numerical simulation of a breaking inertia-gravity wave. Yellow contours show an isosurface of the Q-criterion representing intense turbulent activity.⁵

References

1. M.D. Fruman and U. Achatz (2012), Secondary instabilities in breaking inertia-gravity waves. *J. Atmos. Sci.*, 69: 303–322.
2. M.D. Fruman, S. Remmler, U. Achatz, and S. Hickel (2014), On the construction of a direct numerical simulation of a breaking inertia-gravity wave in the upper mesosphere. *J. Geophys. Res.*, 119, 11,613–11,640.
3. S. Hickel, N. Adams, and A. Domaradzki (2006), An adaptive local deconvolution method for implicit LES. *J. Comput. Phys.*, 213: 413–436.
4. S. Remmler and S. Hickel (2012), Direct and large eddy simulation of stratified turbulence. *Int. J. Heat Fluid Flow*, 35: 13–24.
5. S. Remmler, M.D. Fruman, and S. Hickel (2013), Direct and large eddy simulation of stratified turbulence. *J. Fluid Mech.*, 722: 424–436.
6. S. Remmler, S. Hickel, M.D. Fruman, and U. Achatz (submitted 2015), Large-Eddy Simulation of Gravity-Wave Breaking in Two and Three Dimensions. *J. Atmos. Sci.*

Inverse Modellierung zur Verbesserung von Wettervorhersagen und Klimaprojektionen

J. Tödter, S. Kothe, B. Ahrens

Institut für Atmosphäre und Umwelt, Goethe-Universität Frankfurt

Verlässliche Vorhersagen werden benötigt, um bessere Entscheidungen für zukünftiges Handeln treffen zu können. Ein wichtiges Beispiel sind Wetter- und Klimavorhersagen. Diese werden nicht nur im persönlichen Alltag genutzt, sondern bilden auch die Grundlage für wirtschaftliche oder politische Maßnahmen, etwa in Bezug auf Extremwetterereignisse oder Klimaerwärmung. Hierfür werden komplexe, hochdimensionale Modelle verwendet, um die physikalischen Prozesse in der Atmosphäre, den Meeren und der Landoberfläche unserer Erde numerisch nachzubilden.

Jede Vorhersagerechnung startet mit einem Anfangszustand. Da die Atmosphäre ein stark nichtlineares, chaotisches System ist, können anfänglich kleine Fehler sehr schnell wachsen, was weithin als „Schmetterlingseffekt“ bekannt ist und den Hauptgrund für die begrenzte Vorhersagbarkeit des Wetters darstellt. Die gute Spezifizierung des Anfangszustands stellt somit eine große Herausforderung dar, die den Aufwand der eigentlichen Vorhersage oft sogar übertrifft. Hierfür wird auf inverse Modellierung zurückgegriffen, bei der das Modell mit echten Beobachtungen kombiniert wird, auch als Daten-Assimilation bekannt. Die dafür möglichen Algorithmen müssen auch in großen Dimensionen anwendbar sein. Daher beschränkt man sich zumeist auf quasi-lineare Methoden und stochastische Simulationsmethoden.

Wir arbeiten sowohl (1) an der praktischen Nutzung etablierter Techniken zur Verbesserung von Klimavorhersagen als auch (2) an der grundsätzlichen Verbesserung der zu Grunde liegenden Algorithmen. Im Folgenden werden die bisherigen Arbeiten und ihre Resultate kurz vorgestellt. Sie wurden durch einer Vielzahl von Rechnungen auf dem LOEWE-CSC möglich gemacht.

(1) Unsere Beteiligung am BMBF-Projekt „Mittelfristige Klimaprognosen“ (MiKlip) hat zum Ziel, den Anfangszustand der Landoberfläche für dekadische Klimaprojektionen zu verbessern, insbesondere in Bezug auf die klimatologisch besonders relevante Bodenfeuchte, die aufgrund ihrer langsamen Veränderung eine potentielle Vorhersagbarkeit besitzt. Hierzu

verwenden wir das operationelle Vorhersagemodell des Deutschen Wetterdienstes und kombinieren es sowohl mit Satellitenbeobachtungen der oberflächennahen Bodenfeuchte als auch mit optimierten Niederschlagszeitserien. Diese Arbeit wurde für die Regionen Europa und Afrika durchgeführt, für die im Anschluss regionale Klimavorhersagen gerechnet wurden. Die bisherigen Ergebnisse zeigen, dass die Optimierung der Bodenfeuchte auch in der Praxis Potential zur Verbesserung von Klimaprojektionen hat.

(2) Wir haben einen neuen, nichtlinearen Algorithmus entwickelt, der in ersten Versuchen gute Resultate zeigte, darunter auch in Problemen größerer Dimensionalität¹. Um seine Anwendbarkeit weiter zu untersuchen, wurde die neue Methode auf ein großskaliges Ozeanmodell angewendet.

Zusammengefasst beschäftigen wir uns mit Aspekten der inversen Modellierung, um Vorhersagen durch die Optimierung des Anfangszustandes zu verbessern. Hierzu wurden komplexe Assimilationsrechnungen durchgeführt, deren Ergebnisse aktuell für Klimaprojektionen im Rahmen von MiKlip genutzt werden. In Zukunft werden diese weiter optimiert, zudem ist die Vorbereitung für die Projektion der Dekade 2015-2025 geplant. Es besteht außerdem mittelfristig die Option, ein System zur Assimilation von Beobachtungen im Mittelmeer aufzubauen, wodurch ebenfalls positive Auswirkungen auf die dekadische Vorhersagbarkeit erwartet werden.

Außerdem wurde eine neue, nichtlineare Theorie entwickelt und ausführlich getestet, unter anderem in einem komplexen Ozeanmodell. Da bisher konsistent gute Ergebnisse erzielt wurden, kann die Forschung mit weiteren Anwendungen sowie Optimierungen des Algorithmus fortgeführt werden.

Projektförderung

BMBF MiKlip:
DEPARTURE/
FKZ 01LP1118B
und DECREG/FKZ
01LP1118B

Literatur

1. J. Tödter und B. Ahrens (Dezember 2014), A second-order ensemble exact square root filter for nonlinear data assimilation, Monthly Weather Review. doi:10.1175/MWR-D-14-00108.1.

Modelling Ecosystems, Biosphere-Atmosphere Interactions and Environmental Change with LPJ-GUESS

M. Forrest, A. Pachzelt, J. Steinkamp, C. Werner, T. Hickler

Senckenberg Biodiversität und Klima Forschungszentrum und Goethe-Universität Frankfurt

Funding source
LOEWE

LPJ-GUESS¹ is a dynamic vegetation model (DVM) optimised for regional to global applications. It simulates many processes which occur in the terrestrial biosphere including photosynthesis; plant growth, competition, establishment and mortality; hydrological processes and the carbon and nitrogen dynamics. At the Biodiversität und Klima Forschungszentrum (BiK-F) and with the aid of Hessen HPC facilities, we apply LPJ-GUESS over a variety of regions and time periods to investigate research topics in the areas of ecology, environmental change and interactions between the atmosphere and terrestrial biosphere.

An example of a global-scale study is a recent publication in which we compared simulated forest mortality from a LPJ-GUESS with reported drought-related mortality events from literature². The major conclusions we drew from our results were: 1.) Already dry forests were more vulnerable to drought, whereas forests in wet climates often benefited from warmer (drier) conditions; 2.) The current implementation of mortality in the model is still insufficient and requires a better process description to capture observed mortality incidents 3.) We postulate that heat and/or drought might not be the primary driver for all reported mortality events.

In a high-resolution, regional study of Turkey, LPJ-GUESS was used to investigate future changes to vegetation (in particular productivity) under climate change scenarios³. After adapting the vegetation parameters to better represent Turkish vegetation and then benchmarking against satellite data and expert maps, the model was used prognostically with future climate data from a regional climate model. The results showed that in some areas of Turkey productivity increased due to warmer temperatures during the spring growing season. In other areas decreases in precipitation and extremely high temperatures reduced productivity.

Herbivores are considered to be an important driver in vegetation dynamics yet there is no consensus about the quantity of the grazer impact on the vegetation. To further promote the insight into herbivore-vegetation interaction and ecology, we coupled LPJ-GUESS with a modern grazer model⁴. The coupled model enabled us to estimate grazer population densities in African savannahs⁵ and over the whole African continent and allowed us to indicate grazer population drivers, which seem to differ on the savanna and the continental scale⁶. Further efforts are made to implement a dynamic predator model and future applications of the model may be to estimate future distributions of grazers in regard of climate change or to evaluate the human and climatic impact on the megafauna extinction in the Late Pleistocene (approximately 126,000 to 9700 year before present).

Other ongoing projects also illustrate the wide range of application of the LPJ-GUESS model. In one study LPJ-GUESS is being used to investigate global vegetation patterns in the Late Miocene period (7-12 million years before present) and the results are compared to plant fossils. Another study involves simulating wildfire in tropical biomes examining its effects on tropical biomass. We are also undertaking a collaboration with the Max-Planck Institute for Atmospheric Chemistry in Mainz and the University of Mainz in which we are coupling LPJ-GUESS to atmospheric chemistry and circulation model to better understand the bilateral interactions between the biosphere and the atmosphere.

References

1. B. Smith, I.C. Prentice, and M.T. Sykes (2001), Representation of vegetation dynamics in the modelling of terrestrial ecosystems: comparing two contrasting approaches within European climate space. *Global Ecology & Biogeography* 10: 621-637.
2. J. Steinkamp and T. Hickler (2015), Is drought-induced forest dieback globally increasing? *Journal of Ecology*, 103: 31-43.
3. M. Forrest, C. Dönmez, A. Çilek, M.A. Erdogan, C. Buontempo, and T. Hickler (2014), Climate Change Impacts on Turkish Vegetation, EGU General Assembly 2014, held 27 April - 2 May, 2014 in Vienna, Austria.
4. A.W. Illius and T.G. O'Connor (2000), Resource heterogeneity and ungulate population dynamics. *Oikos* 89.2: 283-294.
5. A. Pachzelt, A. Rammig, S. Higgins, and T. Hickler (2013), Coupling a physiological grazer population model with a generalized model for vegetation dynamics, *Ecological Modelling* 263: 92-102.
6. A. Pachzelt, M. Forrest, A. Rammig, S. Higgins, and T. Hickler (2015), Potential impact of large ungulate grazers on African vegetation, carbon storage and fire regimes. *Global Ecology and Biogeography*. doi: 10.1111/geb.12313.

Properties and Climate Sensitivity of Convective Activity in Convective Permitting Models

E. Brisson, C. Brendel, B. Ahrens

Goethe-Universität Frankfurt

Severe convective events have a large impact on our society due to their potential for producing high precipitation intensity showers, hail or lightning (Brendel et al., 2014). These latter three processes usually result in floods or damages on agricultural fields or on power network. Policy makers have, therefore, high interest in monitoring convective events. However, due to their complexity and their limited spatial extend the tools to understand or reproduce their climatology are limited. Therefore further research is needed, on the one hand, to improve our understanding of convective events and, on the other hand, to develop or evaluate models that reproduce these events. This will allow to not only provide a more realistic climatology of convection for the present-day but also to investigate the evolution of convective events in an altered climate. Different type of models are available to climatologist to model convective events. However, it has been shown that recent dynamical models called convective permitting (CPS) models, which use a horizontal grid-mesh finer than 4 km, have superior skills than statistical or coarser dynamical models. Indeed fine grid-meshes are needed to model correctly the triggering and the development of convective events. In addition, the model needs to represent adequately the interaction of the soil with the planetary boundary layer (lowest part of the atmosphere). This project aims at (1) evaluating the representation of convective events in a CPS model using a large panel of observations and (2) investigating how altered properties of the climate system may disturb the climatology of convective events: (1)The different characteristics of convective events occurring in the area of Thuringia (central Germany) are evaluated for the period 2004-2014. After selecting the days with significant convective activities using a radar dataset, the convective cells are extracted using a tracking algorithm. This allows for deriving the speed, intensities, and frequencies

of these convective cells. The climatology of these properties is then compared to the one derived with the dynamical model COSMO5clm1 used at convective permitting scale (~1 km). An example of a convective event as model by the COSMO5clm1 is shown in Fig. 1. (2) In the future, different properties of the climate system may be altered. In this study, the impact on convective activities of changes in three properties are investigated, namely, the green house gazes, the land use and the soil moisture. These investigations are performed based on a set of sensitivity studies that include one or more altered climate properties. This allows to understand the impact of each altered properties separately and the impact of their combined effects. These sensitivity studies are based on simulations performed with the COSMO5clm1. These two studies are likely to improve our understanding of convective activities in the climate system and to improve the quantification of climate projections uncertainties.

Funding source
Thüringen
Ministerium für
Landwirtschaft,
Forst, Umwelt und
Naturschutz und
die Thüringer
Landesanstalt für
Umwelt und Geologie

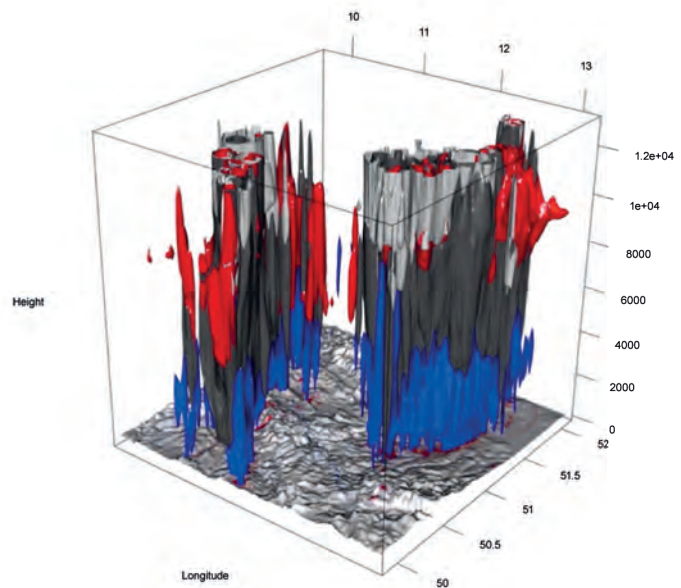


Fig. 1: Representation of different hydrometeors in the COSMO5clm1 at convective permitting scale over the Thüringen area. Rain is plotted in blue, snow in red, ice in light gray, graupel in dark gray. --

Reference

1. C. Brendel, E. Brisson, F. Heyner, E. Weigl, and B. Ahrens (2014), Bestimmung des atmosphärischen Konvektionspotentials über Thüringen. Offenbach am Main: Selbstverlag des Deutschen Wetterdienstes: 72.

The Impact of Marginal Seas on the Regional Climate

N. Akhtar, T. v. Pham, B. Ahrens

Institut für Atmosphäre und Umwelt, Goethe-Universität Frankfurt

Funding source

Hessian Initiative for the Development of Scientific and Economic Excellence (LOEWE) through the Biodiversity and Climate Research Centre (Bik-F), Frankfurt am Main

The climate system is an interactive system which contains different components such as the atmosphere, the hydrosphere (the oceans and river systems), different ice forms on the Earth's surface, land surface and all ecosystems. In order to simulate the climate system, all of these components need to be taken into account.

Besides global climate models, regional climate models are used to describe the state of the atmosphere in a limited area on regional scale. In practice, the interactive feedback of the atmosphere and the ocean is often neglected. The necessary ocean surface is taken from an external data set, for example from a forcing global climate simulation or a sea surface data analysis. However, taking the atmosphere separately gives an incomplete picture of the real climate system because the link between the different climate system components is missing.

The Mediterranean and Baltic Sea play an important role in the regional climate of Europe. Therefore, our main areas of interest are the Mediterranean Sea with its diverse wind patterns in the atmosphere and deep convection in the ocean and the North- and Baltic Seas with the complex water exchange between them. The development of a regional coupled climate model is a logical step to understand the local interactions between atmosphere and ocean. The complex processes on the interface between atmosphere and ocean are realized with direct flux exchange in a high frequency so the models could react to changes in the other component immediately.

The atmospheric model COSMO/CLM is coupled with the ocean model NEMO_Nordic over the Baltic Sea. The first results show a cooling of the atmosphere over Central Europe of over 2°C and a warming over Scandinavia in winter. In summer, the atmosphere is warmer in the vicinity of the Mediterranean Sea. Compared to the uncoupled run, the coupled is colder especially in summer in eastern Europe.²

For the Mediterranean Sea the atmospheric model COSMO/CLM is coupled with the ocean model NEMO_MED12. For example, so-called medicanes (Mediterranean hurricanes) can now be investigated in a coupled system with high atmospheric horizontal resolutions (e.g., 25 and 9 km). The results suggest that the coupled model is more proficient for systemic and detailed studies of historical medicane events, and that this model can be an effective tool for future projections.¹

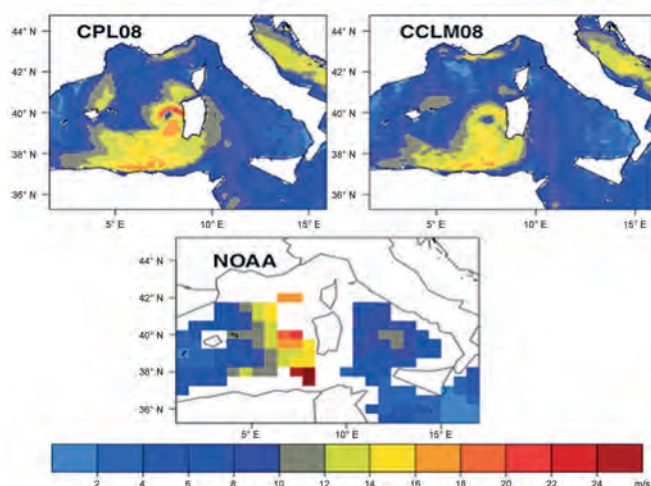


Figure:

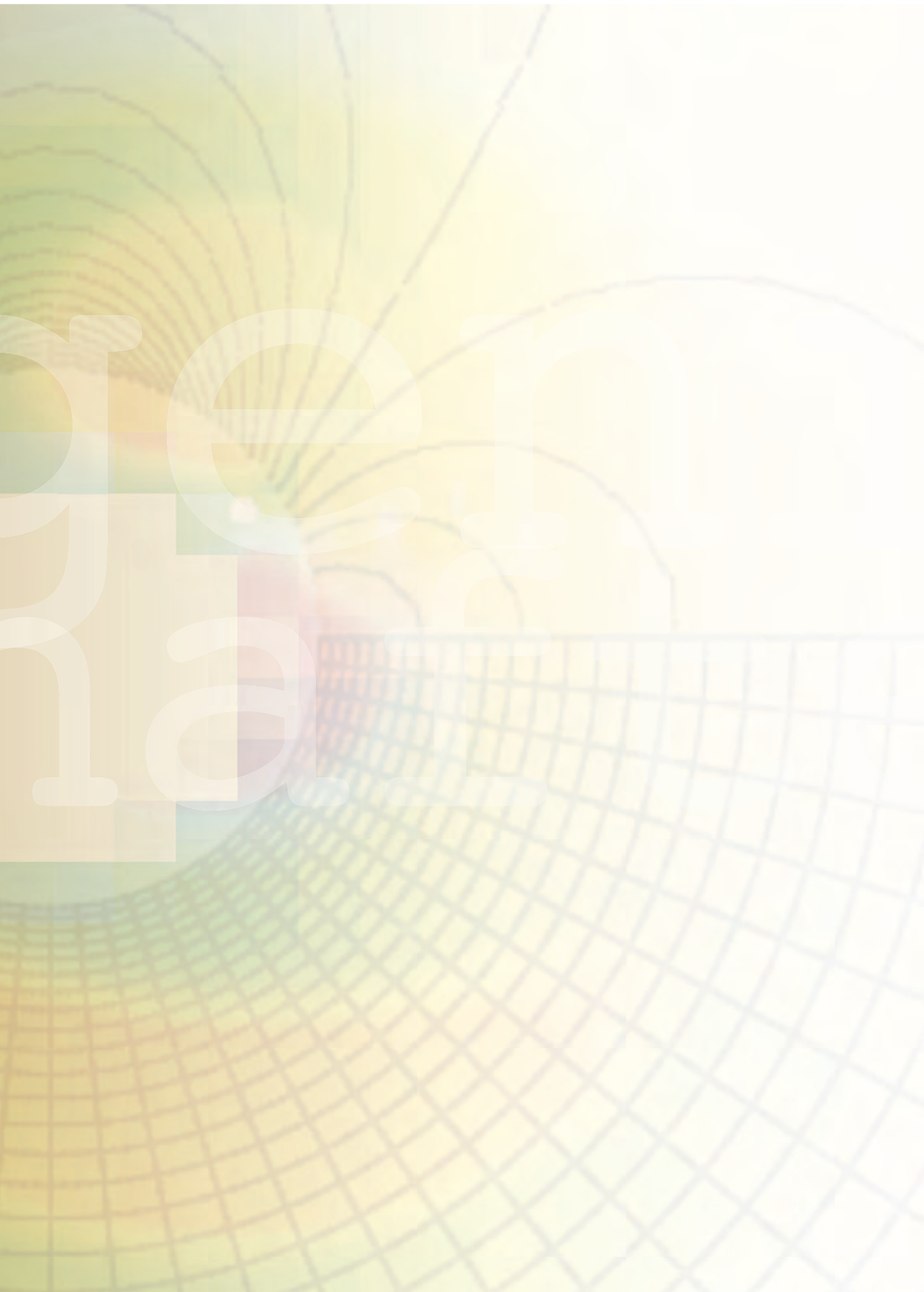
10-m wind speed (ms^{-1}) in the coupled (CPL) and atmosphere-only (CCLM), 9 km simulations in comparison with the NOAA „Blended Sea Winds“ on 10 December 1996 at 18:00 UTC

References

1. N. Akhtar, J. Brauch, A. Dobler, K. Berenger, and B. Ahrens (2014), Medicanes in an ocean-atmosphere coupled regional climate model. *Nat. Hazards Earth Syst. Sci.*, 14: 2189–2201.
2. T. Van Pham, J. Brauch, C. Dieterich, B. Frueh, and B. Ahrens (2014), New coupled atmosphere-ocean-ice system COSMOCLM/NEMO: On the air temperature sensitivity on the North and Baltic Seas, *Oceanologia*, 56: 167–189.

Ingenieurwissenschaften

Engineering
Research



Andauernde Weiterentwicklung eines Frameworks für numerische Simulationen auf Basis von Discontinuous Galerkin-Methoden

B. Müller, F. Kummer, B. Klein, M. Karcher, S. Krämer-Eis, T. Utz, M. Oberlack
Fachgebiet Strömungsdynamik, TU Darmstadt

Projektförderung
DFG

In den Ingenieurwissenschaften tritt eine Vielzahl von Problemstellungen auf, welche sich nur durch partielle Differentialgleichungen realitätsnah beschreiben lassen. Die wohl bekanntesten Vertreter dieses Gleichungstyps sind die Maxwell-Gleichungen zur Beschreibung von elektromagnetischen Feldern, die Schrödinger-Gleichung zur Beschreibung von quantenmechanischen Systemen und die Navier-Stokes Gleichungen der Strömungsdynamik. Alle diese Beispiele besitzen die Gemeinsamkeit, dass für praxisrelevante Geometrien und Materialparameter keine exakten Lösungen bekannt sind, so dass diese im Rahmen von numerischen Simulationen auf einer Gitterbeschreibung des Problems annähernd berechnet werden müssen. Sowohl die Genauigkeit als auch der Rechenaufwand einer solchen Simulation wird maßgeblich durch das verwendete Diskretisierungsschema und die Auflösung bestimmt. Unter Auflösung versteht man hierbei die Anzahl der Gitterpunkte in Raum und Zeit, welche im Kontext der Strömungsdynamik im übertragenen Sinne als „Messpunkte“ für die lokalen Geschwindigkeiten und den Druck verstanden werden können. Von zentralem Interesse bei solchen Verfahren ist die Konvergenzrate, welche die Abnahme des Fehlers bei einer Verfeinerung des Gitters beschreibt. In der Industrie werden zur Zeit hauptsächlich Verfahren mit quadratischer Konvergenz eingesetzt, d.h. durch die Verdopplung der Auflösung in jede Raumrichtung wird der Fehler um den Faktor 4 ($=2^2$) reduziert. Andererseits wächst der Rechenaufwand für dreidimensionale Simulationen in diesem Fall mindestens um den Faktor 8 ($=2^3$), so dass sehr schnell die Grenzen des technisch machbaren erreicht werden. Am Fachgebiet Strömungsdynamik werden aus diesem Grunde seit einiger Zeit sog. Discontinuous

Galerkin-Methoden eingesetzt, welche prinzipiell beliebig hohe Konvergenzraten erreichen können. Auch hier steigt der Rechenaufwand unter Gitterverfeinerung natürlich um den gleichen Faktor, aber der Zugewinn an Genauigkeit ist bei Weitem größer (Abbildung 1). Zusätzlich zum Berechnungsaufwand spielt insbesondere im wissenschaftlichen Kontext der Implementierungsaufwand eine nicht zu vernachlässigende Rolle, da die Verwendung von Supercomputern erhebliche Anforderungen an die Fähigkeiten der Programmierer stellt. Um verschiedene Problemklassen und Lösungsansätze mit minimalen Mehraufwand behandeln zu können wird am Fachgebiet Strömungsdynamik daher seit einigen Jahren das Software-Framework BoSSS (Bounded Support Spectral Solver) stetig weiterentwickelt¹⁻⁹. Das Framework erlaubt es Ingenieuren mit geringen Vorkenntnissen im Bereich der Software-Entwicklung in kürzester Zeit leistungsfähige, problemspezifische Applikationen zu implementieren. Auf Basis dieses Frameworks konnten inzwischen Lösungsalgorithmen für eine breite Klasse von Problemen entwickelt und mit Hilfe des Lichtenberg-Hochleistungsrechner anhand von geeigneten Testfällen verifiziert werden. Ein klassisches Beispiel ist die dreidimensionale Umströmung von Festkörpern mit inkompressiblen Medien wie Wasser (Abbildung 2), welche als Startpunkt für physikalisch anspruchsvollere Anwendungen gesehen werden kann. Beispiele sind die Simulation von Strömungen, die sich aufgrund von temperaturabhängigen Materialparametern (wie Dichte und Viskosität) in flüssigen Medien einstellen (Abbildung 3), sowie die Untersuchung des Einflusses von starken elektrischen Feldern auf Wassertropfen (Abbildung 4), welche für die Lebensdauer von Hochspannungsisolatoren eine maßgebliche Rolle spielen.

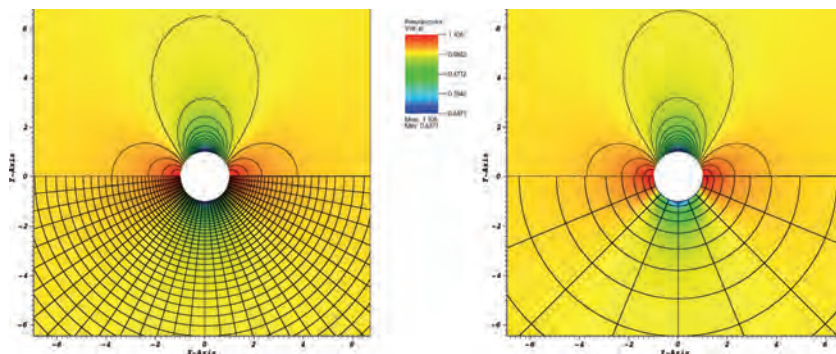


Abb. 2

Abb. 2



Abb. 3

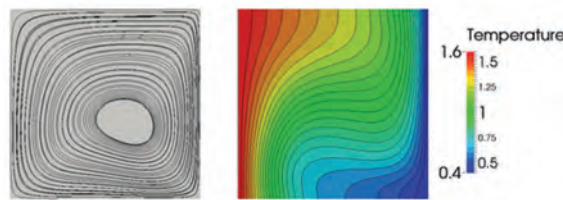
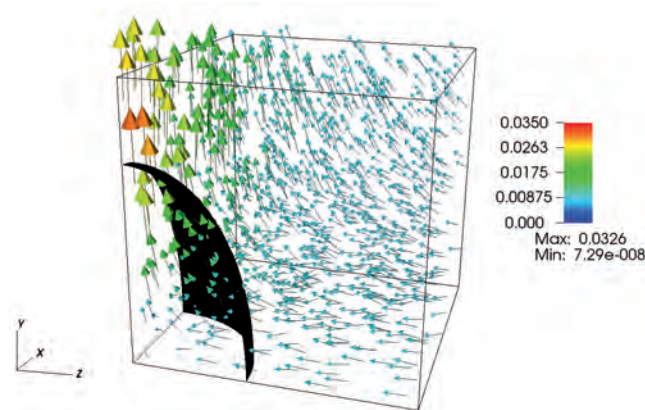


Abb. 4



References

1. F. Kummer (2012), PhD thesis: The BoSSS Discontinuous Galerkin solver for incompressible fluid dynamics and an extension to singular equations, TU Darmstadt.
2. B. Müller, F. Kummer, M. Oberlack, and Y. Wang (2012), Simple multidimensional integration of discontinuous functions with application to level set methods, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 92, 7: 637–651.
3. F. Kummer and M. Oberlack (2013), An Extension of the Discontinuous Galerkin Method for the Singular Poisson Equation, *SIAM Journal on Scientific Computing*, 35, 2: A603–A622.
4. B. Müller, F. Kummer, and M. Oberlack (2013), Highly accurate surface and volume integration on implicit domains by means of moment-fitting, *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 96, 8: 512–528.
5. B. Klein, F. Kummer, and M. Oberlack (2013), A SIMPLE based discontinuous Galerkin solver for steady incompressible flows, *Journal of Computational Physics*, 237: 235–250.
6. B. Müller (2014), PhD thesis: Methods for higher order numerical simulations of complex inviscid fluids with immersed boundaries, TU Darmstadt.
7. R. Mousavi (2014), PhD thesis: Level Set Method for Simulating the Dynamics of the Fluid-Fluid Interfaces: Application of a Discontinuous Galerkin Method, TU Darmstadt.
8. N. Emamy (2014), PhD thesis: Numerical simulation of deformation of a droplet in a stationary electric field using DG, TU Darmstadt.
9. B. Klein, F. Kummer, M. Keil, and M. Oberlack (2015), An extension of the SIMPLE based discontinuous Galerkin solver to unsteady incompressible flows, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*.

CFD-Simulation der Fahrzeugumströmung - Einfluss unterschiedlicher Heckformen

D. Hanssmann, L. Kutej

Fachgebiet Strömungslehre und Aerodynamik, TU Darmstadt

Der Luftwiderstand spielt als Teil des gesamten Fahrzeugwiderstands eine entscheidende Rolle beim Karosserie-Entwurf und dessen Optimierung. Schon die Grundform beeinflusst die aerodynamischen Eigenschaften des Fahrzeuges stark. Die größten Energieverluste beziehen sich auf den instationären Nachlauf. Die Wirbelstrukturen im Nachlauf sind von der Fahrzeugheckform direkt beeinflusst. Grundsätzlich werden drei Heckvarianten unterschieden, das Stufenheck, das Schrägheck und das Vollheck. Eine wichtige Rolle spielt die Ablösung der Strömung und die Impulsrückgewinnung.

In dieser Masterarbeit soll mittels numerischer Strömungssimulationen geklärt werden, wie sich die drei Heckformen und ihre Nachläufe untereinander unterscheiden. Es werden Druckfelder auf der Fahrzeugoberfläche und sich daraus ergebende Luftwiderstände einzelner Oberflächenkomponenten ermittelt. Simuliert wird das Fahrzeugmodell „DrivAer“, das an der TU München in Kooperation mit Audi AG und BMW Group entworfen wurde. Alle Simulationen werden mit der Software AVL FIRE der Fa. AVL List GmbH, Graz durchgeführt.

Zur Erfassung von relevanten hoch-instationären Wirbelstrukturen im Nachlauf des Fahrzeuges eignen sich wirbelauflösende hybride LES/RANS Modelle sehr gut. Die vorliegende Arbeit zielt insbesondere auf die Anwendung der sog. PANS (Partially-Averaged Navier Stokes) Methode in Verbindung mit einem die Reynolds-Spannungsanisotropie erfassenden Turbulenzmodell ab. Neben einer stationären RANS Simulation, wird auch eine instationäre RANS Simulation und eine instationäre PANS Simulation durchgeführt.

Die PANS Simulationen liefern im Vergleich zu den URANS und RANS Simulationen sehr gute Ergebnisse. Die Abweichung der PANS Ergebnisse von den Referenzwerten liegt beim Widerstand bei allen Heckformen unterhalb von fünf Prozent. Beim Stufenheck liegt diese bei -0,011 (-3,74 %), beim Vollheck bei -0,011 (-3,36 %) und beim Fließheck lediglich bei -0,003 (-1,03 %). In allen Fällen konnte die Abweichung im Vergleich zu den RANS Simulationen mehr als halbiert werden. Auch beim Auftrieb führt PANS zu den besten Näherungen. Den höchsten Widerstandsbeiwert weist das Vollheck auf. Dies lässt sich mit dem größten Totwasser und dem längsten und dicksten Nachlauf aller

Heckformen erklären, welcher für einen starken Impulsverlust in Fahrtrichtung sorgt. Die Heckgeometrie des Vollhecks sorgt, abgesehen vom Totwassergebiet, kaum für eine Ablenkung der Stromlinien. Einhergehend erfährt das Vollheck kaum eine Rückstoßwirkung mit Vertikalkomponente, womit sich der geringste Auftriebsbeiwert dieser Heckkonfiguration erklären lässt. Die Betrachtung der Druckbeiwerte unterstreicht dies durch den höheren Druck auf dem Fahrzeugdach und dem niedrigeren Druck auf der Fahrzeugunterseite im Heckbereich, verglichen mit den beiden anderen Heckvarianten.

Fließheck und Stufenheck weisen ein deutlich kleineres Totwassergebiet und einen deutlich kürzeren und dünneren Nachlauf auf, was sich im geringeren Widerstandsbeiwert beider Heckformen niederschlägt. Im Vergleich zum Vollheck erfährt die Strömung beim Verlassen der Oberseite des Fließ- und des Stufenhecks eine starke Vertikalkomponente, wodurch beide Heckformen eine nach oben gerichtete Rückstoßkraft erfahren, die sich in den deutlich höheren Auftriebsbeiwerten beider Heckformen quantifiziert. Bei beiden Heckformen liegt ein geringerer Druck auf dem Fahrzeugdach als beim Vollheck vor. Die Unterschiede des Widerstandes zwischen Fließheck und Stufenheck erweisen sich als zu gering, um sie in den qualitativen Abbildungen zu validieren. Der geringere Auftriebsbeiwert des Stufenhecks lässt sich hingegen an dem im Mittel geringeren Druck des Stufenhecks entlang der Fahrzeugoberfläche, vor allem dem hinteren Bereichs des Fahrzeugdachs, belegen. Bei allen Heckkonfigurationen zeigen die zwei gegensätzlich drehenden Wirbelstrukturen die zweidimensionalen Spuren des dreidimensionalen Ringwirbels im Totwassergebiet.

Es konnte gezeigt werden, dass das DrivAer-Modell grundsätzlich eine hohe Eignung für das tiefergehende Verständnis und die detaillierte Analyse der aerodynamischen Phänomene an Kraftfahrzeugen, insbesondere bezogen auf die aerodynamischen Auswirkungen der Fahrzeugheckform, aufweist. Ebenso konnte gezeigt werden, dass sowohl die Simulationssoftware AVL FIRE der AVL List GmbH als auch das Partially-Averaged-Navier-Stokes (PANS) Modell als hybrides Verfahren zur Simulation turbulenter Strömungen eine hohe Eignung für die Simulation und einhergehende Analyse aerodynamischer Problemstellungen an Kraftfahrzeugen aufweisen.

Computational Modeling of the Flow Past Stationary and Rotating Road Vehicle Wheel

A. Correa Pineda, L. Kutej

Fachgebiet Strömungslehre und Aerodynamik, TU Darmstadt

In this bachelor thesis an investigation of a flow with high Reynolds number ($Re=1.4 \times 10^5$) past stationary and rotating circular cylinder is performed. URANS (Unsteady Reynolds Averaged Navier-Stokes), PANS (Partially-Averaged Navier-Stokes) and VLES (Very Large Eddy Simulation) methods, where a $k-\epsilon-\zeta-f$ turbulence model is used, are performed. The objective is to compare results of drag, lift, and pressure coefficients and velocity profiles, with experimental data of Cantwell & Coles (1983) and with numerical results of Breuer (2000) and so validates used PANS and VLES methods. The investigation is carried out to establish an influence of a CFL number and a mesh on the results. The circular cylinder has a diameter of 0.0426m, which is the most used scale in many calculations. Afterwards, an investigation of a flow with high Reynolds number ($Re=3 \times 10^5$) around an isolated wheel with ground contact is performed and computed by the same methods aforementioned.

Two cases are considered: a nonrotating wheel on a stationary ground and a rotating wheel on a moving ground; the wheel has a diameter of 0.416m, which is approximately ten times bigger than the cylinder. The geometry which was chosen is a Fackrell's wheel B with wheel shoulder shape 2 (1972). The objective is to compare the results of lift, drag coefficients, pressure distribution, and velocity fields, with experimental data of Fackrell (1972) to show that the chosen URANS, PANS, VLES methods are suitable for such kind of cases with high Reynolds number. The results have an application to design of road vehicles.

The section of the cylinder demonstrates deficits of simple URANS simulation with $k-\epsilon-\zeta-f$ model. The turbulence is unresolved, there are modeled only the biggest structures. The other two eddy resolving methods PANS and VLES resolve the turbulence in important parts of the computational domain what brings significant improvement to capture the flow structures properly and so get better results for all important flow variables. As regards to the remaining results, i.e. the separation point, drag coefficient, lift coefficient, and pressure

coefficient, are in concert with the experimental data with Aoki (2001) and Cantwell and Coles (1983) for both the stationary and rotating cases. If the refinement of the mesh is small, both methods are close to achieve the same results. This does not happen with URANS, as shown by its performance being completely different from that of PANS and VLES. The final filter parameter fk demonstrates differences between PANS and VLES.

In the case of PANS there are some areas on the cylinder surface and its boundary layer where the PANS does not resolve the turbulence and use more the URANS $k-\epsilon-\zeta-f$ unresolved part. On the other hand VLES method resolves the turbulence on this important cylinder surface and its boundary layer. In this fact VLES deliver more accurate values of variables which depend on properly capturing of behavior in near wall region. The difference in the fk which was observed is created by different approach by estimation of resolved and unresolved turbulent kinetic energy. The velocity profiles results for nonrotating case predict differences with the experimental data but this differences will not change the final results or conclusions. The averaged kinetic energy plots demonstrate that a big recirculation area has a small kinetic energy and vice versa. The results show that the mesh is coarse enough to benefit from the hybrid approach VLES because the relation with fk is adequate. The y^+ values on the cylinder are accurate enough to properly resolve the viscous sublayer.

The section of the wheel demonstrates that in order to see the structures of the flow, it can be calculated with any of the mentioned methods, but to get a detail of these structures, it is better to use a method that resolve the eddy structures, for example PANS or VLES. The same wind tunnel domain than Fackrell's (1974) was taken in order to preserve the blockage effect as it is a small domain. The calculations show that the mesh is not fine enough because the relation with fk is not adequate. More proofs are needed to totally validate the VLES method, but with the available information, a VLES with implemented $k-\epsilon-\zeta-f$ model is a good way to calculate critical Reynolds numbers.

Development of Methods for the Simulation of Technical Combustion Systems

A. Avdić, G. Kuenne, J. Janicka

Fachgebiet Energie und Kraftwerkstechnik, TU Darmstadt

Funding source
DFG

The design and the optimization of modern combustion devices represent challenging tasks, where complex physical processes such as the heat transfer, the underlying turbulent flow field as well as the pollutant formation need to be considered. Current trend in operation of industrial gas turbines and aero-engines implies using the lean-premixed burning conditions aiming at the reduction of the harmful emissions and efficiency improvement. This leads to an increasing usage of computational methodology, which allows detailed insight into combustion physics and processes controlling the emission formation. The permanent increase of computer resources has ensured that the large eddy simulation (LES) rationale becomes a commonly used computational tool for complex turbulent applications, including both reacting and non-reacting flows. This project focuses on development and assessment of combustion models in context of LES and configurations relevant for technical combustion devices.

Within this work, the simulation of turbulent combustion is realized in two steps. The first step aims at describing detailed reaction chemistry by a small number of transported controlling variables using tabulation. The approach chosen is based on the tabulation of precomputed thermochemical states to account for the relevant physics of the flame during the simulation.

In the second step, modeling approaches need to be employed in order to recover the sub-grid turbulence-flame interaction on the coarser grids, commonly used in simulations of complex geometries. Herein, two different combustion modeling approaches are developed and assessed, i.e. artificial thickening of the flame front (ATF) and Eulerian Monte Carlo stochastic field (SFi) method. The conjunction of developed methods with the FGM chemistry description approach is expected to increase the predicting capability of the individual methods as well as significantly reduce the computational costs associated with the simulation of complex combustion devices. The application investigated within this work features a swirl stabilized turbulent premixed flame, which demonstrates a typical flame stabilization strategy found in industrial burners (see Fig. 1a). The simulations have been conducted with academic code FASTEST, which is extended and adopted for the simulations of turbulent reactive flows. Figure 1b and 1c illustrate the instantaneous flame shape and the underlying turbulent flow field predicted by the two models developed. Both approaches have been validated using available experimental data, whereby the resulting investigation revealed and quantified the different model sensitivity to the underlying physics of the flame. Furthermore, the conducted simulations allowed detailed insight into physics of the investigated burner, being beyond the reach of the experimental techniques.

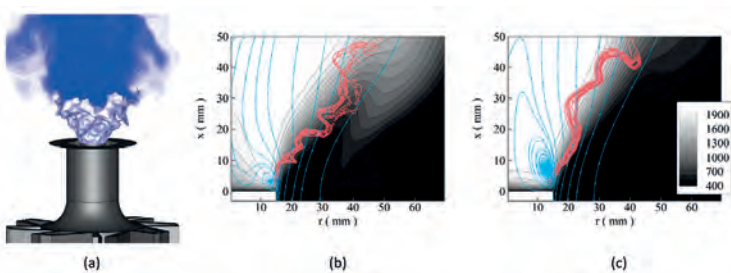


Figure 1:
a) Swirl stabilized turbulent premixed flame. Subfigures b) and c) represent 2D view of the instantaneous flame shape and the flow field obtained by SFi and ATF combustion models, respectively.

Within this project the development of joint ATF-FGM and SFi-FGM modeling approaches have been conducted, where detailed assessment regarding the predicting capability of the approaches has been addressed. The results obtained have demonstrated the capability of both methods in handling premixed turbulent flames within complex configurations. Further work will include extension and evaluation of the implemented methods for prediction of more complex physics in technically relevant applications, e.g. non-premixed and partially premixed flames, local flame extinction, and flame stratification.

References

1. A. Avdić, G. Kuenne, A. Ketelheun, A. Sadiki, S. Jakirlić, and J. Janicka (2014), High Performance Computing of the Darmstadt Stratified Burner by means of Large Eddy Simulation and a joint ATF-FGM approach, *Computing and Visualization in Science*, 2(16): 77–88.
2. G. Kuenne, A. Ketelheun, and J. Janicka (2011), LES modeling of premixed combustion using a thickened flame approach coupled with FGM tabulated chemistry, *Combustion and Flame*, 9(158): 1750–1767.

Effiziente Berechnung von Fluid-Struktur-Interaktion — mit Hilfe adaptiver Gitterverschiebung

S. Kneißl, D. Sternel, M. Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, TU Darmstadt

Projektförderung
SPPEXA

Beim Flattern einer Fahne im Wind beeinflussen sich Strömung und Fahne gegenseitig. Man spricht allgemein von Fluid-Struktur-Interaktion (FSI). Sie ist in Natur und Technik ein wichtiges Phänomen. Es gibt erwünschte Eigenschaften wie beispielsweise den verringerten Strömungswiderstand, den ein Delfin aufgrund seines elastischen Unterhautgewebes erfährt, aber auch unerwünschte, wie Lärm oder Strukturversagen technischer Konstruktionen. Dementsprechend sind Ingenieure sehr an der Untersuchung solcher Phänomene interessiert.

Viele FSI Szenarien sind jedoch experimentell aus technischen oder finanziellen Gründen nur schwer zu untersuchen. Numerische Berechnungsverfahren können hier Abhilfe schaffen, ihr praktischer Nutzwert hängt jedoch stark von der benötigten Berechnungsdauer ab. Insbesondere in Bezug auf die Kopplung von bewegter Struktur mit ihrer Umströmung ergeben sich neue Fragen der Effizienz.

Maßgeblich für die Berechnungsdauer ist unter anderem die Anzahl der Freiheitsgrade des zu lösenden Systems. Hier dominiert in der Regel die Fluid Diskretisierung aufgrund der hohen Anforderungen turbulenter Strömungen. A priori sind die Auflösungsanforderungen bezüglich des numerischen Gitters nicht bekannt. Abschätzungen sind schwierig, da das Strömungsfeld von der Strukturbewegung abhängt. Eine zu grobe Auflösung führt zu unbrauchbaren Simulationen, die wiederholt werden müssen. Eine zu feine Auflösung verbraucht mehr Ressourcen als notwendig. Ideal ist es, das Gitter laufend der Lösung anzupassen.

Im Rahmen dieses Projekts war es das Ziel, eine Methode zu entwickeln, die in der Lage ist das Gitter entsprechend der sich verändernden Berechnungsdomäne unter Berücksichtigung des sich ändernden Strömungsfelds zu verschieben. Hierzu wurde ein Optimierungsansatz gewählt. Die Güte des Gitters wird als Funktion von Gitterpunktverschiebungen formuliert.

So kann ein Trust-Region-Verfahren zur Maximierung genutzt werden. Eine effiziente Parallelisierung auf Basis der Gebietszerlegung (engl. domain decomposition) des Strömungslösers kommt dabei zum Einsatz. Abbildung 1 zeigt die Momentaufnahme einer Strömung um eine schnell abklappende Platte und dem dazugehörigem Gitter. Es lässt sich ein deutlich Verfeinerung des Gitters an Vorder- und Hinterkanten erkennen. Sie wurden erst durch die Abklappbewegung notwendig. Zur Berechnung des Strömungsfelds wird der Finite-Volumen-Löser FASTEST¹ und zur Berechnung der Strukturdeformation der Finite-Elemente-Löser FEAP² verwendet. Der Austausch und die Interpolation der wechselseitigen Randbedingungen in Form von Kraft und Verschiebung wird von PRECICE³ durchgeführt. Sowohl die Kommunikation innerhalb als auch zwischen den Lösern erfolgt mittels MPI⁴.

Die hier vorgestellte Gitteradaptivität für FSI Berechnungen konnte erfolgreich auf dem Lichtenbergcluster in Darmstadt getestet werden. Es zeigten sich sowohl die prinzipielle Machbarkeit des Konzepts als auch die Effizienz der Parallelisierung. Auch in weiteren FSI bezogenen Projekten des Fachgebiets kann die entwickelte Methode zur Gitterverschiebung für effizientere Berechnungen eingesetzt werden.

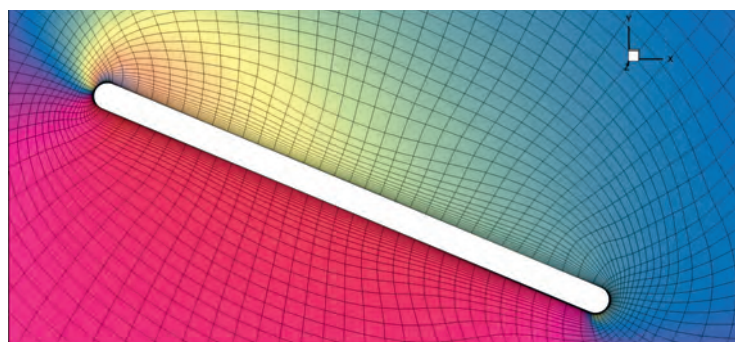


Abbildung 1: Qualitative Druckverteilung und Gitter einer abklappenden Platte

Literatur

1. URL: http://www.fnb.tu-darmstadt.de/forschung_fnb/software_fnb/software_fnb.de.jsp
2. URL: <http://www.ce.berkeley.edu/projects/feap/>
3. URL: http://www5.in.tum.de/wiki/index.php/Precice_Webpage
4. URL: <http://www.open-mpi.org/>

Enhanced Compact Heat Exchangers

F. Loosmann, C. Tropea

Fachgebiet Strömungslehre und Aerodynamik, TU Darmstadt

Funding source
GSCE
TU Darmstadt

Heat exchangers are used wherever energy is to be transformed from a high temperature fluid stream to another at lower temperature. Cooling of computer chips, cooling of air plane turbine blades, heating of bleed air and air conditioning are some common examples for heat exchanger applications. Researchers are investigating heat exchangers intensively and aim to build more efficient heat exchangers. Aims of optimization are minimizing the size of the heat exchanger or minimizing the pumping power (cost), which is required to drive the cool fluid through the heat exchanger, or maximizing the amount of heat transferred (benefit) by the heat exchanger. The area across which heat transfer occurs is called wetted area and is a possible key factor for optimizing heat exchangers. Pin fins, wire meshes, metal foams and other open-cell structures all serve to increase the wetted area.¹⁻⁵ However, the design of these open-cell structures can be influenced only to a certain degree. Furthermore, these structures are not specifically designed to optimize heat exchangers. They are used, because they are readily available. In contrast, Direct Metal Laser Sintering⁶ allows the design and production of arbitrary open-cell structures. Direct Metal Laser Sintering is able to produce competitive open-cell heat exchangers.⁷ This possibility raises the question, how an optimal open-cell structure looks like. Detailed

knowledge about the impact of design parameters, such as pore size or strut diameter, is required to answer this question. In addition, investigations are required on where the heat is actually transferred to within the open-cell heat exchange. In other words: How much of the wetted area contributes to the heat transfer? This project aims to answer this question. Therefore, a numerical investigation of two open-cell heat exchangers is performed in 3D using the openFOAM chtMultiRegionFOAM solver.

Two different open-cell heat exchangers were designed. Figure 1 and Figure 2 show the unit cells that were patterned in space to construct the two open-cell heat exchangers. The wetted area of the cubic design (Figure 1) is twice as large as the wetted area of the tetradecahedral design (Figure 2). However, the maximal solid cross-sectional area of the cubic design is 2.3 times larger than the one of the tetradecahedral design. Numerical as well as experimental results⁷ show that the pumping power that is required by the cubic design is 2.5 times higher than the required pumping power (cost) of the tetradecahedral design, while the amount of heat transferred (benefit) is equal for both designs. Thus, the overall heat exchanger cost-benefit ratio of the tetradecahedral design is about five times better as the cost-benefit ratio of the heat exchanger cubic design. A closer look on the amount of wetted area that contributes to the heat transfer unveils that only a fraction of the wetted area is contributing to the heat transfer in both cases. Areas with small temperature difference between hot and cold stream, such as recirculation areas, do not contribute to the heat transfer. At the moment, further numerical simulations are executed in order to investigate the two heat exchangers at different operating conditions.

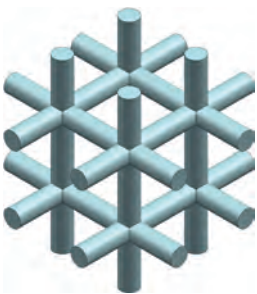


Figure 1

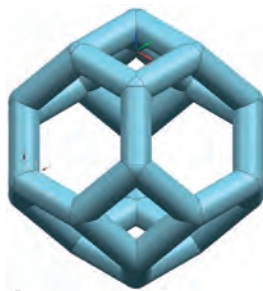


Figure 2

References

1. L. Tianjian (2002), Ultralight Porous Metals: from Fundamentals to Applications, *Acta Mechanica Sinica*, vol. 18(5): 457–479.
2. J. P. Bonnet, F. Topin, and L. Tardist (2008), Flow Laws in Metal Foams: Compressibility and Pore Size Effects, *Transport in Porous Media*, vol. 73(2): 233–254.
3. A. Bhattacharya and R.L. Mahajan (2006), Metal Foam and Finned Metal Foam Heat Sinks for Electronics Cooling in Buoyancy-Induced Convection, *ASME Journal of Electronic Packaging*, vol. 32(128): 259–266.
4. J. Banhart (2001), *Manufacture, Characterization and Application of Cellular Metals and Metal Foams*, *Progress in Material Science*, vol. 46: 559–632.
5. T. J. Lu, L. Valdevit, and A.G. Evans (2005), Active Cooling by Metallic Sandwich Structures with Periodic Cores, *Progress in Materials Science*, vol. 50: 789–815.
6. M.W. Khaing, J.Y.H Fuh, and L. Lu (2001), Direct Metal Laser Sintering for rapid tooling: processing and characterization of EOS parts, *Journal of Materials Processing Technology*, vol. 113: 269–272.
7. R. Rezaey, F. Loosmann, S. Chandra, and C. Tropea (2013), Experimental investigation of heat transfer and fluid flow in laser sintered heat exchangers, *ExHFT-8 Book of Abstracts*, vol. 8: 67.

Projektförderung
GSCE
TU Darmstadt

In vielen technischen Bereichen, wie z. B. in der Luft-, Raumfahrt- oder Automobilindustrie, treten turbulente Strömungen auf. Um diese Strömungen zu untersuchen, können Experimente oder numerische Simulationen durchgeführt werden. Aus Kostengründen werden verstärkt Computer-Simulationen eingesetzt. Wissenschaftler der TU Darmstadt versuchen optimale Verfahren zu finden, die korrekte Ergebnisse bei gleichzeitig geringem Rechenaufwand liefern.

Die mathematische Beschreibung einer turbulenten Strömung liefern die Navier-Stokes-Gleichungen, die wegen ihrer Nichtlinearität nicht analytisch gelöst werden können. Durch die schnelle Entwicklung der Computertechnik ist es heute möglich, diese Gleichungen numerisch zu lösen. Mit der direkten numerischen Simulation (DNS) können sämtliche auftretenden Wirbel aufgelöst werden. Dies erfordert jedoch einen sehr hohen Rechenaufwand, weshalb die Anwendung einer DNS auf absehbare Zeit auf einfache Geometrien und niedrige Reynoldszahlen beschränkt ist.²

Die Grobstruktursimulation (engl. Large Eddy Simulation, LES) stellt eine Reduzierung der Rechenanforderung im Vergleich zur DNS dar. Dabei wird nicht das gesamte Spektrum der turbulenten Strukturen simuliert, sondern lediglich die großen energietragenden Skalen. Die kleinen Turbulenzstrukturen werden gefiltert und modelliert.¹ Dies führt zu einer wesentlichen Reduzierung des Rechenaufwands und erlaubt es, turbulente Strömungen mit höheren Reynoldszahlen und komplizierteren Geometrien zu untersuchen.

Für technische Anwendungen reicht es oft aus, eine statistische Beschreibung turbulenter Strömungen zu verwenden, die die mittlere Wirkung der Turbulenz berücksichtigt. Die entsprechenden Modelle werden als statistische Turbulenzmodelle (RANS) bezeichnet. Da in den RANS-Gleichungen alle turbulenten Strukturen modelliert werden, liefern die statischen Turbulenzmodelle teilweise erhebliche Abweichung von der Realität. In letzter Zeit werden auch verstärkt sogenannte Hybrid-Modelle benutzt. Sie nutzen die Vorteile der oben

erläuterten Methoden. Die Very Large Eddy Simulation kombiniert beispielsweise die RANS und die DNS Methode.² Das Modell schaltet zwischen diesen beiden Modi um, abhängig von einer so genannte „Numerical-Resolution“-Funktion. Um zu prüfen, ob ein neu implementiertes VLES-Modell korrekte Ergebnisse liefert und um die benötigte Rechenzeit dieser Methode mit anderen hybriden Methoden zu vergleichen, werden unterschiedliche Simulationen durchgeführt.

Als erster Validierungstestfall wird eine Strömung betrachtet, bei der durch die Mischung zweier paralleler Strömungen mit unterschiedlichen Geschwindigkeiten eine Scherschicht entsteht. Freie Scherschichten treten in vielen technischen Anwendungen auf, wie beispielsweise bei der Ablösung an einem Profil oder bei Strahltriebwerken zwischen dem Abgasstrahl und der Umgebungsluft (Abb. 1). Als zweiter Testfall wird eine Strömung um eine geneigte Platte betrachtet (Abb. 2). Beide Simulationen benötigen ein Rechengebiet mit etwa zwei Millionen Zellen.

Bei turbulenten Strömungen lassen sich die Strömungsgrößen nicht anhand einer Momentaufnahme beurteilen. Vielmehr muss die Strömung dafür über einen großen Zeitraum gemittelt werden, um auskonvergierte Mittelwerte der Strömungsgrößen zu erhalten. Zusammen mit der großen Anzahl der Zellen führt dies zu sehr langen Rechenzeiten. Die Benutzung des Lichtenberg-Clusters erlaubt es, diese Simulationen parallelisiert durchzuführen, was die Rechenzeit deutlich reduziert.

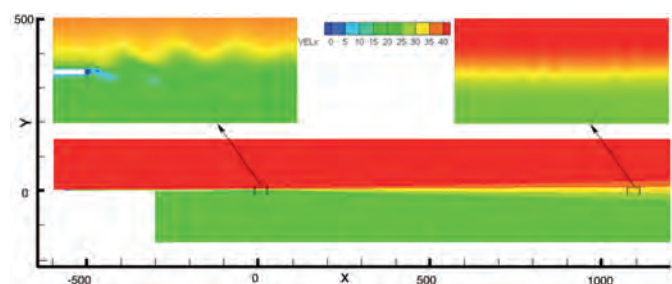


Abb. 1

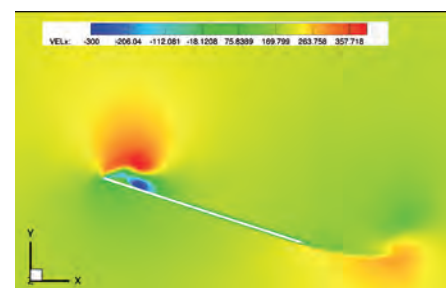


Abb. 2

Literatur

1. J. Fröhlich (2006), Large eddy simulation turbulenter Strömungen. Vol. 1. Wiesbaden: Teubner.
2. C.Y. Chang, S. Jakirlić, K. Dietrich, B. Basara, and C. Tropea (2014), Swirling flow in a tube with variably-shaped outlet orifices: An LES and VLES study, International Journal of Heat and Fluid Flow, Vol. 49, Oct. 2014: 28-42.

Large Eddy Simulation of Auto-Ignition and Flame Propagation in a HCCI Engine Using a Progress Variable Approach

E. Yildar, C. He, G. Künne, J. Janicka

Fachgebiet Energie und Kraftwerkstechnik, TU Darmstadt

Funding source

Forschungsvereinigung
Verbrennungskraftmaschinen e.V. (FVV)

Homogenous Charge Compression Ignition (HCCI) engines are of great technological interest as they combine the advantages of both spark-ignition (SI) and conventional compression ignition engines. Firstly, due to the highly diluted charges, high flame temperatures are avoided, thus reducing the formation of nitric oxides. Secondly, the thermal efficiency can reach values similar to conventional compression ignition engines due to the high compression ratio.¹ In HCCI engines, the premixed charge ignites homogeneously due to the high temperatures achieved during the compression. In contrast to SI engines, where after the spark ignition the flame front propagates through the charge HCCI conditions this phenomenon is hardly present.² Hence, the

modeling of an HCCI engine can be separated into two steps: first the auto-ignition process is considered and successively its transition towards flame propagation. The present work focuses first on the various aspects of the auto-ignition, second the transition between ignition and flame propagation. Particularly, the gasoline-HCCI engine built and experimentally investigated at the Institute of Piston Machine (IFKM), Karlsruhe Institute of Technology has been simulated. The computations have been performed using the KIVA-4mpi code. In previous studies^{3,4} simulations of internal combustion (IC) engines using KIVA-3V with LES have been also carried out. In this work, Large Eddy Simulation has also been employed to describe the highly unsteady flow field including the occurrence of cycle-to-cycle variations. In order to capture the complex dynamics of the auto-ignition process the code has been further extended to account for tabulated chemistry based on a progress variable approach. The combustion modelling is based on tabulated chemistry approach. For ignition and flame propagation two different tables are delivered by Benzinger from Institute of Technical Thermodynamics, Karlsruhe Institute of Technology (KIT). The LES solver is to be first validated for the cold flow case. For this purpose engine simulations with 50 cycles have to be performed and compared with experimental data. The newly implemented auto ignition model has to then be tested against the detailed reaction scheme using simulations of simple ignition scenarios in homogenous reaction systems (Figure 1) and then for a complex engine geometry (Figure 2). Further, the newly implemented the flame propagation model and the transition model between ignition kernel and flame propagation have to be tested for simple geometries and then for the related engine configuration. Finally 50 full engine cycles are to be simulated using the new combustion modelling approach will be presented.

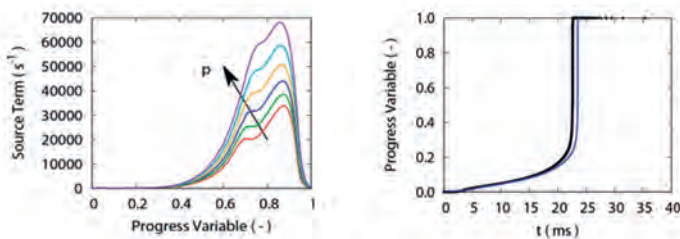


Fig. 1:

Left: slice of the chemistry table showing the progress variables source term for pressure levels from 10bar - 31bar ($T_D=833K$).

Right: temporal evolution of an ignition sequence ($p_D=12bar$, $T_D=833K$) predicted with detailed chemistry (points) an progress variable approach in KIVA-4mpi.



Fig. 2:

Left: Geometry of the Karlsruhe engine at 360° CA.

Right: Geometry of the Karlsruhe engine at 540° CA.

References

1. J.E. Dec (2009), Proceedings of the Combustion Institute, 32: 2727-2742.
2. C.S. Daw, R.M. Wagner, K.D. Edwards, and J.B. Green Jr. (2007), Proceedings of the Combustion Institute, 31: 2887-2894.
3. D. Goryntsev, A. Sadiki, and J. Janicka (2011), SAE Technical Paper 2011-01-1886
4. D. Goryntsev, A. Sadiki, and J. Janicka (2013), Proc. Comb. Inst. 34: 2969—2976
5. J.C.G. Andrae and R.A. Head (2009), Combustion and Flame, 156: 842—851.
6. M.S. Benzinger, R. Schießl, and U. Maas (2013), Tabulation Strategies for simplified Chemistry in Combustion: Adaptively refined and equidistant Approach, Proc. 6th European Combustion Meeting, June 25 - June 28, 2013, Lund, Sweden.

Large Eddy Simulations of Lean Partially Pre-vaporized Turbulent Spray Flames

F. L. Sacomano Filho, M. Chrigui, A. Sadiki, J. Janicka

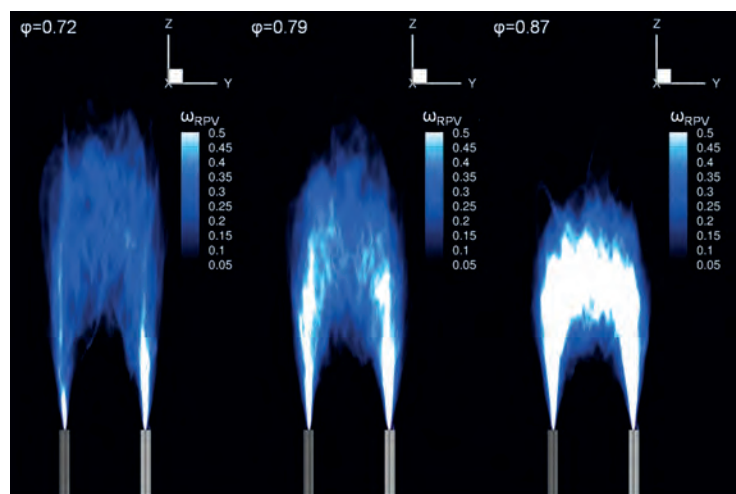
Fachgebiet Energie und Kraftwerkstechnik, TU Darmstadt

Lean Partially Pre-vaporized (LPP) turbulent spray flames stand out as a promising technology to reduce the emission of NO_x and the maximum temperature for combustion engines.¹ Because of the partial pre-vaporization and the resulting lean partially premixed mixture the LPP flame fronts are able to propagate into the combustion chamber. The correct computation of the turbulent flame propagation is a challenging task for practical purpose applications. For these cases, Direct Numerical Simulation (DNS) are not feasible and the usage of a modelling procedure to capture the effects of the turbulence-flame interactions based, for instance, on Large Eddy Simulation (LES) is necessary. Typically, when a liquid spray is injected directly into a combustion chamber the high evaporation rate of droplets delivers a high concentration of fuel vapor close to the nozzle. This mixture quality leads to a predominance of reactive processes similar to those found in gaseous non-premixed flames. Based on this characteristic, combustion models originally developed to non-premixed flames have been modified to compute turbulent spray flames. On the other hand, in LPP burners the spray is not integrally introduced in the combustion chamber, in reality a mixture of fuel vapor and liquid structures is injected instead. As a consequence, regarding the quality of the resulting mixture, the flame structure is expected to be controlled by the flame propagation speed rather than by the diffusion of reactants and products. Accordingly, to better capture this aspect, analysis on the extension of a single phase premixed flame model are performed in the present investigations. To investigate the structure of propagating partially pre-vaporized spray flames, in this work an Eulerian-Lagrangian spray module relying on the Artificially Thickened Flame (ATF) framework coupled

to the Flamelet Generated Manifold (FGM) chemistry reduction method is developed. A detailed mechanism of n-heptane including 88 species and 387 elementary reactions is adopted to correctly address the chemical reactions. The unsteadiness arising from turbulent dispersion of evaporating droplets are captured by the LES method. An evaporation model based on the non equilibrium approach is applied to describe droplet evaporation process. Three of the LPP n-heptane spray flames, investigated experimentally in,¹ are selected to validate the proposed module. The success of the achieved results could demonstrate the effectiveness of the modeling approach. To illustrate it, the structure of the three chosen turbulent flames are exhibited by the figure through short time averaging of the source term of the reaction progress variable (ω_{RPV}). The decrease of the flame length according to the increase of the equivalence ratio (ϕ), also observed experimentally, is correctly reproduced. This phenomenon is a particularity of lean propagating flames, which is related to the reduction of the flame speed due to the increase of the equivalence ratio.

Funding source
DFG and CNPq
(Brazil)

Figure: Illustration of structure for three flame compositions ($\phi=0,72$, $\phi 0,79$ and $\phi 0,87$) based on short time averaging of the source term of the reaction progress variable ω_{RPV} [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}\cdot\text{g}^{-1}$].



Reference

1. C. Pichard, Y. Michou, C. Chauveau, and L. Gökalp (2002), Average droplet vaporization rates in partially prevaporized turbulent spray flames, Proc. Combust. Inst. 29(1): 527–533.

Lärmreduktion durch Optimierung aeroakustischer Vorgänge

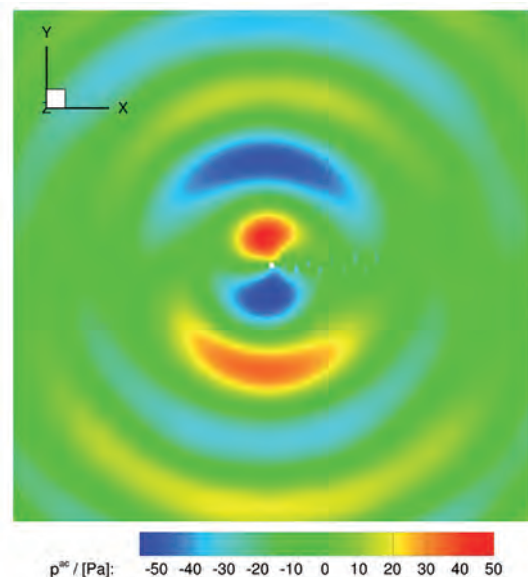
S. Nowak, D. Sternel, M. Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, TU Darmstadt

Der Anstieg von Lärm aufgrund von Straßen- und Luftverkehr und durch erhöhten Einsatz von Maschinen führt heutzutage vermehrt zu Gesundheitsschädigungen und einer Abnahme der Lebensqualität. Ein Großteil des Lärms, vor allem in urbaner Umgebung, wird durch turbulente Strömungen verursacht. Der physikalische Hintergrund der Lärmstehung durch turbulente Strömungen ist für viele Einsatzgebiete noch nicht ausreichend erforscht. Unter diesem Gesichtspunkt stellen aeroakustische Simulationen ein wichtiges Werkzeug zum besseren Verständnis des Mechanismus aerodynamischer Lärmentwicklung dar und die Optimierung der aeroakustischen Größen einen wichtigen Grundstein zur Lärmreduktion von Strömungslärm. In der Abbildung ist beispielhaft die Ausbreitung des Schalldrucks bei einer laminaren Zylinderumströmung dargestellt. Zeitaufgelöste Methoden wie die Direkte Numerische Simulation (DNS) und die Grobstruktursimulation (Large Eddy Simulation, LES) bieten nicht nur die Fähigkeit Schwankungsgrößen vorherzusagen, die als Quellterme für die aeroakustische Simulationen benutzt werden können, sondern sind auch wegen ihrer höheren Genauigkeit im Vergleich zu statistischen Methoden sehr vielversprechend. DNS und LES benötigen für Konfigurationen von praktischem Interesse eine große Rechenleistung, die z. B. der Lichtenberg-Hochleistungsrechner zur Verfügung stellt. Bei kleinen Machzahlen treten Mehrskalprobleme auf, da zum einen die Ausbreitungsgeschwindigkeit, aber auch die strömungsmechanischen Schwankungen und die als Schall abgestrahlten Schwankungen um Größenordnungen auseinander liegen.

Der numerische Aufwand aeroakustischer Simulationen wächst mit zunehmendem Abstand von Schallquelle und Beobachter. Somit sind bei praxisrelevanten Anwendungen und deren Optimierung die Grenzen der Desktop Computer schnell erreicht. In diesem Projekt wird ein Optimierungsverfahren entwickelt, durch welches akustische Größen, wie zum Beispiel der Schalldruck, minimiert werden können. Die Schallausbreitung wird mit dem Finite-Volumen-Löser FASTEST¹ und einem High-Resolution-Verfahren³ berechnet. Das High-Resolution-Verfahren löst hierbei die linearisierten Eulergleichungen (LEE) auf randangepassten, blockstrukturierten Hexaedergittern. Aeroakustische Quellen erhält man durch die zeitabhängig berechnete Strömung, basierend auf der Idee von Hardin und Pope's Viscous Splitting Technique.² Die für die gradientenbasierte Optimierung benötigten Sensitivitäten werden mittels der Continuous Sensitivity Equation Method (CSEM)⁴ berechnet.

Durch die gesteigerte Anzahl an Strömungsauswertungen im Optimierungsprozess steigt der Berechnungsaufwand der Simulationen stark an.



Literatur

1. FASTEST Manual (2005), Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt, Deutschland.
2. J.C. Hardin und D.S. Pope (1994), An Acoustic/Viscous Splitting Technique for Computational Aeroacoustics, Theoret. Comp. Fluid Dynamics, 6: 323-340.
3. M. Kornhaas (2011), Dissertation: Effiziente numerische Methoden für die Simulation aeroakustischer Probleme mit kleinen Machzahlen, Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren, Technische Universität Darmstadt, Darmstadt.
4. D. Gunzburger (1998), Sensitivities in Computational Methods for Optimal Flow Control. In Computational Methods for Optimal Design and Control, volume 24 of Progress in Systems and Control Theory, Birkhäuser Boston: 197-236.

LES of a Spark Ignition Engine Using Artificial Thickening and Flamelet Generated Manifolds

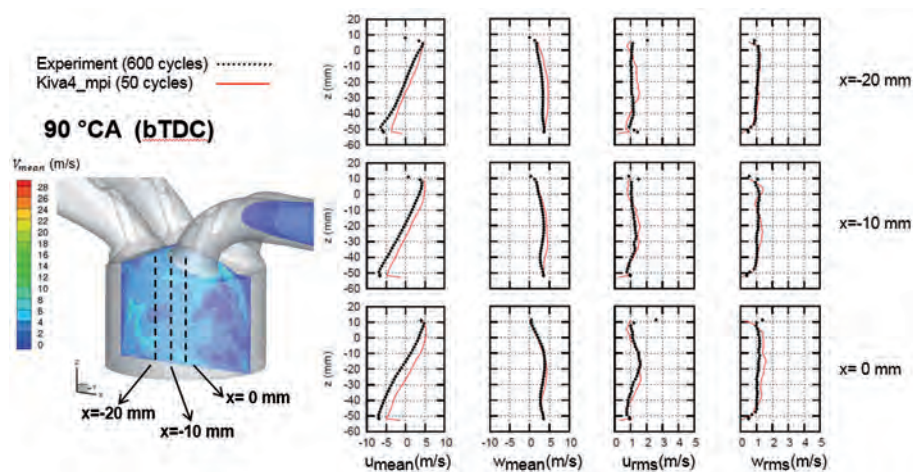
C. He, G. Künne, J. Janicka

Fachgebiet Energie und Kraftwerkstechnik, TU Darmstadt

The complexity of in-cylinder flow combined with chemical reactions involving a vast number of species render the modelling of spark ignition engines a challenging task. In this work the optical spark ignition engine built and measured at TU Darmstadt has been simulated. The experimental study of the engine have been presented in.^{1,2} The engine operates with homogeneous mixtures from port fuelled injection of iso-octane. Simulations have been performed using the code KIVA-4mpi extended with the Large Eddy Simulation (LES) turbulence model to capture the complex flow field behaviour and cycle-to-cycle variations. Firstly, the cold flow simulations for this optical engine have been carried out. Since a new engine configuration was considered, it was necessary to verify that the numerical grid correctly and accurately represented the engine's geometry and that the experimental pressure curve could also be reproduced in the simulations. The numerical setup was assessed by comparing the predictions with a comprehensive set of velocity measurements for different spatial and crank-angle positions. The cycle parallelization technique was employed in this work. Each simulation was performed using 12 CPUs at the Lichtenberg-cluster. Thanks to its high performance, 64 engine cycles were simulated within three weeks. Statistics

were evaluated over 50 engine cycles. A very good agreement with experimental data^{1,2} was obtained (Figure 1). Finally the reacting operation using tabulated chemistry has been considered. The chemistry of iso-octane has been represented using the Flamelet Generated Manifold (FGM) technique which spans over the relevant temperature and pressure range of the engine. LES of combustion modelling has been performed adopting the thickened flame approach where the thickening factor automatically adapts to the local conditions of pressure and grid size to ensure a proper resolution of the chemical source term. In addition to the adaptive thickening, a flame sensor has been used to detect the flame.^{3,4} To capture the spark ignition, the mesh has been refined around the region of interest and the ignition model available in KIVA-4mpi has been improved consistently with the FGM approach. Also for the reacting case 50 cycles will be simulated and the predictions will be compared with the measurements. Figure 1 In-cylinder velocity field comparison at 90° crank angle bTDC (compression phase)

Funding source
GSCE
TU Darmstadt



References

1. E. Baum, B. Peterson, C. Surmann, D. Michaelis, B. Böhm, and A. Dreizler (2012), Investigation of the 3D flow field in an IC engine using tomographic PIV, Proc. Combust. Inst.
2. E. Baum, B. Peterson, C. Surmann, D. Michaelis, B. Böhm, and A. Dreizler (2012), Tomographic PIV measurements in an IC engine, 16th Int. Symp. on Applications of Laser Techniques to Fluid Mechanics.
3. G. Künne, A. Ketelheun, and J. Janicka (2011), LES modeling of premixed combustion using a thickened flame approach coupled with FGM tabulated chemistry, Combustion and Flame.
4. G. Künne (2012), Large Eddy Simulation of Premixed Combustion Using Artificial Flame Thickening Coupled with Tabulated Chemistry, Optimus Verlag.

Modeling of Turbulence Interface Interactions in Two-Fluid Systems

T. Waclawczyk, M. Waclawczyk

Fachgebiet Strömungsdynamik und Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, TU Darmstadt

Funding source
DFG Projekte
WA 3097/3-1,
WA 3097/2-1

During this project, the statistical model put forward in (Waclawczyk, Oberlack)¹ is investigated. The new approach allows to relate the model for evolution of the intermittency region (IR), which is the domain where the interface can be found with non-zero probability, with properties of the bulk turbulent fluid. Present studies have led to formulation and verification of the Favre averaged IR evolution model (IREM) and the new discretization for the conservative level-set (CLS) method, providing a framework for IREM implementation.^{2,3} At first, the a priori study of DNS data obtained from simulations on Lichtenberg cluster with the Fastest code

and the VOF method⁴ was carried out, during these simulations up to 64 processes were used. As the result, velocity and pressure fields of the 2D vortex interacting with the flat air/water interface in the turbulent flow regime were obtained (Fig. 1) and were used in the statistical analysis of the velocity interface correlations.^{2,5} The next step in development of IREM is coupling with the flow solver and the CLS method,³ the preliminary works were performed in (Kraheberger; Waclawczyk et al.),^{5,6} For future tests of the IREM model an access to the computational resources of HHLR is required. The present project was supported by the DFG grants WA 3097/3-1 AOBJ: 595641, WA 3098/2 AOBJ: 595642.

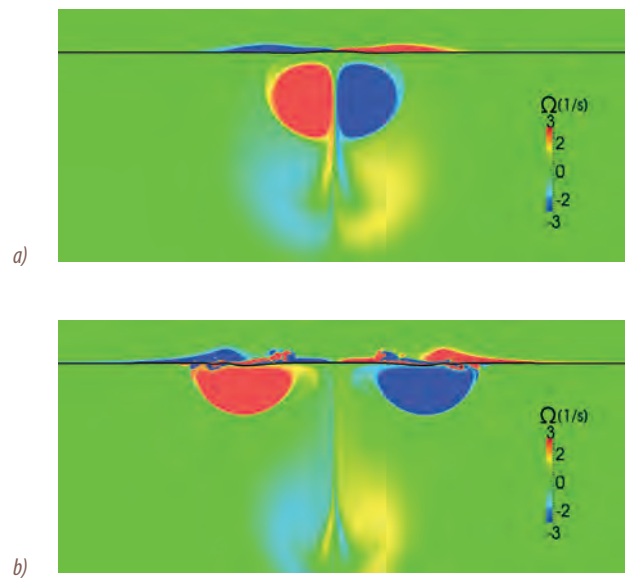
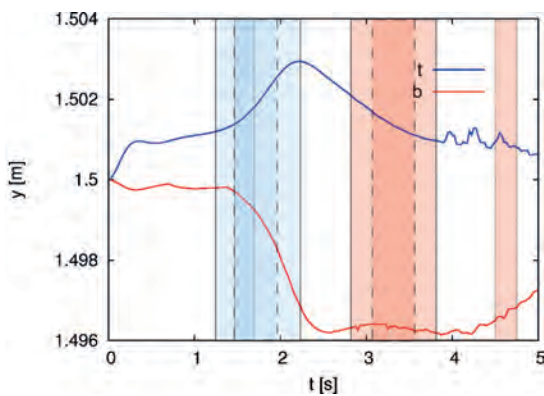


Fig. 1:
Collision of the 2D vortex with initially flat air/water interface
a) evolution of the borders of the intermittency region,
b) vorticity magnitude at two time moments.

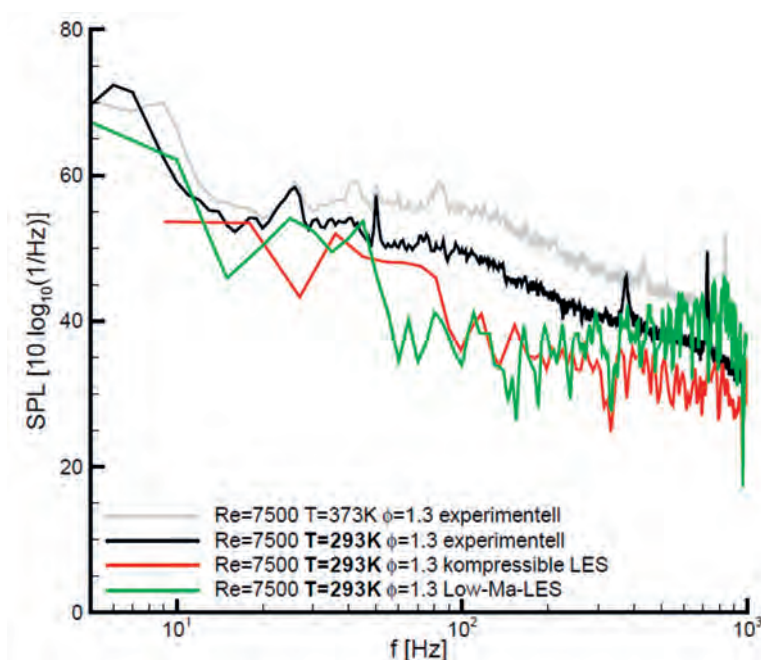
References

1. M. Waclawczyk, M. Oberlack (2011), Closure proposals for the tracking of turbulence-agitated gas-liquid interfaces in stratified flows, *Int. J. Multiphase Flow* 37:967-976.
2. M. Waclawczyk, T. Waclawczyk (2014), A priori study for the modeling of the velocity interface correlations in the stratified air-water flows, *Int. J. Heat and Fluid Flow* 52: 40-49.
3. T. Waclawczyk (2015), A consistent solution of the re-initialization equation in the conservative level-set method, *J. Comp. Phys.*, re-submitted to Editorial Office after first revision.
4. T. Waclawczyk (2008), Numerical modeling of the free surface flows in ship hydrodynamics, PhD Thesis, Institute of Fluid Flow Machinery, Gdansk, Poland.
5. S.V. Kraheberger (2014), Numerical Study of the intermittency region in two-fluid turbulent flow, Master Thesis, Department of Mechanical Engineering, TU Darmstadt.
6. T. Waclawczyk, M. Waclawczyk, S.V. Kraheberger (2014), Modelling of turbulence-interface interactions in stratified two-phase flows, *Journal of Physics: Conference Series* 530.

Modellierung von Lärmquellen vorgemischter Verbrennungssysteme mit Hilfe der inkompressiblen Grobstruktursimulation

A. Hosseinzadeh, G. Geiser, H. Nawroth, J. Janicka, C. O. Paschereit, W. Schröder
Fachgebiet Energie und Kraftwerkstechnik, TU Darmstadt

Bei der Entwicklung und Verbesserung technischer Verbrennungskonzepte spielen zunehmend die Geräuschemissionen eine entscheidende Rolle. Der Bedarf an leisen Verbrennungssystemen rückt immer mehr in den Vordergrund. Die wesentlichen primären Lärmquellen in isothermen turbulenten Strömungen werden durch die strömungsinduzierten, stochastischen Schwankungen der Scherspannungen verursacht. Die Wechselwirkungen zwischen den stochastischen Elementen der Strömung spielen insbesondere bei modernen Verbrennungskonzepten für stationäre und Fluggasturbinen eine Rolle, die man zur Reduktion der Emissionen von Stickstoffoxiden unter möglichst vorgemischten Bedingungen und möglichst mager betreibt. Damit stellt das Problem des Verbrennungslärms ein allgemeines Problem für die Anwendung von zukünftigen Verbrennungskonzepten dar. Das generische Experiment besteht aus einer turbulenten Freistrahlfamme, die experimentell untersucht wurde. Diese Daten wurden für die Grobstruktursimulation zur Verfügung gestellt. Die Grobstruktursimulationen bei niedrigen Machzahlen (Low-Ma-LES) liefert Ergebnisse für das reagierende Strömungsfeld, jedoch kann das Schallfeld hiermit nicht direkt berechnet werden. Nach der Extraktion der akustischen Quellterme wurden mit Hilfe eines Computational Aeroacoustics (CAA)-Verfahrens die Ausbreitung des Schallfeldes und damit auch die Gesamtschallemission berechnet. Es konnte erstmalig der Nachweis der grundsätzlichen Anwendbarkeit der hybriden Methode, bestehend aus Low-Ma-LES und CAA für turbulente Vormischflammen erbracht werden. Insgesamt lassen sich in dem Bereich der untersuchten unterschiedlichen Parameter hinsichtlich der turbulenten, reagierenden Strömung gut übereinstimmende Ergebnisse erzielen. Die Abbildung zeigt das Leistungsdichtespektrum des Schalldruckpegels, verglichen sind die experimentell und numerisch ermittelten Schmalbandspektren.



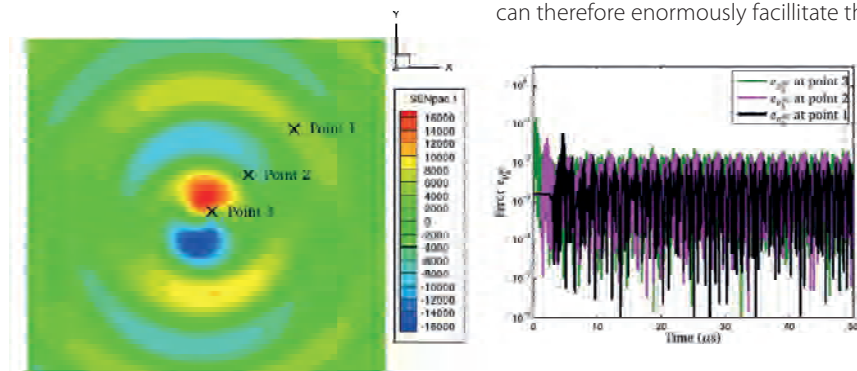
Funding source
Graduiertenkolleg 1344

The increase of the aerodynamic noise produced in turbulent flow is recognized as a factor that impairs the humans' health. Therefore, the simulation and the optimization of the acoustics in the turbulent context has become increasingly significant in the engineering field. The acoustic simulation is performed in two steps. First, the acoustic source is obtained by solving the turbulent flow field. Second, starting from the acoustic sources, the acoustic quantities are calculated by solving the Linearized Euler Equation (LEE).²

The Direct Numerical Simulation (DNS) and the Large Eddy Simulation (LES) can be used to simulate the turbulent flow. The drawback of both methods is that they are expensive in terms of the computational cost. Particularly the DNS is only applicable to very simple geometry. The Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) method, which reduces the computational cost largely, is unfortunately not adequate for the simulation in this case, because exactly the perturbations, which are averaged in RANS, is relevant for the acoustic source. The hybrid methods, which combine the LES and the RANS methods, are considered to be a promising compromise in terms of the computational cost and the accuracy. Therefore, the hybrid methods are applied in the simulation of flow of the acoustic problems.

In the present work, the investigation focuses on two points. First, it is to investigate, whether the hybrid model, the Detached Eddy Simulation (DES), can provide an acoustic source with sufficient accuracy. For this purpose, the acoustic sources and the acoustic quantities

are to be compared with the results calculated using DNS or LES. The DES has been implemented and verified. The acoustic quantities obtained by means of DES needs to be verified with the help of appropriate test cases. Second, the optimization of the acoustics is also to be conducted using the sensitivity method. The sensitivity method is a gradient-based method, which is a relatively efficient strategy of optimization in comparison with the gradient-free method.³ The major difficulty is the calculation of the sensitivities of the acoustic quantities with respect to the design variables, which are the parameters that can be changed to achieve the optimization. The key point here is to verify, whether the sensitivities have sufficient accuracies. The acoustic sensitivity solver for the laminar flow has been already implemented and verified with the help of a cylinder flow (Fig. 1), which used 8 cores for the computation of the flow and 8 cores for the sensitivities, while the computation between the flow and sensitivity solvers are realized through MPI.¹ The sensitivities are compared with the finite differences, which can represent the gradient with sufficient accuracy. Fig. 1 shows that the errors of the sensitivities of acoustic pressure solved using the implemented solver have relative errors of approximately 0.01, which is quite acceptable. The performance of the sensitivities in the turbulent flow needs to be further investigated. It can be inferred that the computation demand for the acoustics and acoustic sensitivities in the turbulent flow will be larger than the ones in the laminar flow. The high-performance computer can drastically reduce the computation time by distributing the computation onto more cores, and it can therefore enormously facilitate the research.



References

1. X. Huang (2014), Master thesis: Implementation of the Sensitivity Equations of the Linearized Euler Equations, Institute of Numerical Methods in Mechanical Engineering, TU Darmstadt.
2. M. Kornhaas (2012), PhD thesis: Effiziente numerische Methoden für die Simulation aeroakustischer Probleme mit kleinen Machzahlen, TU Darmstadt.
3. J. Michaelis (2013), PhD thesis: Parallele Mehrgitter-Strategien zur Sensitivitätsanalyse und Strömungsoptimierung, TU Darmstadt.

In most of the technical combustion systems the chemical reaction approaches the enclosing walls termed as flame-wall-interaction (FWI). A typical example is the final stage of the chemical reaction within an internal combustion engine as illustrated in Fig. 1, but also within aero engines or gas turbines used in power plants FWI is part of the process. In order to control the thermal load, the temperature of the walls is kept significantly below the flame temperature, usually by active cooling. Accordingly, a heat flux from the flame towards the wall is initiated which removes the activation energy required to sustain the chemical reaction. The result is an incomplete consumption of the fuel coming along with pollutants and power losses. In order to increase the efficiency and to reduce the pollutant formation FWI becomes an even more severe and restricting factor within future developments. Typical examples are the downsizing of internal combustion engines and the use of lean premixed combustion within aero engines. The overall process is determined by the interaction of fluid mechanics, heat transfer and chemical reaction embedded in a turbulent environment yielding huge demands onto its computation.

This project aims at computing this interaction for both, developing the numerical method to accurately describe the process as well as to gain inside into the underlying physics. The first steps currently conducted consist of a detailed investigation of suited approaches within one- and two-dimensional simplified geometries. At this, two approaches are applied to profit from the knowledge gained mutually. Within the first one, the process is highly accurately described by the direct computation of the reaction kinetics¹ while the second one uses efficient reduction techniques to lower the computational costs.² This reduction should finally enable the computation of realistic geometries within the next stages of the project. We implemented both approaches into the academic code Fastest which enables a very detailed comparison. Within other projects, we extend the codes capability to compute full scale

reacting systems. A hybrid MPI-openMP parallelization is employed to obtain parallelization efficiency for reaction kinetics. Figure 2 shows one of the first results obtained so far. The three snapshots illustrated here represent a two-dimensional simulation mimicking the spherical expanding flame of an engine approaching a piston wall (as in Fig. 1). In the top the flame is still propagating undisturbed as visualized by the reaction layer which precedes the hot gases being intact. The two following instances show the weakening of this reaction zone closer to the wall and finally total quenching still leaving a thin layer of unreacted gases above the piston.

The first steps of this research have been conducted within a numerical framework that established for reacting systems in the past³. A detailed assessment is ongoing to identify the necessary numerical and modeling developments required for the FWI-simulation. As an intermediate step towards real applications, the simulation of well characterized experiments featuring three dimensional laminar and turbulent FWI is planned.

Funding source
DFG



Fig. 1:
Illustration of the flame propagation within an internal combustion engine leading to FWI.

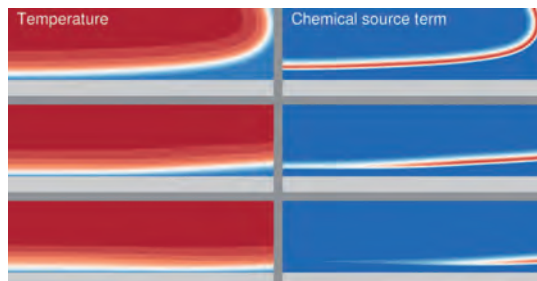


Fig. 2:
3 timesteps of a 2D simulation showing the impact of a flame onto the piston.

References

1. T. Meier, G. Kuenne, A. Ketelheun, and J. Janicka (2013), Numerische Abbildung von Verbrennungsprozessen mit Hilfe detaillierter und tabellierter Chemie. VDI Berichte, 2161: 643-652, Deutscher Flammentag 26.
2. A. Ketelheun, G. Kuenne, and J. Janicka (2013): Heat Transfer Modeling in the Context of Large Eddy Simulation of Premixed Combustion with Tabulated Chemistry. Flow Turbulence and Combustion, Vol 91(4): 867-893.
3. G. Kuenne, A. Ketelheun, and J. Janicka (2011): LES modeling of premixed combustion using a thickened flame approach coupled with FGM tabulated chemistry. Combustion and Flame, Vol. 158(9): 1750-1767.

Numerische Modellierung eines PKW-LKW Überholvorgangs

L. Kutej, S. Jakirlic

Fachgebiet Strömungslehre und Aerodynamik, TU Darmstadt

Projektförderung
Stipendium

Mit dem Dissertationsthema „Strömungssimulation des Überholvorgangs zwischen einem PKW und einem LKW“ wird ein Überholvorgang erforscht, der aus strömungsmechanischer Sicht sehr kompliziert ist. Bevor die Strömungssimulation des Überholvorgangs durchgeführt werden kann, muss zuerst für ein numerisch relevantes Modell die Problematik der Fahrzeugumströmung verstanden sein. Zu Beginn wird ein vereinfachtes Modell des BMW 5er in Maßstab 1:2,5 untersucht. Daraus ergeben sich Gittergenerierungsstrategien. Durch eine Vereinfachung ist die Anzahl von Gitterzellen geringer, damit lassen sich solche Simulationen relativ schnell durchführen und bieten eine gute Übersicht. Die Ergebnisse sind jedoch nicht für eine direkte Validierung des Experimentes geeignet; sie dienen der Gitterstudie. Denn bei jeder Gittergenerierung muss man sich fragen, wie exakt das verwendete Turbulenzmodell ist. Anschließend wird ein Gitter ausgewählt, das zwar möglichst grob ist, das aber die Ergebnisse durch die Gitterauflösung nicht behindert. Mit dieser Gittereinstellung wird dann ein detaillierteres Modell des BMW 5er Maßstab 1:2,5 vernetzt und anschließend simuliert.

Ergebnisse dieser Simulationen werden mit Experimenten validiert. An die Ergebnisse von Schrefl¹ anschließend wurden aerodynamische Untersuchungen im Windkanal, z.B. mit einem alleinstehenden PKW-Modell BMW 1:2,5 oder auch dem Überholvorgang PKW-LKW durchgeführt. Dabei wurden zwei Verfahren angewendet: Strömung mit Grenzschichtabsaugung und ohne Grenzschichtabsaugung. Außerdem wurde eine Straßenmessung des Überholvorgangs untersucht. Alle Fälle von Schrefl¹ wurden glaubwürdig numerisch simuliert. Die Grenzschichtabsaugung wird durch passende Randbedingungen dargestellt, der dynamische Überholvorgang auf der Straße wird durch ein deformierendes bewegtes Gitter reproduziert. Aus

rein numerischer Sicht werden zwei Betrachtungen berücksichtigt: Die vereinfachte Simulation mit Einlass, Auslass und Symmetrieebenen, bei aerodynamischen Fahrzeugsimulationen üblich, und die Simulation des exakten Windkanals mit realistischer Abmessungen.

Die anschließende Überholvorgangssimulation besteht aus zwei Teilen: Erstens aus einer Simulation von acht zwischen PKW und LKW statischen Positionen, entsprechend der Windkanalmessung des Überholvorgangs, und zweitens aus dem dynamischen Überholvorgang. Die Bewegung des PKWs wird durch ein deformierendes bewegtes Gitter dargestellt. Die Auswahl des passenden Turbulenzmodells und des Simulationsmodus stellt dabei ein wichtiger Teil der Arbeit dar. Einige Turbulenzmodelle sind nicht in der Lage diese komplizierte Fahrzeugumströmung angemessen darzustellen. Aus diesem Grund wird ein robustes, aber trotzdem genaues k-zeta-f Turbulenzmodell angewendet. Zur Verbesserung der Ergebnisse wird dann an einem allein stehenden detaillierten PKW-Modell und von dem Überholvorgang das hybrid Turbulenzmodell PANS (Partially Averaged Navier Stokes) angewendet. Die Simulationen der Gitterstudie werden hier nur stationär berechnet. Hierfür ist auch das k-zeta-f Turbulenzmodell geeigneter als PANS. Anschließend werden diese auch instationär gerechnet, wo dann PANS Turbulenzmodell zum Einsatz kommt. Zur Auswertung werden vor allem die Luftwiderstandsbeiwerte, die wirkende Momente und die Druckverteilung betrachtet. Die simulationsrelevanten Merkmale sind Residuen, y^+ , CFL-Zahl, Δ/η Kriterium. Alle Strömungssimulationen werden mittels CFD Programm AVL FIRE der Firma AVL List GmbH durchgeführt. Die Auswertung der Ergebnisse wird mit der Software Tecplot 360 gemacht. Alle Grafen werden wegen Einheitlichkeit in Software Gnuplot generiert.

Literatur

1. M. Schrefl (2008), Instationäre Aerodynamik von Kraftfahrzeugen: Aerodynamik bei Überholvorgang und böigem Seitenwind. Aachen: Shaker.

Numerische Modellierung von Mehrphasenströmung im Hinblick auf oberflächenspannungsdominierte Strömungen

D. Staab, M. Schäfer

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, TU Darmstadt

Bei nahezu allen natürlichen und technisch relevanten Strömungen handelt es sich um eine Kombination aus mehreren Flüssigkeiten, Gasen oder Feststoffen. Diese Systeme bezeichnet man als Mehrphasenströmungen. Bereits eine Zweiphasenströmung zeigt ein komplexeres Verhalten als eine einphasig strömendes Fluid. Dieser Fakt begründet sich nicht nur mit der bidirektionalen Kopplung der dispersen und der Hauptphase, sondern auch in der zusätzlichen Betrachtung der Grenzflächenspannung. Als Beispiel für die Kopplung beider Phasen sei eine aufsteigende Luftblase in Wasser genannt, deren Dichte und Viskosität sich von der Hauptphase unterscheiden und sie somit auf Grund von Gravitation nach oben steigt. Sobald mehr als ein Fluid als ungelöste, aber vermischte Phase vorliegt, entstehen Grenzflächen. Durch diese Grenzflächen treten zusätzliche Kräfte auf, welche energieminierend auf das Interface wirken und damit die Grenzflächenverformung beeinflussen.

Zum besseren Grundlagenverständnis, aber auch zur Optimierung industrieller Prozesse, kommen numerische Simulationen zum Einsatz. Die Anforderungen an diese Simulationen sind zwiespältig. Auf der einen Seite sollen höchst genaue Ergebnisse berechnet und auf der anderen Seite müssen diese Resultate möglichst schnell erhalten werden. Aus diesem Grund sollen numerische Methoden zur Simulation von Strömungen möglichst effizient sein.

In dieser Arbeit kommt eine, in Industrie und Forschung weit verbreitete, Methode zum Einsatz, welche auch komplexe Mehrphasenvorgänge berechnen kann, die Volume-of-Fluid Methode.

Der Nachteil dieser Methode ist, dass sie die Krümmung einer Grenzfläche nicht akkurat abbilden kann. Einer ihrer Vorteile ist die Massenkonservativität. Um den genannten Nachteil zu überwinden, kann eine weitere Methode, welche eine genauere Berechnung der Krümmung und somit der Oberflächenspannung zulässt, angekoppelt werden.¹ Diese Methode wird Level-Set Methode genannt.²

Vor allem bei kleinen Blasendurchmessern ist die Berechnung der Oberflächenspannung fehleranfällig, denn der Betrag der Oberflächenspannung ist proportional zur Krümmung einer Grenzfläche und steigt daher bei, zum Beispiel, kleinen Blasen stark an.

Das Ziel dieser Arbeit ist es einen Tropfenauflauf auf eine Fluidoberfläche unter wirkender Oberflächenspannung effizient zu berechnen. Dabei sollen auch die Sprünge in den Größenskalen adäquat abgebildet werden. Diese Sprünge kommen dadurch zustande, dass z.B. entstehende Wellen kleine Krümmungen besitzen, aber erzeugte Mikroblasen wesentlich größere Krümmung haben.

In diesem Projekt werden effiziente Oberflächenspannungsmodelle, wie z.B. dem CSF Modell von Brackbill et al.³ mit der Volume-of-Fluid und Level-Set Methode gekoppelt, und Parameterstudien zum Tropfenauflaufprozess durchgeführt, womit ein grundlegendes Verständnis dieses Vorgangs erlangt werden soll. Diese rechenintensive Simulationen machen einen Hochleistungscomputer wie den Lichtenberg-Hochleistungsrechner unabdingbar.

Literatur

1. D. Staab (2010), Master thesis: Improvement of the volume of fluid method by coupling with a re-distancing algorithm for the distance function. Chair of Energy and Power Plant Technology. Technische Universität Darmstadt. Darmstadt.
2. D. Adalsteinsson and J. A. Sethian (1995), A fast level set method for propagating interfaces. *Journal of Computational Physics*, (118):269–277.
3. J. Brackbill, D. Kothe, and C. Zemach (1992), A continuum method for modeling surface tension. *Journal of Computational Physics* 100: 335–354.

Numerische Simulation der Verbrennung fester Brennstoffe in einer Oxyfuel-Atmosphäre

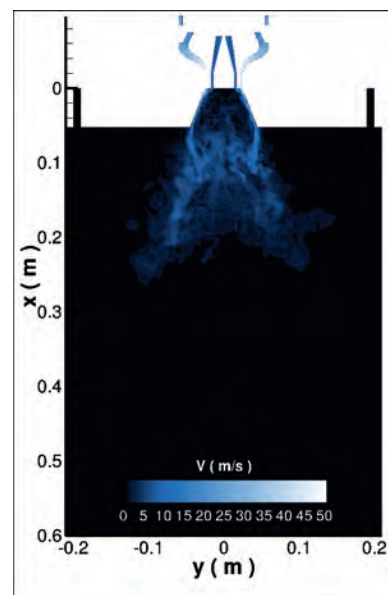
R. Knappstein, A. Ketelheun, J. Janicka

Fachgebiet Energie und Kraftwerkstechnik, TU Darmstadt

Projektförderung
DFG

Die Simulation von Verbrennungsprozessen fester Brennstoffe geht aufgrund der komplexen Chemie und der Skalenseparation mit erheblichen numerischen Kosten einher. Ein Verständnis der Vorgänge, welches im Rahmen von CFD-Rechnungen gewonnen werden kann, hilft beispielsweise bei der Auslegung zukünftiger Kraftwerke. Nicht erst seit der Energiewende wird dem Ziel, das klimaschädliche Treibhausgas CO_2 zu reduzieren, hohe Priorität eingeräumt. Um die Energie- und Stromversorgung jedoch auch nachhaltig sichern zu können, muss ein Teil des Energiebedarfs auch weiterhin aus fossilen Energieträgern wie Kohle und Erdgas stammen. Die sogenannte Oxyfuel-Technologie stellt für die Realisierung dieser Ziele eine vielversprechende Methode dar. Im Unterschied zu konventionellen fossilen Kraftwerken wird der Brennstoff hier nicht mit Luft, sondern mit einem Gemisch aus Sauerstoff und recirkuliertem Rauchgas verbrannt. Im Abgas finden sich dann lediglich die beiden Hauptbestandteile Wasser(dampf) und Kohlenstoffdioxid. Letzteres kann dann mit deutlich weniger Aufwand abgeschieden werden und gelangt nicht in die Atmosphäre. Bei dem von der DFG finanzierten Sonderforschungsbereich/Transregio 129 „Oxyflame“, der in Kooperation mit der RWTH Aachen und der Ruhr-Universität Bochum eingerichtet ist, geht es also darum, ein grundlegendes Verständnis für die Oxyfuel-Verbrennung von festen, staubförmigen Brennstoffen zu entwickeln. Insbesondere sind Prozesse, die bei der Verbrennung mit Sauerstoff ablaufen, noch nicht so weit verstanden, dass ein effizienter Einsatz dieser Technologie im industriellen Maßstab möglich ist. Für die Berechnung der reaktiven Strömung wird der akademische, inkompressible CFD-Code FASTEST verwendet. Dabei wird die Methode der Grobstruktursimulation (Large Eddy Simulation) für eine adäquate Beschreibung des transienten Verhaltens angewendet, die aufgrund der numerischen Kosten erst seit Kurzem im Zusammenhang mit Kohleverbrennung eingesetzt werden kann.¹ Im Vordergrund steht die Kopplung von Modellen, die die zahlreichen Teilprozesse bei der chemischen Umsetzung der Kohle erfassen, mit dem FGM (Flamelet Generated Manifolds) Modell. Letzteres geht

auf van Oijen² zurück. Die Grundidee dabei ist, die chemischen Prozesse im Vorfeld detailliert zu berechnen und zu tabellieren, um schließlich bei der eigentlichen Simulation mit einem stark reduzierten Satz von Kontrollvariablen auf die Tabelle zugreifen zu können. Mit dieser Methodik können komplexe Nicht-Gleichgewichtseffekte zu akzeptablen numerischen Kosten beschrieben werden. Ihre Anwendung auf heterogene Brennstoffe stellt die besondere Herausforderung dar. Die Modellentwicklung dient dazu, den kompletten Kohleumsetzungsprozess in einem realen Feuerraum simulieren zu können. Aufgrund der langen Verweilzeiten der Partikel sind die Brennräume deutlich größer dimensioniert als diejenigen von Gasflammen, was zu einer erheblichen Skalenseparation führt. Beispielsweise liegen Kohlepartikel und Brennraummaße um bis zu sieben Größenordnungen auseinander. Um dies handhabbar zu machen, sind Verfahren wie Scale Adaptive Simulation (SAS) oder eine lokale Zeitschrittanpassung notwendig. Einen Eindruck des Geschwindigkeitsfeldes in der Nähe des Drallerzeugers liefert die Darstellung. Simulationen dieser Größenordnung (rund 7 Mio. Zellen) erfordern in etwa 100.000 CPU-Stunden bei starker Parallelisierung durch Domain Decomposition. Der Lichtenberg-Hochleistungsrechner leistet hier wertvolle Dienste.



Literatur

1. M.B. Franchetti (2013), Large Eddy Simulation of Air and Oxy-Coal Combustion Dissertation, Imperial College London.
2. J.A. van Oijen (2002), Flamelet-Generated Manifolds: Development and Application to Premixed Laminar Flames Dissertation, TU Eindhoven.

Numerische Simulation von Verbrennungslärm und -instabilitäten — mittels hybrider Berechnungsverfahren

T. Klenke, K. Lackhove, J. Janicka

Fachgebiet Energie und Kraftwerkstechnik, TU Darmstadt

Schadstoffarme, moderne Brennverfahren in stationären- und Fluggasturbinen sind durch einen instabilen Betrieb gekennzeichnet. Diese Instabilitäten sind häufig auf akustische Phänomene zurückzuführen, die durch den instationären Verbrennungsprozess hervorgerufen werden. Aufgrund der erheblichen Skalenerunterschiede zwischen der Akustik und dem Verbrennungsprozess ist eine direkte numerische Berechnung mit erheblichen Kosten verbunden. Die hybride Simulation von Verbrennung und Akustik stellt hier eine sinnvolle Alternative dar, um die Phänomene in komplexen Verbrennungssystemen zu beschreiben. Im Zuge des Klimawandels, der Ressourcenknappheit an fossilen Brennstoffen und dem vermehrten Aufkommen alternativer Brennstoffe sowie gesetzlich stetig verringerten Schadstoffgrenzwerten ist eine verstärkte Entwicklung von modernen, schadstoffarmen Verbrennungskonzepten ein zentraler Punkt der heutigen Verbrennungsforschung. Hierbei stehen schadstoffarme und verbrauchsreduzierende Magerverbrennungskonzepte im Fokus. Magerverbrennungskonzepte sind auf der einen Seite durch eine schadstoffarme und verbrauchsreduzierte Verbrennung gekennzeichnet, tendieren auf der anderen Seite jedoch abhängig vom Betriebspunkt häufig zu Verbrennungsinstabilitäten. Diese Instabilitäten verursachen unerwünschte, erhöhte Schadstoffwerte und können im Extremfall sogar zu Schäden an der Gasturbine führen. Im Kontext des hier verwendeten hybriden numerischen Berechnungsverfahrens liegt der Fokus auf der Untersuchung der thermoakustischen Verbrennungsinstabilitäten. Diese Instabilitäten entstehen, wenn der durch die instationäre, reagierende Strömung erzeugte Verbrennungslärm mit dem Verbrennungssystem interagiert und eine selbsterregte Schwingung induziert. Die an der TU Darmstadt stattfindende Arbeit zu diesem Thema ist durch zwei internationale Projekte eng mit Forschergruppen in ganz Europa verknüpft. Das von BMWi finanzierte AG-TURBO 2020 Projekt beschäftigt sich in unserem Teilprojekt mit der Realisierung einer Rückkopplungsmethode für die akustischen Brennkammerdruckschwankungen auf das reagierende Strömungsfeld. Als Teil des Seventh Framework Programmes der Europäischen Union widmet sich das RECORD-Projekt der Verbesserung und Validierung der Modellierungsmethoden von Verbrennungslärm. Dabei werden sowohl direkter als auch indirekter Lärm sowie dessen Ausbreitung berücksichtigt. Auf Basis

der verbesserten Modellierungsstrategien können im Anschluss Verfahren zur Lärminderung entwickelt und getestet werden. Grundlage des von uns bearbeiteten Teilprojektes ist der Vergleich verschiedener Modellierungsstrategien anhand von experimentellen Daten. Das an der TU Darmstadt entwickelte, hybride Berechnungsverfahren beschreibt hier einen Mittelweg zwischen vertretbarem Rechenaufwand und einer für industrielle Anwendungen ausreichenden Beschreibung der physikalischen Vorgänge. Für die Berechnung der instationären, reaktiven Strömung wird der inkompressible in-house CFD-Code PRECISE-UNS mit einem CAA-Code gekoppelt. Als letzterer kommt entweder das am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) entstandene PIANO oder das maßgeblich am Imperial College London entwickelte Nektar++ Framework zum Einsatz. Wesentlicher Unterschied der beiden Codes ist, dass PIANO auf der Finiten Differenzen Methode (FDM) basiert, während Nektar++ sich das diskontinuierliche Galerkinverfahren zu Nutze macht. Zur Beschreibung des instationären Verbrennungsprozesses in der Brennkammer kombiniert PRECISE-UNS die Methode der Grobstruktursimulation mit dem Verfahren der tabellierten Chemie für die Reaktionskinetik. Dabei wird ein akustischer Quellterm berechnet und an den CAA-Code übergeben, der die akustische Wellenausbreitung in der Brennkammer sowie ihren Zuführungen simuliert. Hiermit kann in einem zukünftigen Schritt mittels einer Rückkopplung der akustischen Signale auf das reaktive Strömungsfeld die Interaktion zwischen dem erzeugten Verbrennungslärm und dem Gesamtverbrennungssystem untersucht werden. Der erhebliche Geschwindigkeitsvorteil dieses hybriden LES/CAA Berechnungsverfahrens gegenüber direkten Berechnungsmethoden mittels einer kompressiblen LES rührt von der Skalenseparation von Strömungs- und Akustikgrößen her.

Projektförderung

BMW, Seventh
Framework
Programme (EU)



Numerische Strömungssimulation des DrivAer-Referenzkörpers bei Schräganströmung

N. Kienzle, P. Post, J. Raquet, H. Schönke, L. Kutej, T. Schütz
 Fachgebiet Strömungslehre und Aerodynamik, TU Darmstadt

An dem Referenzkörper DrivAer werden Experimente und numerische Simulationen durchgeführt. Eine Studie der BMW Gruppe beschäftigt sich mit der Seitenanströmung. Bei der Auswertung und dem Vergleich der numerischen mit den experimentellen Ergebnissen, ist ein deutlicher Unterschied in den Kraftbeiwerten c_W , c_S und c_L bemerkt worden. Die numerischen Ergebnisse werden mit dem Software-Paket „PowerFlow“, welches auf der Lösung der Lattice-Boltzmann-Gleichung für den diskretisierten Raum basiert, erstellt. Um mögliche Fehlerquellen einzugrenzen, soll ein weiterer Strömungssolver verwendet werden. Hierfür wird FIRE von AVL, welches die Navier-Stokes-Gleichung löst, verwendet. Zusätzlich zu diesem unterschiedlichen Solver sollen verschiedene Turbulenzmodelle getestet und gerechnet werden. Dabei wird auf die Turbulenzmodelle RANS, URANS, PANS und VLES zurückgegriffen. Durch einen Vergleich der Strömungsfelder im Post-Processing sollen Vor- und Nachteile herausgearbeitet werden, die eine sinnhafte Begründung für die Diskrepanz zwischen den bisherigen numerischen und experimentellen

Ergebnissen bieten. Zum Vergleich der experimentellen Ergebnisse liegen 2D-Plots der Kraftbeiwerte c_W , c_S und c_L vor. „PowerFlow“ liefert im Falle der Geradeanströmung zum Experiment sinnhafte Ergebnisse.

Die Abbildungen 1 und 2 zeigen die Verläufe der integralen Kraftbeiwerte c_D , c_S und c_L in Abhängigkeit des Anströmwinkels bei Variation der Rechenmethoden. Dabei werden die beiden Fälle eines umströmten DrivAer-Körpers, mit Rädern und ohne Räder mit geschlossenen Radkästen, betrachtet. Es werden die gemittelten Messergebnisse des Experiments und die gemittelten Simulationsergebnisse aus PowerFlow, im Vergleich zu den durchgeführten Simulationen weiterer Rechenmethoden gezeigt, um somit die durchgeführten Rechnungen zu verifizieren und zu validieren. Die mit AVL FIRE durchgeführten Rechnungen sind dabei in drei gerechneten Rechenmodelle RANS, URANS und VLES aufgeteilt. Anschließend werden anhand von Tabellen der gemittelten Kraftbeiwerte die jeweiligen Ergebnisse verglichen. Um eine konvergente Lösung zu garantieren, wurde zunächst mit dem stationären RANS-Verfahren mit dem k-zeta-f-Modell bis zur Konvergenz simuliert. Anschließend wurden die instationären Rechnungen der URANS- und VLES-Verfahren aus dieser Lösung initialisiert, um eine schnellere Konvergenz zu erreichen. Dabei wurden bei den RANS-Verfahren 10.000 Iterationen durchgeführt und bei den beiden anderen Methoden bis zu einer Flow-Through-Time von 7,5 gerechnet. Das garantiert, dass selbst langperiodische instationäre Prozesse für die Analyse aufgelöst werden und die Lösung konvergiert ist.

Wie anhand der 2D-Graphen für die Kraftbeiwerte deutlich zu sehen ist, sind die Ergebnisse bei Geradeanströmung sehr ähnlich zu den Mess-Ergebnissen. Bei höheren Schiebewinkeln divergieren jedoch Simulation und Messung, was nach aktuellem Stand an einer nicht ausreichend genauen Darstellung des Windkanal-Plenums liegt. Dieses Defizit kann aus Datenschutzgründen bezüglich der Windkanalabmessungen nicht behoben werden. Um weitere Fehlerursachen auszuschließen, müssen darauf folgende Netzunabhängigkeitsstudien an 1:1 Modell durchgeführt und der Einfluss der Periodizität beurteilt werden. Deutlich werden jedoch die Unterschiede zwischen den Turbulenzmodellen RANS, URANS und VLES, der Einfluss der Räder sowie die verschiedenen Strömungsphänomene zwischen den Schiebewinkeln von 0° , 5° und 10° .

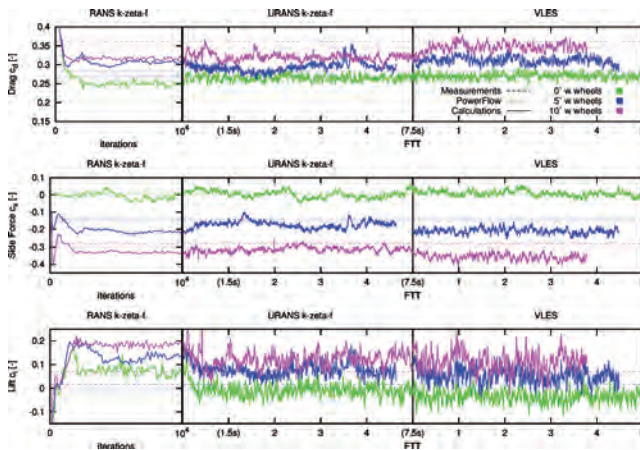


Abb. 1

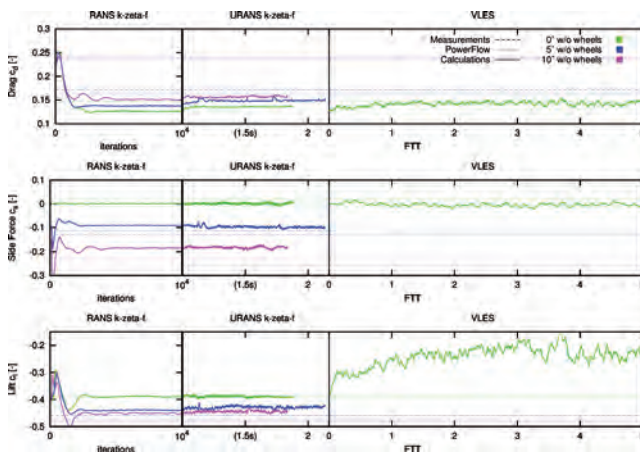


Abb. 2

Numerische Untersuchung zur Spaltprodukt rückhaltung in Wasservorlagen

M. Ullrich, S. Jakirlic

Fachgebiet Strömungslehre und Aerodynamik, TU Darmstadt

Projektförderung
Bundesmittel

Das hier vorliegende Projekt findet im Rahmen einer Bundesinitiative statt und wird von der Gemeinschaft für Reaktorsicherheit (GRS) beaufsichtigt und soll einen Beitrag zur Sicherheitsverbesserung aktueller Kernkraftwerke liefern. In dem hier vorliegenden Projekt geht es um die Berechnung turbulenter Mehrphasenströmungen im Rahmen der Euler-Euler-Methode unter Verwendung geeigneter Modelle aus dem Gebiet der Reynolds-averaged-Navier-Stokes-Gleichungen. Dabei soll ebenfalls der Versuch gemacht werden diese Strömungen über die Verwendung einer hybriden RANS/ LES (Large-Eddy Simulation) zu berechnen. Dazu sind aktuell drei generische Testfälle ausgewählt worden. Die turbulente Blasenströmung innerhalb eines Rohres, die turbulente Blasenströmung über eine plötzliche Querschnittserweiterung in einem Rohr und die Berechnung einer Blasensäule. Da bei der Verwendung skalen auflösender Methoden eine dreidimensionales Gitter sowie zeitabhängige Berechnungsverfahren benötigt werden, steigt der Rechenaufwand stark an im Vergleich zu reinen RANS Berechnungen. Daher sind diese Berechnungen ohne die Verwendung von Rechenclustern nicht zu bewerkstelligen. Die auf dem Cluster momentan hauptsächlich durchgeführten Rechnungen sind Berechnungen der turbulenten Strömung in einem Rohr mittels eines die turbulenten Wirbel auflösenden Reynolds-Spannungsmodell. Diese Berechnungen werden in der Regel mit acht Prozessoren durchgeführt und dauern damit, abhängig von Zeitschrittweite und Zellenzahl, circa zehn Tage. Die Zellenzahl variiert dabei zwischen 360.000 Zellen bis zu circa zwei Millionen Zellen. Durch den Einsatz der Clusters, konnte eine Vielzahl von Strömungskonfigurationen berechnet werden und die entsprechenden Ergebnisse analysiert werden. Eine weitere Kategorie an Berechnungen stellt die Berechnung der Strömung über eine plötzliche Querschnittserweiterung in einem senkrechten Rohr dar. Die Zellenzahl bewegt sich zwischen 3,5 und sechs Millionen Zellen und wird in der Regel auf 64 Prozessoren durchgeführt. Diese Berechnungen sind die bisher aufwendigsten Berechnungen innerhalb des vorliegenden Projekts. Im Rahmen der Euler-Euler-Methode wird der Cluster momentan dazu verwendet, einzelne Modellierungsaspekte innerhalb der RANS Modelle zu analysieren. Diese Berechnungen werden lediglich auf 1-4 Prozessoren durchgeführt, sind jedoch auf Grund der Vielzahl an Berechnungen sehr zeit intensiv. Abschließend lässt sich zusammenfassen, dass ohne die Verwendung des Clusters nur ein winziger Bruchteil der hier durchgeführten Rechnung und Modellaspekte hätte analysiert werden können.

Dazu sind bisher folgende Veröffentlichungen erfolgt: Turbulent bubbly pipe flow in a vertical pipe computed by an eddy-resolving Reynolds-stress model. M.Ullrich, R.Maduta and S. Jakirlic, ETMM 10, Marbella Spanien 2014. An eddy resolving reynolds stress model for the turbulent bubbly flow in a square cross sectioned bubble column. M.Ullrich, B. Krumbein, R. Maduta and S. Jakirlic, IMECE 2014, Montreal Canada.

Literatur

1. M. Schrefl (2008), Instationäre Aerodynamik von Kraftfahrzeugen: Aerodynamik bei Überholvorgang und böigem Seitenwind. Aachen: Shaker.

Reynolds Number Effect on Turbulent Drag Reduction by Active Means

D. Gatti, C. Tropea

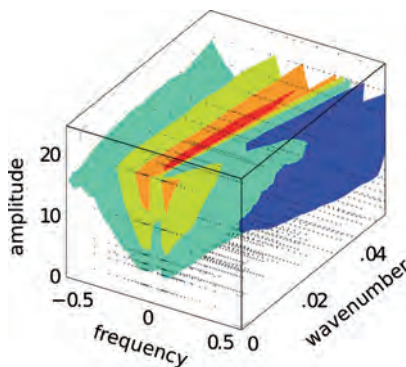
Fachgebiet Strömungslehre und Aerodynamik, TU Darmstadt

Funding source

Fritz und Margot
Faudi Stiftung,
Project 86

The control and manipulation of turbulent flows is an extremely important subject in the engineering practice. In aeronautics, the potential benefits of even modest gains obtained from drag reduction devices can be understood by noticing that about half of the cruise drag experienced by current commercial aircraft is due to friction. Based on Airbus estimates, even a 10% reduction of this drag would result in fuel saving of about 150,000 Euros per aircraft per year, or 2 billion Euros saving over the world every year. Concerning CO_2 , 10% reduction in drag would directly yield savings of 60 million tons of CO_2 per year. The present research project aimed at establishing the effectiveness of a modern technique, capable of reducing turbulent skin-friction drag, in a Reynolds (Re) number range closer to practical applications than currently available. Active control strategies for wall-bounded flows based on the movement of the wall, either the entire wall surface or a portion of it, were reviewed by Quadrio.¹ Control strategies based on spanwise movement are quite effective in disrupting the near-wall coherent structures responsible for the cycle of wall turbulence self-sustainment, hence achieving reduction of turbulence kinetic energy, with subsequent friction relief. The present study focused on a particular control technique based on a periodic movement of the wall in the spanwise direction respect to the direction of the mean flow, the streamwise-traveling waves of spanwise wall velocity,² which have been proven numerically and experimentally to yield substantial drag reduction (up to 48%) for waves traveling slower than the near-wall eddies in low- Re turbulent flows. A sensitive issue of the control techniques is the

possible effect of the Reynolds number, as Re of applicative interest are typically much higher than achieved in DNS so far. All available information on spanwise wall forcing to date concerns flows at very low Re and shows that the achieved drag reduction decreases for increasing Re . Hence, the present knowledge does not allow to predict whether and how much drag reduction can be achieved at high values of Re . The lack of information about the effect of turbulent flow control for drag reduction at high Re is mainly due to the increasing difficulties of running laboratory and numerical experiments with Re . On the one hand, the physical space- and timescales of near-wall turbulence reduce with Re , so that micro-sized actuators operating in kHz frequency range where required in a laboratory experiment. On the other, the computational costs for a Direct Numerical Simulation (DNS) increase exponentially with Re . Moreover, the amount of drag-reduction achievable with streamwise-traveling waves strongly depends on three different control parameters and the Reynolds number. Therefore, few experiments are not sufficient to completely measure the behavior of this control strategy at high Re but a complete parametric study is needed. Exploiting the potential of the Lichtenberg-cluster of TU Darmstadt, we produced a dataset consisting of more than 4,000 direct numerical simulations at two different values of Reynolds number, in order to quantitatively measure the effect of Re on the achievable amount of drag reduction. The DNS computer code³ is a mixed-discretization parallel solver of the in-compressible Navier–Stokes equations, based on Fourier expansions in the homogeneous directions and high-order explicit compact finite-difference schemes in the wall-normal direction. For temporal advancement, the viscous terms are discretized using the 2nd-order implicit Crank-Nicolson scheme while for the nonlinear convection term the 3rd order explicit Runge-Kutta with either two or three stages, in order enable adjustment of the stability properties. The mean pressure gradient is kept constant in time, so as to yield an univocal viscous scaling among uncontrolled and controlled channels. The nonlinear convection term is computed pseudo-spectrally and de-aliasing is performed with the 3/2 rule.



References

1. M. Quadrio, (2011), Drag reduction in turbulent boundary layers by in-plane wall motion, *Phil. Trans. R. Soc. A*, 369: 1428–1442.
2. M. Quadrio, P. Ricco, and C. Viotti (2009), Streamwise-traveling waves of spanwise wall velocity for turbulent drag reduction. *J. Fluid Mech.* 627: 161–178.
3. P. Luchini and M. Quadrio (2006), A low-cost parallel implementation of direct numerical simulation of wall turbulence. *J. Comp. Phys.*, 211(2): 551–571.

Scale-up of Calcium Carbonate Looping Technology for Efficient CO₂ Capture from Power and Industrial Plants

A. Stroh, J. Hilz, J. Ströhle, B. Eppe

Institut Energiesysteme und Energietechnik, TU Darmstadt

Funding source
EU

Multiphase flows are widely present in chemical processes, energy supply and carbon capture and storage technologies (CCS). In order to understand the hydrodynamics of particle transport and segregation phenomena of multiphase flows, computational fluid dynamics (CFD) simulations are applied. Basically, one can distinguish between the Euler-Euler approach and Euler-Lagrangian approach to calculate the flow-field, the interaction terms within one phase and between phases. The latter approach is usually quoted in the literature as the discrete particle model (DPM) for systems with low particle loading (particle volume fraction $\alpha_p < \approx 10\%$) and dense discrete particle model (DDPM) for dense particle systems ($\alpha_p > \approx 60\%$). In the discrete phase model the particle trajectories are calculated for each particle, which makes this approach computationally expensive for particle systems with more than 100,000 particles. In order to simulate particle systems with millions of particles, a simplification is made where thousands of particles are modelled in so called parcels. In this approach one parcel represents several thousands of particles. The collision forces between parcels take into account the total mass and volume of their represented particles. This simplification overcomes endless computational time following the trajectories of millions of particles. The following results were produced with the software ANSYS FLUENT using the DPM model. Figure 1 depicts simulated snapshots of the velocity field at 250 ms and shows the influence of different drag models on the particle velocity. In this simple case of a cold flow experiment every parcel

represents one particle. In total 36,000 thousand of particles with a diameter of 2.5 mm were simulated. The required computational time for conducting a transient simulation of 500 ms total time was approximately 24 hours, with 4 parallel cores of 3.5 GHz each. Obviously the drag model has a crucial role in predicting the flow pattern of the particles. Thus one focus of research will remain on the development of reliable drag models for different particle shapes and diameter ranges. In Figure 2 a snapshot of the velocity and pressure field of a circulating fluidized bed reactor (CFB) is presented. The pressure along the height of the riser is decreasing which is in agreement with experimental observations. These results fully confirm the great advantage of numerical simulation tools, accessing difficult measurable process parameter such as solid mass flow. The simulation was performed considering $\approx 44,000$ parcels and a total bed inventory of 260 kg. The simulation of 10 s real time required 1 week of computational time with 16 parallelized cores. In the further work, combustion reactions will be implemented in the numerical model in order to investigate the influence of energy exchange between the two interacting phases.

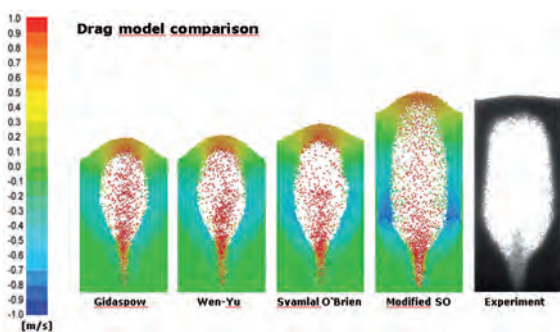


Fig. 1: Z-velocity snapshots at 250 ms

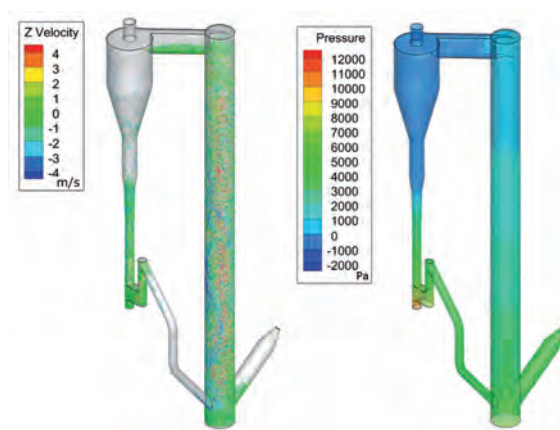


Fig. 2: Simulation of 1 MWth fluidized bed reactor with DDPM approach

Reference

1. Ansys Fluent Theory Guide. Southpointe 275 Technology Drive, Canonsburg, PA 15317: Ansys; 2011

Projektförderung
DFG

Kohlenstoffnanoröhren (englisch: carbon nanotubes, CNTs) besitzen eine Vielzahl interessanter mechanischer Eigenschaften, insbesondere eine hohe Zugfestigkeit bei niedrigem Gewicht. Dies ermöglicht die Konstruktion neuartiger, reißfester Fasern, die unter anderem in Komposit-Werkstoffen verwendet werden¹. An Flugzeugen des Herstellers Lockheed werden durch CNTs verstärkte Materialien bereits eingesetzt². Fügt man „normale“ CNTs zu Strukturen höherer Ordnung zusammen, so erhält man Strukturen, die wiederum die Form eines Röhrchens haben und super carbon nanotubes (SCNTs) genannt werden,³ (siehe Abbildung). Besonders charakteristisch für SCNT-Strukturen sind ihre hohe topologische und geometrische Symmetrie, Hierarchie und Selbstähnlichkeit. Im Rahmen der Kooperation werden die mechanischen Charakteristika von SCNT-Strukturen mittels Simulation untersucht.

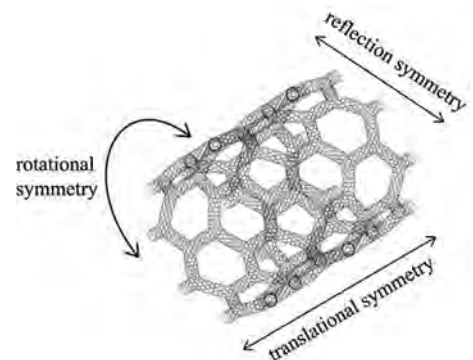
Zum Aufgabenbereich zählen die Klärung methodischer Fragen, darunter das Ausnutzen von Symmetrieeigenschaften für die Erarbeitung effizienter Berechnungsalgorithmen. Unser Framework simuliert mechanische Belastungen auf Kohlenstoffnanoröhren. Die SCNTs werden mittels eines graphen-algebraischen Algorithmus konstruiert.⁵ Die Identifizierung der Knoten durch Tupel anstelle sequenzieller Indizes erlaubt es, unmittelbar Informationen über die Symmetrie und Hierarchie einer Struktur zu kodieren. Für geometrisch symmetrische Konfigurationen lassen sich hieraus auch unmittelbar Aussagen über die Geometrie ableiten.

Zum Lösen des im Rahmen eines atomistischen Finite-Elemente-Verfahrens (AFEM, Wackerfuß)⁴ auftretenden Gleichungssystems wird ein präkonditioniertes Verfahren der konjugierten Gradienten eingesetzt. Unser

Algorithmus vermeidet die Konstruktion der Steifigkeitsmatrix, berechnet das benötigte Matrix-Vektor-Produkt mittels eines matrix-freien Operators⁶ und führt zu einem erheblich geringeren Speicherbedarf. Hiermit trägt der Algorithmus einem seit einigen Jahren zu beobachtenden Entwicklungstrend im Hochleistungsrechner-Bereich Rechnung: Speicherbandbreite und Latenzzeiten halten nicht Schritt mit der Steigerung der Rechenleistung der Prozessoren. Dieser Trend wird sich auch in Zukunft fortsetzen und eventuell verstärken.

Durch Ausnutzung der verschiedenen Arten von Symmetrie innerhalb der Röhrchen wird die Menge der anfallenden Berechnungen bei der Simulation kleiner Deformationen drastisch reduziert.⁷ Eine Parallelisierung nach dem OpenMP-Standard sowie eine Vektorisierung von Kernbereichen der Berechnung erlaubte eine weitere Reduzierung der Berechnungszeit und wies eine gute Skalierungscharakteristik auf.

Die bisherigen Ergebnisse sind vielversprechend; weitere Entwicklungen sollen vor allem die Skalierbarkeit des Frameworks verbessern und somit die Gesamtlaufzeit weiter reduzieren. Die Selbstähnlichkeiten der SCNT-Strukturen sollen ebenfalls im Fokus der weiteren Forschung stehen.



Literatur

1. M.F. Yu, B.S. Files, S. Arepalli, and R.S. Ruoff (2000), Tensile Loading of Ropes of Single Wall Carbon Nanotubes and their Mechanical Properties. In: Phys. Rev. Lett. 84: 5552–5555.
2. URL: <http://www.flightglobal.com/news/articles/lockheed-martin-reveals-f-35-to-feature-nanocomposite-357223/>
3. V.R. Coluci, D.S. Galvao, and A. Jorio (2006), Geometric and electronic structure of carbon nanotube networks: 'super'-carbon nanotubes. In: Nanotechnology 17 (2006), Nr. 3: 617.
4. J. Wackerfuß (2009), Molecular mechanics in the context of the finite element method. In: International Journal for Numerical Methods in Engineering 77, 7: 969–997.
5. C. Schröppel, and J. Wackerfuß (2012), Algebraic graph theory and its applications for mesh generation. PAMM12, 1: 663–664.
6. M. Burger, C. Bischof, C. Schröppel, and J. Wackerfuß (2015, submitted), A unified and memory efficient framework for simulating carbon nanotubes. Proc. International Conference on Computational Science.
7. M. Burger, C. Bischof, C. Schröppel, and J. Wackerfuß (2015, submitted), Exploiting structural properties during carbon nanotube simulation. Proc. International Conference on Computational Science and Its Applications.

Turbulente Fluid-Struktur-Akustik (FSA) Simulation einer Zylinder-Platten Konfiguration

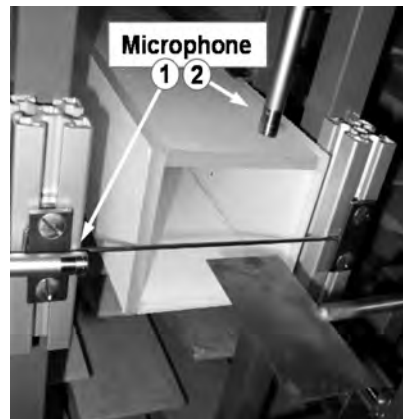
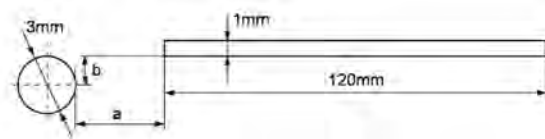
T. Winter, M. Schäfer, D. Sternel

Fachgebiet Numerische Berechnungsverfahren im Maschinenbau, TU Darmstadt

Ein Großteil des Lärms in unserer heutigen Umwelt wird durch turbulente Strömungen verursacht. Diese treten zum Beispiel bei der Umströmung von Automobilen, Flugzeugen oder Windkraftanlagen auf. Ebenso sind hierbei strömungsinduzierte Schwingungen der Struktur zu beobachten, wie beispielsweise bei Flugzeugflügeln oder Rotorblättern von Windkraftanlagen. Die Vorhersage und mögliche Reduzierung von Lärm sowie von Strukturbewegungen und einhergehenden Belastungen ist von großem Interesse. Phänomene der Fluid-Struktur-Interaktion (FSI) sowie der Aeroakustik sind seit einigen Jahren Gegenstand der Forschung. Mit Hilfe von Simulationsverfahren können bereits Aussagen zu Schwingungsverhalten oder Lärmentstehung getroffen werden. Um durch turbulente Strömungen hervorgerufene Fluid-Struktur-Akustik Phänomene in ihrer Gesamtheit untersuchen zu können, sind weitere Forschungstätigkeiten notwendig. In diesem Projekt werden Verfahren entwickelt, mit denen gekoppelte Fluid-Struktur-Akustik Phänomene untersucht werden können, um Aussagen über die Entstehung und das Verhalten von durch Strömung induziertem Lärm sowie Strukturbewegungen und deren Rückwirkung auf die Strömung treffen zu können. Hierbei ist es wichtig, die Strömung mit zeitauflösenden Verfahren zu simulieren - z. B. mit der Large Eddy Simulation (LES) oder der Direkten Numerischen Simulation (DNS) - um die akustischen Quellen korrekt zu bestimmen. Grundlage für die Strömungs-Akustik-Kopplung ist der „in-house“ Finite Volumen Strömungslöser FASTEST mit einem integrierten Akustiklöser^{1,2} auf Basis des Splitting-Ansatzes von Hardin & Pope³ und den Erweiterungen von Shen & Soerensen⁴. Die Strukturbewegung wird von FEAP⁵ berechnet und die Kopplung der Codes alternativ mit

PreCICE⁶ oder MpCCI⁷ durchgeführt. Die Simulation realer Problemstellungen wird extrem rechenintensiv, daher sind Algorithmen und Kopplungsmethoden erforderlich, die moderne Rechnerarchitekturen mit einer großen Anzahl von Prozessoren effizient nutzen. In diesem Projekt werden solche Verfahren im Rahmen des DFG Schwerpunktprogrammes SPPEXA⁸ weiterentwickelt und getestet. Die entwickelten Methoden sollen anhand des Beispiels Zylinder-Platten Konfiguration (Abbildung 1) validiert werden. Die zu erwartenden zeitintensiven Rechnungen werden voraussichtlich auf dem Lichtenberg Hochleistungsrechner durchgeführt.

Abbildung 1



Literatur

1. M. Kornhaas (2012), Effiziente numerische Methoden für die Simulation aeroakustischer Probleme mit kleinen Machzahlen.
2. F. Flitz (2014), Ein Konzept zur Simulation von Fluid-Struktur-Interaktion mit viskosen und akustischen Effekten.
3. J.C. Hardin, D.S. Pope (1994), An Acoustic/Viscous Splitting Technique for Computational Aeroacoustics. Theoretical and Computational Fluid Dynamics.
4. W.Z. Shen und J.N. Sørensen (1999), Aeroacoustic Modelling of Low-Speed Flows. Theoretical and Computational Fluid Dynamics.
5. R.L. Taylor und S. Govindjee (2011), FEAP – A Finite Element Analysis Program.
6. PreCICE Webpage. URL: http://www5.in.tum.de/wiki/index.php/PreCICE_Webpage
7. MpCCI CouplingEnvironment. URL: <http://www.mpcci.de>
8. ExaFSA - Exascale Simulation of Fluid-Structure-Acoustics Interactions. URL: <http://ipvs.informatik.uni-stuttgart.de/SGS/EXAFSA/research.php>
9. Winkler et al. (2012), Aeroacoustic effects of a cylinder-plate configuration. American Institute of Aeronautics and Astronautics.

Untersuchung der Strukturintensität als Indikator für die Schallabstrahlung von Strukturen

C. Schaal, J. Bös

Fachgebiet Systemzuverlässigkeit und Maschinenakustik, TU Darmstadt

Die Akustik – insbesondere die abgestrahlte Schallleistung – von Maschinen und Produkten gewinnt zunehmend an Bedeutung. Daher wird es in der Entwicklungsphase immer wichtiger, Strukturen bezüglich einer verminderten Schallabstrahlung zu optimieren oder auch Vorhersagen über die Wirkung von Strukturänderungen auf die Schallleistung zu treffen. Numerische Werkzeuge für akustische Simulationen existieren – diese sind aber zusätzlich zu den reinen Struktursimulationen durchzuführen. Wenn auf Basis von reinen Strukturgrößen bereits auf die Schallleistung geschlossen werden kann, könnte viel Zeit eingespart werden. In Rahmen eines Forschungsprojektes am Fachgebiet Systemzuverlässigkeit und Maschinenakustik (SzM) der TU Darmstadt wird untersucht, inwieweit die Strukturgröße Strukturintensität (STI) dafür verwendet werden kann. Die STI beschreibt den Energiefluss des Körperschalls in festen Strukturen.¹ Bei Betrachtung der Wirkkette von der Kraftanregung einer Struktur bis zur dadurch verursachten Schallabstrahlung² liegt die STI zwischen Kraftanregung und Schallabstrahlung und ist daher eine vielversprechende Größe.

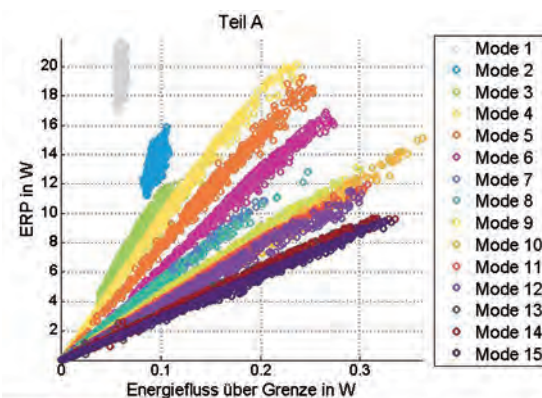


Abb.1:

Gegenüberstellung der äquivalent abgestrahlten Schallleistung ERP und dem Energiefluss in den Abstrahlbereich für die ersten 15 Eigenmoden einer Modellgruppe

Als Zielfunktion in einer Strukturoptimierung oder auch zum Vergleich mit der Schallleistung wird eine skalare Größe benötigt. Die STI ist jedoch eine Vektorfeldgröße – sie enthält sowohl die Information wie viel Energie als auch in welche Richtung diese in jedem Punkt einer Struktur fließt. Daher werden in einem ersten Schritt basierend auf der STI verschiedene Skalare definiert und jeweils auf ihre Korrelation zur äquivalent abgestrahlten Schallleistung (ERP) überprüft. Als Modell wird dabei eine gelenkig gelagerte Platte mit applizierter Rippe verwendet. Durch Variation der Rippe in ihrer Länge, Position und Ausrichtung auf der Platte wird eine Menge an Modellvarianten erzeugt – insgesamt 882 Modelle. Für alle Modelle werden harmonische Analysen in den jeweils ersten 15 Eigenmoden durchgeführt. Anschließend werden die ERP eines Plattenteils sowie die STI samt den definierten Skalaren für den gleichem Plattenteil berechnet und gegenübergestellt. Die numerische Simulation aller Modelle inklusive des Post-Processings erfolgt mittels der Software Abaqus/cae 6.13-3.

Die Analysen zwischen den STI-basierten Skalaren und der ERP eines Plattenteils ergeben, dass ein STI-basierter Skalar – der Energiefluss in den Bereich – mit der ERP des Bereichs korreliert. In Abbildung 1 ist die ERP für die 15 analysierten Frequenzen über dem Energiefluss aufgetragen. Eine Korrelation beider Größen innerhalb einer Mode ist klar erkennbar. Lediglich in den ersten beiden Eigenfrequenzen ist keine Korrelation zu erkennen. Bei einer multifrequenten Darstellung (Aufsummierung der Werte von ERP und dem Energiefluss über alle 15 Frequenzen) zeigt, dass auch hier eine Korrelation vorliegt. Bei Vernachlässigung der ersten beiden Frequenzen steigt die multifrequente Korrelation deutlich an.

Damit kann die STI zukünftig als Kriterium zur Vorhersage des Einflusses von Strukturänderungen auf die Schallabstrahlung oder als zu minimierende Zielgröße in Strukturoptimierungen verwendet werden.

Literatur

1. H. Hanselka und J. Bös (2014), Maschinenakustik. In: Dubbel – Taschenbuch für den Maschinenbau, 24. Auflage, Berlin: Springer-Verlag.
2. F. Kollmann (2000), Maschinenakustik: Grundlagen, Meßtechnik, Berechnung, Beeinflussung, 2. Auflage, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.

Mathematik und Informatik

mathematik

array2D[x

```
h * /  
id myKernel  
][y] = valu
```


Adaptive Numerical Wavelet Frame Methods for Elliptic Parabolic Operator Equations, Inverse Problems, and Stochastic Evolution Equations

U. Friedrich, S. Kinzel, D. Lellek, S. Dahlke

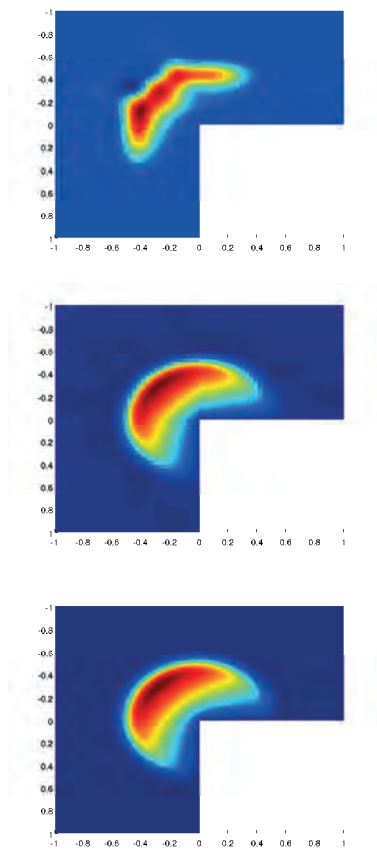
Fachgebiet Numerik und Optimierung, Philipps-Universität Marburg

Funding source

DFG

Many real-world phenomena are modelled by partial differential equations. Even in relatively low dimensions, the discretization of the equations usually leads to systems involving millions of unknowns. In such a situation, for these efficient numerical computation of a highly accurate approximate solution, adaptive schemes are often indispensable. In recent years, adaptive methods based on wavelets have been brought into focus. It is known that wavelets are predestined to resolve well

local phenomena, such as singularities, while smooth data can be coded with very few coefficients. In different research projects, we have developed, implemented, and tested new adaptive wavelet algorithms for the solution of operator equations. Moreover, another field of our current research is the adaptive solution of inverse (ill-posed) problems and of stochastic evolution equations, respectively. The starting point of our numerical methods is the construction of a proper wavelet collection spanning the solution space. In order not to be forced to cope with the often complicated construction of a wavelet Riesz basis on a general domain, we have focused on the weaker concept of wavelet frames^{2,3}. Based on this approach, in (Werner)⁷ a new type of parallel adaptive wavelet frame methods has been introduced. These schemes have been successfully tested on the MaRC Linux Cluster placed at the Marburg University Computing Center. In the meantime, these algorithms have been generalized to nonlinear problems.⁶ Splitting the domain into overlapping parametric images of stretched cubes and treating each parts in parallel turned to be asymptotically optimal. The methods have again been tested on MaRC. Another approach to treat complicated domains is to employ newly developed generalized tensor wavelets.¹ Another focus was the efficient numerical treatment of parameter identification problems.⁴ The algorithms have been applied to an inverse parabolic problem that stems from the biological problem of determining the critical parameters that describe the mutual interactions of genes in embryos at an early state of development. The 2D experiments consisted of 84 sets of parameters, computed in parallel, and for each experiment 20,000 parabolic equations had to be solved on MaRC.



References

1. N. Chegini, S. Dahlke, U. Friedrich, and R. Stevenson (2013), Piecewise tensor product wavelet bases by extension and approximation rates, *Math. Comp.* 82: 2157-2190.
2. S. Dahlke, M. Fornasier, and T. Raasch (2007), Adaptive frame methods for elliptic operator equations, *Adv. Comput. Math.* 27(1): 27-63.
3. S. Dahlke, M. Fornasier, T. Raasch, R. Stevenson, and M. Werner (2007), Adaptive frame methods for elliptic operator equations: The steepest descent approach, *IMA J. Numer. Anal.* 27(4): 717-740.
4. S. Dahlke, M. Fornasier, and T. Raasch (2012), Multilevel preconditioning for adaptive sparse optimization, *Math. Comp.* 81: 419-446.
5. S. Dahlke, U. Friedrich, P. Maaß, and R.A. Ressel (2012), An adaptive wavelet method for parameter identification problems in parabolic partial differential equations, *J. Inverse Ill-Posed Probl.* 20(2): 213-251.
6. D. Lellek (2013), Adaptive wavelet domain decomposition methods for nonlinear elliptic equations, *Numer. Methods Partial Differential Equations* 29: 297-319.
7. M. Werner (2009), Dissertation: Adaptive wavelet frame domain decomposition methods for elliptic operator equations, Philipps-Universität Marburg.

Automatische Hardwaresynthese für Löser von — konvexen Optimierungsproblemen

B. Liebig, A. Koch

Fachgebiet Eingebettete Systeme und ihre Anwendungen, TU Darmstadt

Die konvexe Optimierung ist ein Teilgebiet der mathematischen Optimierung. Es gilt dabei eine bestimmte Größe (Zielfunktion) zu minimieren, die von einem Parameter x abhängt. Der mögliche Wertebereich von x ist durch Nebenbedingungen eingeschränkt, die in Form von Gleichungen oder Ungleichungen gegeben sind. Ist sowohl die Menge der zulässigen Werte für x als auch die Zielfunktion konvex, so spricht man von einem konvexen Optimierungsproblem. Beispiele solcher Probleme sind die lineare Programmierung oder die Methode der kleinsten Quadrate. Die Lösung von konvexen Optimierungsproblemen ist in vielen Bereichen der digitalen Signalverarbeitung von Bedeutung, zum Beispiel bei der Model Predictive Control. Allerdings ist der zur Lösung notwendige Rechenaufwand relativ hoch und der daraus resultierende Hardware- und Energiebedarf verhindert oft den Einsatz in der Praxis. Die Lösung dieses Problems in einer spezialisierten Rechnerarchitektur bietet deutliche Vorteile, jedoch ist die manuelle Erstellung einer solchen Schaltung mit großem Entwicklungsaufwand und hohen Kosten verbunden.

Im Fachgebiet „Eingebettete Systeme und ihre Anwendungen“ des Fachbereichs Informatik wird an einer Kette von Software-Werkzeugen gearbeitet, die eine abstrakte Definition eines konvexen Problems bzw. einer Gruppe von ähnlichen Problemen automatisch in eine Hardware-Beschreibung für einen spezialisierten Rechenbeschleuniger umsetzt. Dabei wird zunächst mit frei verfügbaren Werkzeugen ein Softwareprogramm für eine Art von konvexen Problemen erzeugt. Anschließend wird dieses Programm mit den eigens entwickelten Werkzeugen weiter verarbeitet, um einen für die Problemklasse optimierten Hardwarebeschleuniger zu erhalten. Dieser wird anschließend auf ein Field Programmable Gate Array (FPGA) abgebildet. Bei einem FPGA handelt es sich um ein elektronisches Bauteil, in das auch ohne die übliche photochemischen Chip-Fertigung flexibel digitale Schaltungen programmiert werden können.

Besonderer Fokus liegt auf der High-Level Synthese, bei der eine Beschreibung der digitalen Schaltung automatisch aus einem Softwareprogramm erzeugt wird. Dazu wird der am Fachgebiet entwickelte C-zu-Hardware Compiler Nymble eingesetzt. Er erzeugt aus einem Softwareprogramm, welches in der Programmiersprache C vorliegt, eine Hardwarebeschreibung in Verilog HDL. Für die Beschleunigung der konvexen Löser durch spezialisierte Hardware wurde der Compiler Nymble¹ im Rahmen dieses Projektes um Funktionen erweitert, die eine Umsetzung der konvexen Optimierungsprogramme effizienter gestalten. Während andere kommerzielle und akademische C-zu-Hardware Compiler teilweise schon an der Verwendung von Fließkommaoperationen und Zeigervariablen scheitern oder deutlich zu große Hardware erzeugen, konnte mit Nymble bereits erfolgreich Hardware zur Lösung von kleineren konvexen Problemen erzeugt werden. Zur weiteren Steigerung von Energieeffizienz und Performance wurde außerdem eine vom Standard abweichende Divisionseinheit entwickelt, die auf die Zielhardware angepasst ist. Sie rechnet zwar etwas ungenauer, jedoch deutlich schneller als herkömmliche Divisionseinheiten.

So konnte die Rechengeschwindigkeit in einigen Fällen mehr als verdoppelt werden². Der Lichtenberg-Cluster wurde dabei für den letzten Schritt des Übersetzungsflusses, die Abbildung der mittels Nymble erzeugten digitalen Schaltung auf das FPGA genutzt. Dieser extrem rechenaufwendige „Place & Route“ Vorgang benutzt selber heuristische Optimierungsverfahren, die nicht immer die gleiche Lösung liefern. Durch eine Vielzahl von Läufen konnte der mögliche Abbildungsraum exploriert werden und somit eine möglichst gute Realisierung der Rechenbeschleuniger gefunden werden. Weitere Arbeiten des noch laufenden Projektes sollen die Energieeffizienz und Performance weiter steigern. Neben anderen Werkzeugen zur Erzeugung der Softwareprogramme ist hier auch eine Umstellung auf neuere FPGAs geplant.



Literatur

1. Huthmann, J., Liebig, B., Oppermann, J. und Koch, A., Hardware/software co-compilation with the Nymble system, 8th International Workshop on Reconfigurable and Communication-Centric Systems-on-Chip (ReCoSoC): 1-8. IEEE, Juli 2013.
2. Liebig, B. und Koch, A., Low-Latency Double-Precision Floating-Point Division for FPGAs, Proceedings of the 2014 International Conference on Field-Programmable Technology: 107-114, Dezember 2014.

Image and Scene Search in Historical Collections of DDR Television Recordings in the German Broadcasting Archive (DRA) by Automatic Content-based Video Analysis

M. Mühling, B. Freisleben

Fachbereich Mathematik und Informatik, Philipps-Universität Marburg

Funding source
DFG

The rapidly increasing proliferation of digital images and videos leads to a situation where content-based search in multimedia databases becomes more and more important. A prerequisite for effective image and video search is to analyze and index media content automatically. Due to the large amount of data and the associated hardware requirements, especially in the field of video retrieval, high performance computing plays an important role in this context. The high performance cluster MaRC has been used to support research in a collaborative project funded by German Research Foundation (DFG) called „Image and Scene Search in Historical Collections of DDR Television Recordings in the German Broadcasting Archive (DRA) by Automatic Content-based Video Analysis“. The goal of this project is to allow users to search within the DDR television recordings based on innovative methods from the field of content-based image and video retrieval. The developed algorithms bundled in the video content analysis toolkit „Videana“¹ provide methods for shot boundary detection, face detection, face recognition, text detection, optical character recognition, and visual concept detection. The visual concept detection approach is used to automatically assign semantic tags to images and videos. The resulting index can be used to efficiently process search queries in large-scale multimedia databases by mapping query terms to semantic concepts. Thus, the semantic index serves as an intermediate description to bridge the „semantic gap“

between the data representation of images and videos and their human interpretation. State-of-the-art visual concept detection systems mainly rely on local image features. Similar to the representation of documents in the field of text retrieval, an image or video shot can then be represented as a bag of visual words by mapping the local descriptors to a visual vocabulary. In this context, we developed enhanced local descriptors with respect to the spatial extent, the integration of color, and the use of audio information.⁴⁻⁶ Furthermore, novel object-based features are used as additional inputs for the classifiers (i.e., support vector machines) used in our approach. Another issue in the field of visual concept detection is the difference in the visual appearance of semantic concepts across different domains, for example, news videos and user-generated YouTube videos. Adaptive methods have been investigated to improve the cross-domain capabilities of concept detectors.² Finally, a long-term incremental web-supervised concept learning approach³ has been presented that exploits social web resources as training data and thus minimizes the human effort for building concept models. The evaluation of these novel approaches is based on large sets of images and videos, and often several hundreds of visual concepts had to be trained and tested. The MaRC cluster has been used for these extensive experiments, and significant performance improvements in terms of retrieval performance have been obtained. For the DDR television recordings, a concept lexicon of 106 visual concepts, such as „beach“, „winter“, „woman“, „airport“, or more special concepts such as „brotherly kiss“ and „Trabant“ has been developed. First evaluations on 220 hours of DDR television recordings show very promising results. Recently, artificial neural networks are experiencing a renaissance in computer vision, and we are currently investigating hybrid approaches using bag-of-visual words in combination with convolutional neural networks.



References

1. R. Ewerth, M. Mühling, T. Stadelmann, J. Gllavata, M. Grauer, and B. Freisleben (2008), Videana: A Software Tool for Scientific Film Studies. Digital Tools in Media Studies, Transcript Verlag Bielefeld: 101–116.
2. R. Ewerth, M. Mühling, and B. Freisleben (2012), Robust Video Content Analysis via Transductive Learning. ACM Transactions on Intelligent Systems and Technology: 1–26.
3. R. Ewerth, K. Ballafkir, M. Mühling, D. Seiler, and B. Freisleben (2012), Long-Term Incremental Web-Supervised Learning of Visual Concepts via Random Savannas. IEEE Transactions on Multimedia: 1008–1020.
4. M. Mühling, R. Ewerth, and B. Freisleben (2011), On the Spatial Extents of SIFT Descriptors for Visual Concept Detection. In Proc. of the 8th International Conference on Computer Vision Systems: 71–80.
5. M. Mühling, R. Ewerth, J. Zhou, and B. Freisleben (2012), Multimodal Video Concept Detection via Bag of Auditory Words and Multiple Kernel Learning. In Proc. of the 18th International Conference on Multimedia Modeling: 40–50.
6. M. Mühling (2014), PhD thesis: Visual Concept Detection in Images and Videos, University of Marburg, Germany.

Ein 2-Komplex K heißt asphärisch, wenn jede stetige Abbildung einer 2-Sphäre S nach K homotopieäquivalent zur der trivialen Abbildung ist, bei der ganz S auf einen Punkt abgebildet wird. 1941 fragte Whitehead, ob Teilkomplexe asphärischer 2-Komplexe immer selbst asphärisch sind. Die Frage ist immer noch offen, obwohl es viele Veröffentlichungen zur Whitehead-Vermutung in den letzten Jahrzehnten gegeben hat. Die Whitehead-Vermutung lässt sich in einen endlichen und einen unendlichen Fall unterteilen. Bis auf die Andrews-Curtis-Vermutung muss es im endlichen Fall, falls es überhaupt endliche Gegenbeispiele gibt, ein Gegenbeispiel unter 2-Komplexen zu Baumpräsentationen geben. Baumpräsentationen verallgemeinern Knotenpräsentationen und sind ihr algebraisches Analog. In diesem Projekt geht es darum, die Asphärität von Baumpräsentationen zu untersuchen um langfristig entweder ein Whitehead-Gegenbeispiel zu finden oder Baumpräsentationen als asphärisch zu erweisen.

Ist ein 2-Komplex nicht-asphärisch, so muss es ein reduziertes sphärisches Diagramm geben, welches ein nichttriviales Homotopieelement realisiert. Es ist unentscheidbar, ob ein 2-Komplex asphärisch ist oder nicht. Trotzdem lassen sich sphärische Diagramme über 2-Komplexen konstruieren und auf Reduzierbarkeit prüfen.

Seit 2008 läuft auf den CSC Clustern ein Programm, welches systematisch „kleine“ Baumpräsentationen nimmt und versucht reduzierte sphärische Diagramme über den zugehörigen 2-Komplexen zu bauen. Bisher hat das Programm etwa 150 reduzierte sphärische Diagramme über Baumpräsentationen konstruiert. Es ist noch kein Gegenbeispiel zur Whitehead-Vermutung gefunden worden, aber alle reduzierten Diagramme weisen eine ähnliche Struktur auf. Diese Struktur liefert wesentliche

theoretische Erkenntnisse über sphärische Diagramme, die sich für weitere Forschungen nutzen lassen. In diesem Rahmen konnte in gemeinsamer Arbeit mit Prof. Dr. Harlander (Boise, Idaho, USA) die Asphärität injektiver Baumpräsentationen gezeigt werden¹ und eine weitere Klasse nicht-injektiver Baumpräsentationen als asphärisch erwiesen werden.²

Das Programm hat bisher Baumpräsentationen, die sich als Intervalle darstellen lassen, mit bis zu zehn Erzeugenden systematisch untersucht. In Zukunft sollen größere Beispiele und auch solche untersucht werden, die keine Intervallform haben. Es wurden bisher nur zwei Beispiele reduzierter sphärischer Diagramme gefunden, die keine Intervallform haben, so dass diese Beispielklasse besonders interessant sein könnte. Erstmals sind die theoretischen Erkenntnisse, die zum Teil den Beispielen aus dem Programm zu danken sind, so klar, dass versucht werden kann, die Asphärität aller Baumpräsentationen zu beweisen. Es besteht die Hoffnung, dass große Klassen nicht-injektiver Baumpräsentationen ohne Teilbäume den Gewichtstest erfüllt. Dieser Test erweist 2-Komplexe über Krümmung als asphärisch. Es ist bekannt, dass nicht jeder 2-Komplex über einer Baumpräsentation den Gewichtstest erfüllt, möglicherweise lassen sich aber alle Baumpräsentationen durch einfache Homotopien in solche verwandeln.



Literatur

1. J. Harlander and S. Rosebrock (2014, preprint), Injective labeled oriented trees are aspherical.
2. J. Harlander and S. Rosebrock (2015), Aspherical Word Labeled Oriented Graphs and Cyclically Presented Groups.

Dynamics of Buoyant High Viscosity Droplets Rising Freely in an Ambient Liquid

C. Albert, A. M. Robertson, J. Kromer, D. Bothe

Fachgebiet Mathematische Modellierung und Analysis, TU Darmstadt

Funding source
DFG, GSCE
TU Darmstadt

Fluid particles with deformable shape which move through an ambient liquid medium can be found in a wide range of industrial and environmental processes. Examples include falling rain drops, bubble column reactors, or heat exchangers. The dynamic behaviour of the involved particles is of crucial importance and thus needs to be investigated in detail. There is a wide scope of mechanisms taking place at the fluid interface, especially transfer of mass - i.e. solute species - and heat due to temperature differences. Thus, the shape of the fluid interface and its dynamics are of key interest. The deformability of high viscosity droplets can be regarded as an intermediate case between free rigid particles and gas bubbles. Here, corn oil droplets rising in ambient water are considered as a prototype system. Droplets of different sizes exhibit a wide range of phenomena, especially concerning (in-)stability and bifurcations. Albert et al. ¹ have conducted a systematic computational analysis, which is perpetuated by the authors. To get insight to the fundamental underlying flow dynamics, theoretical,

experimental and numerical approaches can be taken. Theoretical results can usually only be obtained for a very limited number of flows, which restricts their application to problems of academic interest. Experimentally identifying the fundamental mechanisms is also difficult, due to the presence of severe influences, e.g. contamination with surfactants, which have effects on fluid properties like surface tension. The above disadvantages can be circumvented by direct numerical simulation (DNS) of the governing Navier-Stokes equations. In order to capture the flow physics with reliable accuracy, the computational domain must be resolved with sufficient resolution. Further, the domain dimension has to be chosen carefully to reduce boundary influences, implying large computational costs. The in-house code FS3D, originally developed by Rieber², is applied to numerically solve the two-phase formulation of the Navier-Stokes equations. The fluid phases (e.g., air/water or oil/water) are distinguished by means of a phase indicator function, which allows to reconstruct the fluid interface and the trajectory of the droplet center of mass.

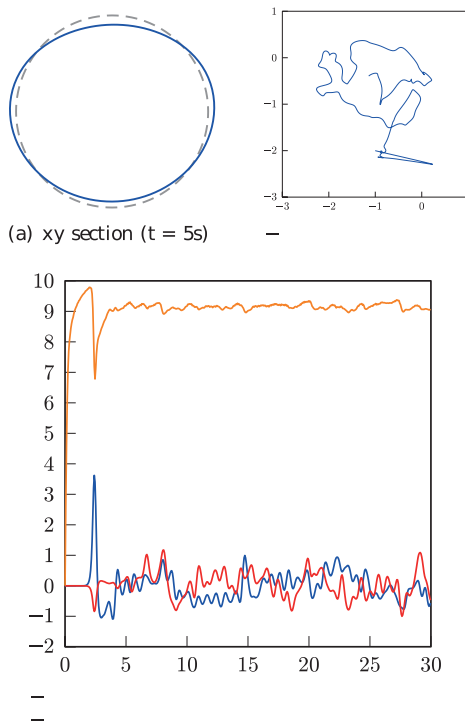


Figure (1) depicts the shape, trajectory and velocity of an initially resting cornoil droplet freely rising in water, with an initial diameter $d=5.7\text{mm}$. Although the trajectory is subject to oscillations, the shape of the droplet quickly stabilizes, while only its orientation changes over time. For larger droplets however, the shape oscillations are amplified, without reaching a steady state. As for the future, the shape oscillation characteristics with respect to the droplet sizes will be studied in more detail.

The work of J. Kromer is supported by the of the German Federal and State Governments and the Graduate School of Computational Engineering at TU Darmstadt.

Figure 1:

Shape, trajectory and velocity over time for droplet with $d=5.7\text{mm}$.

References

1. C. Albert, A.M. Robertson, and D. Bothe (submitted), Dynamic behaviour of buoyant high viscosity droplets rising freely in a quiescent liquid.
2. M. Rieber (2004), PhD thesis: Numerische Simulation der Dynamik freier Grenzflächen in Zweiphasenströmungen, Universität Stuttgart.

Im Rahmen der Veranstaltung „Grundlagen der Informatik III“ (regulär im 3. Semester Bachelor Informatik und verwandten Fächern) wird den Studenten neben den Grundlagen der Betriebssysteme und des Compilerbaus auch die Programmiersprache C++ sowie die Methodik des parallelen Programmierens vermittelt. Sowohl im Wintersemester 13/14 als auch im Wintersemester 14/15 beinhaltete der Stoff auch das Programmieren massiv-paralleler Systeme. Darunter versteht man Beschleunigerkarten für HPC-Systeme und Workstations (meist Grafikkarten), die oft mehr als 1.000 einfache Prozessoren aufweisen. Im Gegensatz zu normalen CPUs sind diese allerdings – bedingt u.a. durch die spezielle Hardware – aufwändig zu programmieren. Die Studenten konnten in beiden Jahren anschließend als Praktika Projekte mit Themen aus den Arbeitsgruppen der Dozenten Prof. Goesele bzw. Prof. Bischof (beide Fachbereich Informatik) absolvieren, um die Klausurzulassung zu erlangen. Prof. Goesele ließ die Studenten einen „Plane Sweep Stereo“ Algorithmus implementieren, der aus mehreren verschiedenen Bildern einer Szene ein 3D-Modell rekonstruieren kann. Dieser Prozess ist sehr rechenaufwändig und gut zu parallelisieren, sodass die Studenten schon mit einer einfachen Implementierung deutliche Geschwindigkeitsunterschiede zur vorgegebenen CPU-Implementierung (etwa Faktor 5) feststellen konnten. Von 640 Teilnehmern der Vorlesung bearbeiteten 172 dieses Praktikum erfolgreich. Im aktuellen Wintersemester konnten die Studenten ihr Wissen an einer im HPC Bereich oft auftretenden Problemstellung anwenden: Der Simulation von Partikeln mit verschiedenen Massen und der entstehenden Gravitationskräfte zwischen selbigen. Eine CPU-Implementierung war bereits die Aufgabe eines vorangegangenen Praktikums, sodass Prof. Bischof die unterschiedliche Methodik der Programmierung sehr genau verdeutlichen konnte. Insbesondere wurde auf die Verwendung der verschiedenen Speichertypen auf der Hardware eingegangen.

Von 688 GD13-Studierenden nahmen ca. 400 am Praktikum teil. Um allen Studierenden in beiden Jahren Zugriff auf die massiv-parallele Hardware zu ermöglichen, wurden jeweils vier Knoten des Clusters logisch abgetrennt und den Studentinnen und Studenten zur Verfügung gestellt. Dadurch hatten sie Zugriff auf mehrere Grafikkarten des Typs Tesla K20c. Neben der Programmierung der Hardware konnten sich die Studierenden dabei in der Bedienung und Benutzung eines Batchsystems üben und erhielten so eine Einführung in das Clustercomputing. Unter Verwendung desselben Setups steht der Cluster auch zur Nutzung im Rahmen der weiterführenden Lehrveranstaltung „Programming Massively-Parallel Processors“ bei Prof. Goesele im Wintersemester 14/15 bereit. Teil der Veranstaltung sind umfangreiche Gruppenprojekte auf CUDA-unterstützender Hardware. An dieser Veranstaltung nahmen knapp 40 Studierende teil.



Abbildung:
Referenz-Eingabebild des Plane Sweep Stereo sowie entstehendes
3D-Modell im Rohformat, ohne weitere Bearbeitung.

Management virtueller Maschinen in Linux High Performance Clustern

T. Gebhardt, R. Schwarzkopf, M. Schmidt, B. Freisleben

Fachbereich Mathematik und Informatik, Hochschulrechenzentrum, Philipps-Universität Marburg

Projektförderung
HMWK: Stärkung der
Methodenkompetenz
im Hessischen Hoch-
leistungsrechnen

Traditionelle Linux High Performance Cluster (HPC) wie der Marburger Rechen-Cluster (MaRC2) basieren auf einem Verbund von physischen Rechenknoten, die zentral mit Hilfe eines Batch-Systems (in MaRC2: Sun Grid Engine) administriert werden. Neue Programme stellen den Administrator vor die Herausforderung, eine geeignete Umgebung bereit zu stellen. Diese haben oft neue Sprachen und eine Vielzahl von Bibliotheken, so dass eine unkomplizierte Installation einer Laufzeitumgebung unter Umständen erschwert oder gar nicht zur leisten ist.

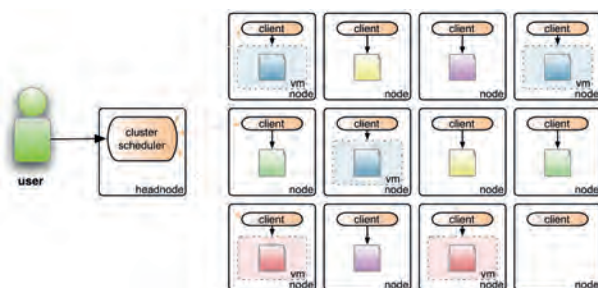
Unterschiedliche Laufzeitumgebungen beschränken zudem die Portierung von Software auf andere HPC-Cluster. Ziel des Projekts ist der Einsatz von Virtualisierungstechnologie im HPC-Umfeld, d.h. die Entwicklung einer Infrastruktur, die einen Mischbetrieb zwischen virtualisierten und nicht virtualisierten Jobs ermöglicht. Virtualisierter Job bedeutet, dass der Job innerhalb einer virtuellen Maschine (VM) ausgeführt wird. Diese bietet den Vorteil, dass der Anwender selbstständig eine Laufzeitumgebung für seine Programme einrichten kann, was den Administrator entlastet. Eine Alternative sind vorgefertigte VMs. Damit werden Auswirkungen auf das Gesamtsystem durch vom Anwender installierte Software vermieden. Zudem ist eine feingranulare Beschränkung der Ressourcen für jede VM möglich. Schließlich lösen VMs das Problem der Portierung von Software.

Zwei Konzepte zum Management von VMs wurden entwickelt: eine direkte Kopplung an den Cluster-Scheduler

und die Bereitstellung eines „virtuellen Clusters“. Bei einer direkten Kopplung werden für jeden Job dediziert VMs erzeugt und zur Ausführung verwendet. Das zweite Konzept partitioniert das System in einen virtuellen und einen nicht virtuellen Teil und verwendet virtuelle Rechenknoten, die sich ganz regulär als Rechenknoten am Cluster-Scheduler anmelden. In beiden Fällen ist die Virtualisierung für den Scheduler transparent, es sind jedoch beim zweiten Konzept Veränderungen der Partitionierung sichtbar. Für das erste Konzept spricht die höhere Flexibilität ohne vorgegebene Partitionierung und die Möglichkeit des Einsatzes Job-spezifischer VMs. Die dynamische Anpassung der Konfiguration einer VM bezüglich des Netzwerks und des verwendeten Scheduler-Clients basiert auf einem System zur Komposition von VMs aus verschiedenen Schichten.¹

Eine Folge benutzerspezifischer VMs ist, dass eine große Zahl von VMs vorgehalten werden muss. Klassische Disk Images sind als Speicherformat für VMs nicht geeignet. Zur Lösung dieses Problems wurde der Marvin Image Store² entwickelt, der neben der effizienten Speicherung von VMs mittels Deduplizierung die Historie der einzelnen VMs verwaltet. Zwei Lösungen zur Sicherheit von VMs wurden entwickelt: Der Update Checker^{3,4} prüft, ob für eine VM Sicherheits-Updates verfügbar sind, sogar wenn sie zum Zeitpunkt der Überprüfung nicht ausgeführt wird. Die Online Penetration Suite⁴ prüft die Sicherheit der Konfiguration mittels Vulnerability Scanner. Dessen Ergebnisse können verwendet werden, um den Start einer veralteten bzw. unsicheren VM zu verhindern.

Abschließend wurde eine Evaluation verschiedener Hypervisoren (Xen, KVM, Vmware vSphere/Workstation, Oracle VM Server/VM Virtual Box) zum geplanten Einsatzzweck durchgeführt: KVM ist die passendste Lösung. Durchgeführte Messungen zeigten die grundsätzliche Eignung von VMs im HPC-Umfeld, wobei der durch die Virtualisierung erzeugte Overhead in bestimmten Konfigurationen noch optimiert werden kann.



Literatur

1. R. Schwarzkopf, M. Schmidt, N. Fallenbeck und B. Freisleben (2009), Multi-Layered Virtual Machines for Security Updates in Grid Environments. Proc. 35th Euromicro Conf. on Internet Technologies, Quality of Service and Applications, 563–570, IEEE.
2. R. Schwarzkopf, M. Schmidt, M. Rüdiger und B. Freisleben (2012), Efficient Storage of Virtual Machine Images. Proc. 3rd Workshop on Scientific Cloud Computing at ACM HPDC, 51-60, ACM.
3. R. Schwarzkopf, M. Schmidt, C. Strack und B. Freisleben (2011), Checking Running and Dormant Virtual Machines for the Necessity of Security Updates in Cloud Environments. Proc. 3rd IEEE Int. Conf. on Cloud Computing Technology and Science, 239-246, IEEE.
4. R. Schwarzkopf, M. Schmidt, C. Strack, S. Martin und B. Freisleben (2012). Increasing Virtual Machine Security in Cloud Environments. Journal of Cloud Computing: Advances, Systems and Applications, 1:12, Springer.

Funding source
GSCE TU
Darmstadt

In the last years, Graphics Processing Units (GPUs) have been increasingly used in many scientific applications. The main reason for this is their massive compute power for parallel applications, which can be used in many research fields. Programming interfaces such as CUDA or OpenCL allow even programmers with only little experience in programming to write basic GPU applications. Unfortunately it is still quite challenging to leverage the full potential of a GPU since this requires a deep understanding of the underlying hardware itself and a lot of experience in programming GPUs efficiently.

There are a lot of aspects which have to be optimized starting by choosing the correct algorithms, mapping the algorithms to the hardware resources and providing the data in the correct format, so that the complex memory hierarchy is optimally used. Memory access is especially difficult to optimize, as there are many degrees of freedom available, e.g. memory layouts, memory types, and caches. Furthermore with each new GPU generation the constraints for the memory typically change quite significantly which requires to re-optimize the entire memory access. Additionally even in the same GPU generation there are many differences in memory types used, memory interface width, number of processing units on the GPU, etc. which create a unique memory access behavior for each model even in the same GPU generation. That is why we created MATOG which aims to take the burden of optimizing the memory access in CUDA applications from the programmer. MATOG tries to interfere as little as possible with the actual programming and does not use a different compiler. Instead it generates C++ code which can be used platform independently and mimics the behavior of a Java-like memory access (Figure 1) as this is much less error prone as the classic C++ memory access for multi-dimensional arrays and gives us the necessary degrees of freedom for optimizing.

In our first paper¹ we showed the potential of such an automated optimization as it even outperformed hand optimized code but it also showed where we can continue to optimize MATOG. Currently we are working on removing framework specific limitations so that the integration of MATOG into existing GPU applications can be done with ease in any kind of GPU applications.

Further we are working on techniques to reduce the number of benchmark runs required to find the best configuration for an application on a given GPU. For this we use the Lichtenberg's accelerator section with NVIDIA GPUs which allows us to run many different optimization algorithms on multiple evaluation applications in parallel.

```

/* -- CUDA -- */
global void myKernel(float* array2D) {
    // ...
    array2D[x + y * width] = value;
    // ...
}

/* -- MATOG -- */
global void myKernel(float2D array2D) {
    // ...
    array2D[x][y] = value;
    // ...
}
    
```

As one of the goals of MATOG is to optimize real world applications which typically have long execution times, it would take much more time if we only could execute these evaluations on a single machine in our institute. Figure 1 shows all evaluated configurations for a GPU based parallel sorting algorithm where MATOG is able to speed up the execution more than 2 times compared to a naïve implementation. This is a very limited evaluation example with only 27 possible configurations. Our more complex evaluation applications have up to 140.000 possible configurations which cannot be fully evaluated in a feasible time.

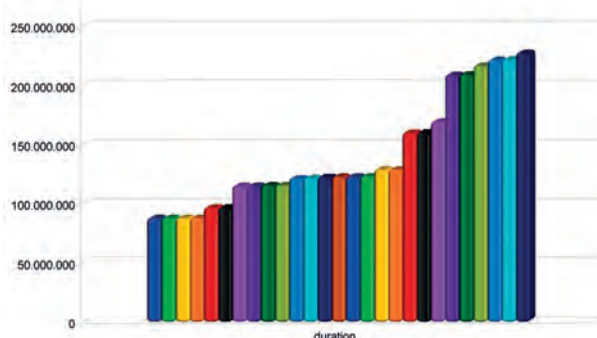


Fig. 1: This figure shows the quite significant difference of execution time (in nanoseconds) by simply changing the input data format for a GPU based parallel sorting algorithm. For more information: www.gris.tu-darmstadt.de/projects/matog

Reference

1. N. Weber and M. Goesele (2014), Auto-Tuning Complex Array Layouts on GPUs, In Proc. Eurographics Symposium on Parallel Graphics and Visualization.

Modeling and Numerical Simulation of Species Transfer in Bubbly Flows Using OpenFOAM

H. Marschall, D. Deising, D. Bothe

Fachgebiet Mathematische Modellierung und Analysis, TU Darmstadt

Funding source
BMBF

The aim of our study is the deduction of an improved interfacial species transfer closure to be further used in bubble column simulations utilizing a two-fluid model. To arrive at such a closure, our research focuses on the Direct Numerical Simulation (DNS) of species transfer at rising single bubbles and bubble groups from the gas phase into the liquid phase. For our simulations, we employ a Volume-of-Fluid (VoF) method based on the OpenFOAM interFoam solver. The species transfer is simulated using a novel single field model named ‚enhanced Continuous Species Transfer (CST)‘ model¹, which is based on the works of Marschall et al.² and Haroun³. In the simulation of rising single bubbles, we follow the

bubble by employing a moving reference frame technique. The bubble swarms are mimicked by a bubble group in a fully periodic domain (pseudo swarm). The numerical implementation has been accomplished in the OpenFOAM C++ library for computational continuum mechanics, hence, it supports arbitrary unstructured meshes including dynamic adaptive mesh refinement (AMR) around the interface and a dynamic load balancing technique, which are employed to enhance the performance in parallel computations (HPC aspect! See figure). Algebraic advection of volumetric phase fraction and species concentration are based on Interface Capturing Schemes for consistency. The corresponding solvers were found to be accurate and robust with a comprehensive set of numerical benchmarks and validation test cases for realistic transport and material properties, i.e. realistic Schmidt numbers, diffusivity ratios and Henry coefficients. Further, a study of species transfer from single rising bubbles for different fluid properties was started, to obtain a closure relation for mass transfer which includes the influence of bubble shape. This influence is only briefly studied in literature,⁴ although it has a significant influence onto the interfacial mass transfer.

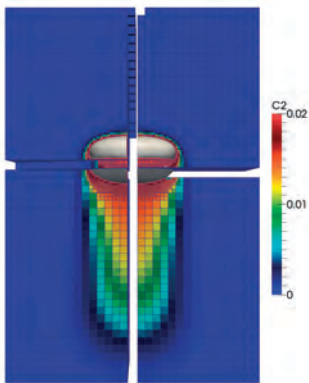


Figure: AMR and load balancing.

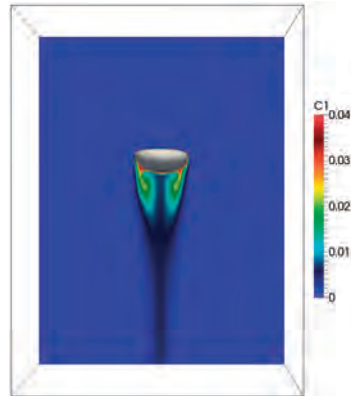
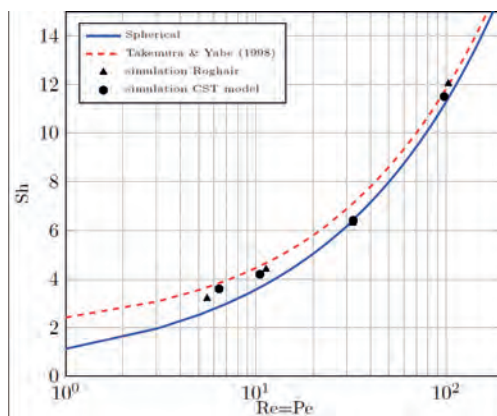


Figure: Species concentration ($Pe=1000$).

Figure:
Sherwood correlation
comparison.



Our main focus in recent history was the model development, implementation and validation for simulating species transfer in context of algebraic VoF methods. The future focus will be on high performance computing, simulating interfacial species transfer at rising single bubbles and bubble groups by means of DNS to arrive at a closure model for mass transfer.

We gratefully acknowledge the financial support from BMBF project ‚Multiscale Modeling of Multiphase Reactors (Multi-Phase)‘ (FKZ: 01RC1102).

References

1. D. Deising, H. Marschall, and D. Bothe (2014), A unified single-field model framework for Volume-of-Fluid simulations of interfacial species transfer applied to bubbly flows. Submitted to Computers and Chemical Engineering.
2. H. Marschall et al. (2012), Numerical simulation of species transfer across fluid interfaces in free-surface flows using OpenFOAM. Chemical Engineering Science 78: 111-127.
3. Y. Haroun, D. Legendre, and L. Raynal (2010), Volume of fluid method for interfacial reactive mass transfer: Application to stable liquid film. Chemical Engineering Science 65: 2896-2909.
4. A. C. Lochiel, P. H. Calderbank. 1964. Mass transfer in the continuous phase around axisymmetric bodies of revolution. Chemical Engineering Science 19, 471- 484.

Funding source
BASF SE

The „High Weissenberg Number Problem“ (HWNP) has been a major challenge in computational rheology. It refers to the loss of convergence of all numerical methods beyond some limiting value of the fluid elasticity, quantified by a critical Weissenberg number. The critical value varies with the problem, in particular with regard to the flow geometry and the fluid constitutive model. Although a complete solution is not known until today, several effective numerical stabilization methods have been developed to cope with the HWNP.^{1,2,3} However, there is a multitude of constitutive models describing viscoelastic material behavior, with which the stabilization approaches are to be combined. For the first time, this combination has been realized in a general way by deriving model-independent forms of the stabilized equations. We have developed a generic stabilization library that provides full combinatorial flexibility between different kinds of rheological models on the one hand, and distinct stabilization methods on the other hand. Our framework has been implemented by massive use of generic C++ template programming, runtime polymorphism and overloading. It is build on top of the open source library OpenFOAM, which provides a finite volume method on general unstructured meshes.

The planar entry flow in a 4:1 contraction is a benchmark problem in computational rheology. In Figure 1, we present results of an Oldroyd-B fluid in a 4:1 contraction. Additionally, some published values from the literature are plotted. Our purpose is to validate the results of two different stabilization methods from our new library, namely, the logarithm conformation tensor representation (LogC) and the squareroot conformation tensor representation (SqrtC). Our results for this benchmark test agree well with those from the literature. For standard numerical methods, such as the stress tensor representation (Str), the critical Weissenberg number is reported as $Wi = 2.8^4$. In contrast, our stabilization framework has

been found to be both robust and accurate for much higher Weissenberg numbers up to $Wi = 100^5$. All simulations have been carried out using a finite-volume method on unstructured meshes. The computational mesh with a total number 146250 cells has been decomposed into 12 subdomains for reasons of parallelisation.

We are currently validating our numerical methods in several computational benchmark problems over a large range of Weissenberg numbers. Our purpose is to present mesh converged solutions on different computational meshes and to compare the numerical methods, particularly regarding accuracy and robustness. Moreover, we are extending our code in order to simulate viscoelastic two-phase flows.

The authors would like to acknowledge BASF SE for the financial support of this work, as well as Christian Kunkelmann, Erik Wassner and Sebastian Weisse for their cooperation, assistance, and enlightening discussions.

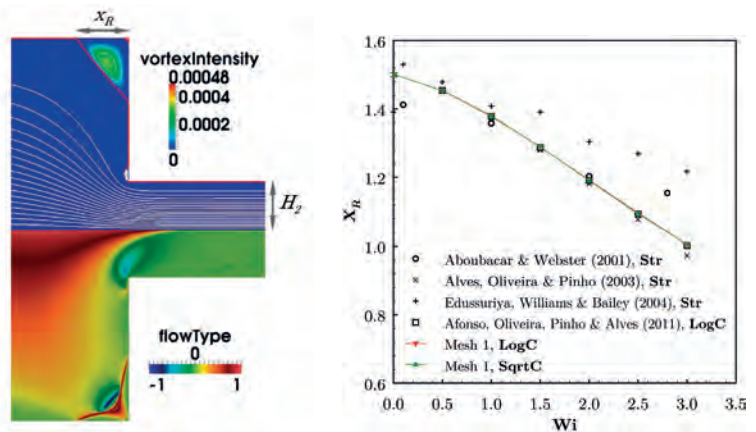


Fig. 1: Benchmark solutions of an Oldroyd-B fluid in a 4:1 contraction. Left: Flow pattern at $Wi=2$. Right: Variation of the corner vortex size $XR = xR/H2$ with the Weissenberg number.

References

1. R. Fattal and R. Kupferman (2004), Constitutive laws for the matrix-logarithm of the conformation tensor, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 123: 281–285.
2. M.A. Hulsen, R. Fattal, and R. Kupferman (2005), Flow of viscoelastic fluids past a cylinder at high Weissenberg number: Stabilized simulations using matrix logarithms, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 127: 27–39.
3. N. Balci, B. Thomases, M. Renardy, and C.R. Doering (2011), Symmetric factorization of the conformation tensor in viscoelastic fluid models, *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 166: 546–553.
4. M.A. Alves, P.J. Oliveira, and F.T. Pinho (2000), Benchmark solutions for the flow of Oldroyd-B and PTT fluids in planar contractions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 93: 45–75.
5. M. Niethammer, H. Marschall, C. Kunkelmann, and D. Bothe (2015, in prepration), A numerical stabilization framework for viscoelastic fluid flow using the finite volume method on general unstructured meshes.

Numerical Study of Binary Droplet Collisions at High Weber Numbers

M. Liu, D. Bothe

Fachgebiet Mathematische Modellierung und Analysis, TU Darmstadt

Funding source
DFG

When two droplets collide with each other, there are some interesting phenomena to be observed: the droplets can bounce off without any material exchanges, the droplets can be permanently combined to a single droplet, and a combined droplet can also be separated into two or more droplets. In case of high Weber numbers, i.e. high collision energy, the collision phenomenon is more fascinating: many secondary droplets are constantly splattered out from the rim of combined droplet at early time after collision. As an example, in technical applications binary droplet collisions influence the droplet size distribution in combustion chamber of an engine and thus the combustor efficiency and the performance of the engine.

It is important to understand the dynamics of droplet collisions concerning the scientific interest and technical applications. One important part of the priority programme 1423 of DFG is the numerical investigation of the behaviour of droplet collisions at high Weber numbers. In order to conduct the numerical studies, we utilize the in-house code FS3D (Free Surface 3D) which is based on the volume of fluid method (VOF)¹ by which the free surface is implicitly represented by a phase indicator which gives the volume fraction of the disperse phase in a computational cell. To capture the thin lamella of the combined droplet, FS3D is extended

with a lamella stabilization method which corrects the calculation of the surface tension force in the lamella region.² To reduce computational efforts or to increase the computational resolution, a domain adjustment technique is employed which makes the computational domain suit to the deformation of the combined droplet. The evolution history of a combined droplet from the numerical simulation is shown in Figure 1. The numerical results successfully predict the unstable development of the rim of the collision complex. One observes the extrusion of a fluid-sheet from the middle part of the combined droplet, the undulation of the rim, the formation of finger-like structure and finally the detachment of secondary droplets. In addition, we gained detailed information of the flow inside the combined droplet taking advantage of the fully resolved numerical simulations.

Based on the current numerical results we are aiming to gain more insight into the unstable phenomena at the developing rim of the combined droplet. Simulations with different collision conditions as well as with different droplet materials will make it possible to study the characteristics of the unstable rim. Our principal aim is to find the answer to the question what mechanisms lead to the fascinating phenomenon of splashing!

We gratefully acknowledge financial support provided by the German Science Foundation (DFG) within the scope of SPP 1423 and SFB-TRR 75.

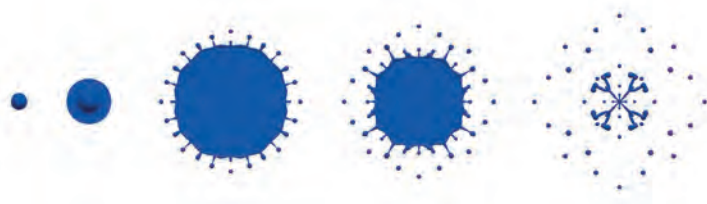


Fig. 1: Simulated evolution of a combined droplet splash resulted from head-on collision of two identical iso-propanol droplets.

References

1. C.W. Hirt and B.D. Nichols (1981), Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. *J. Comp. Phys.* 39(1): 201-225.
2. C. Focke and D. Bothe (2011), Computational analysis of binary collision of shear-thinning droplets, *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 166: 799-810.

Funding source
Grundaussstattung

In light of the complexity and diversity of current HPC platforms, programmers need to understand application execution behavior in order to identify performance bottlenecks and to support the compiler in generating efficient code. To this end, performance analysis tools use runtime measurements to provide information of the applications runtime behavior. Two established and widely used methods to gather such information are sampling or the instrumentation of the application. Each method has its advantages and disadvantages in terms of induced measurement overhead, measurement-control, data quality and the capability to map the data back to the source code.

Instrumentation is the modification of the application to induce measurement points, so called probes, in the application in order to gather the required information. The correlation to the source is implicit by the instrumentation location. These probes are either injected manually by the user, or automatically either by the compiler or a dedicated instrumentation tool. The runtime overhead for such an approach is composed of the overhead of all the probes (typically implemented by calls to a measurement library) and the frequency at which the individual probes are invoked at runtime. While the overhead of a single probe usually can be considered constant, the number of probe invocations is difficult to control when using current instrumentation technology. For example, C++ applications instrumented with current methods provided by tools like Scalasca or Vampir exhibit trillions of probe invocations during the applications runtime resulting in tremendous overheads (see Table). Summarizing, the conceptual overhead of instrumentation ($O_{instr.}$) can be expressed as a product of the probes overhead (O_{probe}) and the number of probe invocations ($n_{invoc.}$): $O_{instr.} = O_{probe} * n_{invoc.}$

Sampling typically denotes the statistical gathering of relevant data during an applications execution by programming hardware interrupts (event based sampling, e.g. timer or executed instructions). In order to map the information back to the code, sampling tools read the program counter and analyze the call stack and the binary to derive the precise context for the sample, i.e. call path and source location. While mapping the sample to the source code relies on the debug information of the binary and can be obtained offline, the unwinding of the call stack must be done at runtime, as the context is potentially lost after the sampling event. As the precise structure of the call stack, that is its depth and composition, is unknown a priori, the tool has to unwind the call stack back to a known location, such as the main function. This unwinding is complex and costly. Therefore, several optimizations are applied to reduce the cost of unwinding, e.g. caching the last-analyzed call stack state, adding markers to the call stack or unwinding only specific samples. However, the overhead of sampling remains dynamic and sample location dependent. Summarizing, the sampling overhead ($O_{sampler.}$) is expressed as the sum of all the overheads of all the different sample locations $O(loc.)$ times the number of samples taken at that location $n(loc.)$: $O_{sampler.} = \text{SUM}(O(loc.) * n(loc.))$

Using the Lichtenberg cluster, we evaluate and validate novel techniques to reduce incurred measurement overheads required for performance analysis whilst maintaining expressive data suitable for performance analysis.

Benchmark	Reference Runtime	Overhead
403.gcc	43,13 s	100,89%
429.mcf	266,72 s	61,48%
433.milc	495,16 s	13,35%
435.gromacs	594,15 s	7,97%
444.namd	499,42 s	7,49%
447.dealll	387,48 s	2087,03%
450.soplex	139,40 s	368,29%
453.povray	199,30 s	509,79%
456.hmmmer	376,98 s	1,01%
458.sjeng	608,30 s	83,82%
462.libquantum	447,46 s	3,31%
464.h264ref	77,22 s	98,96%
470.lbm	458,81 s	0,19%
473.astar	156,48 s	193,13%
482.sphinx3	658,38 s	11,98%
DROPS	1,30 s	3195,75%

Preference Based Reinforcement Learning

C. Wirth, J. Fürnkranz

Fachgebiet Knowledge Engineering, TU Darmstadt

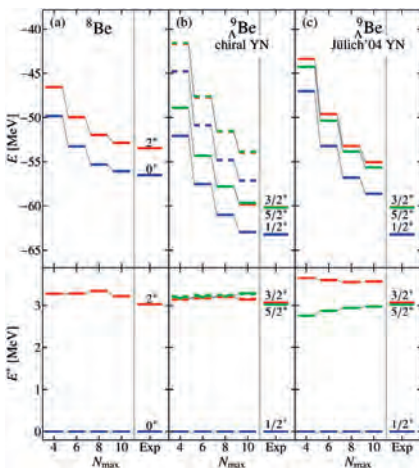
Funding source
DFG

Reinforcement Learning¹ is a common approach for solving sequential decision problems. The basic idea is to view a problem as a series of decisions that have to be performed with the goal to find a policy for the decision making process which leads to the best possible outcome. Most algorithms are utilizing numeric feedback over the performed decisions, but this hard to define or even unavailable in some domains. Hence, we are relaxing this assumption by learning from pairwise comparisons of two different decision sequences. As example, consider a medical treatment scenario, where it is hard to define a value for the death of a patient. But it is easily possible to determine that all sequences where a patient survives are preferred over deadly ones.

One testing domain for the algorithms is chess,^{2,3} where large scale annotated databases are available. Those annotations are describing a qualitative evaluation of states or actions, based on an experts opinion. They are relative, because different annotators may evaluate the same state differently. Hence, it is reasonable to use this information in a pairwise manner by defining preferences based on the qualitative annotations. This means

states or actions with a good evaluation are preferred over bad ones. This is then used to calculate a numerical evaluation function for states. A high computational budget is required for solving the problem, because of the high amount of data required for computing a good solution. As a first step, this enabled research in a setting where batch data is widely available and we showed how to compute a policy for solving the sequential decision problem based on this.

In a second phase, this work was extended to the case where sequences and their evaluation are not readily available, but where it is required to propose new sequences and request a pairwise evaluation from an expert. This is a more difficult setting, because it is unknown which kind of sequences are most beneficial for the learning process. But this is also a more practical setting as it is possible to reduce the amount of required preference, and therefore the workload for the expert, by an intelligent sequence creation algorithm. Those algorithms, as well as the learning algorithm itself, are usually subject to a high amount of parameters which have to be tuned. This means a high amount of experiments is required for evaluating new approaches.



This is still ongoing work and several approaches^{4,5} have been proposed for solving the aforementioned problem. A preliminary survey was also created to show the current state of research.⁶ In the future, we are planning to improve the theoretical foundation of this domain and to continue the development of new algorithms. Additionally, we are also trying to find a fast, generic search algorithm for the parameter tuning problem, because this will ease the application of those algorithms. Comparable research in this area was carried out by Sebag et al.⁷

References

1. R.S. Sutton and A. Barto (1998), Reinforcement Learning: An Introduction, MIT Press.
2. C. Wirth and J. Fürnkranz (2012), First Steps Towards Learning from Game Annotations. In: Workshop Proceedings - Preference Learning: Problems and Applications in AI at ECAI 2012, Montpellier: 53-58.
3. C. Wirth and J. Fürnkranz (in press), On Learning from Game Annotations (2015). In: IEEE Transactions on Computational Intelligence and AI in Games.
4. C. Wirth and J. Fürnkranz (2013), A Policy Iteration Algorithm for Learning from Preference-based Feedback, in: Advances in Intelligent Data Analysis XII: 12th International Symposium (IDA-13), Springer.
5. C. Wirth and J. Fürnkranz (2013), EPMC: Every Visit Preference Monte Carlo for Reinforcement Learning, in: Proceedings of the 5th Asian Conference on Machine Learning, (ACML-13): 483-497, JMLR.org.
6. C. Wirth and J. Fürnkranz (2013), Preference-Based Reinforcement Learning: A Preliminary Survey, in: Proceedings of the ECML/PKDD-13 Workshop on Reinforcement Learning from Generalized Feedback: Beyond Numeric Rewards.
7. R. Akrou, M. Schoenauer, and M. Sebag (2011), Preference-Based Policy Learning, in: Proceedings of the European Conference on Machine Learning and Knowledge Discovery in Databases (ECML-PKDD-11): 12-27, Springer.

Serial Hashtag Activism: An Ethnographic Embedment of Big Data

M.T. Bastos, M. Faßler

Institut für Kulturanthropologie und Europäische Ethnologie, Goethe-Universität Frankfurt

In this investigation we describe a population of politically-charged social media users we call serial activists. We mined 20M tweets related to nearly 200 instances of political protest between 2009 and 2013 and identified a network of users tweeting across geographically distant protest hashtags. We resorted to statistical disambiguation to describe the characteristics of this group, which have an ordinary following but bridge disparate language communities and facilitate collective action by virtue of their dedication to a cause. After exploring how serial activists deviate from traditional forms of political activism, we report on a series of in-depth, semi-structured interviews held with 21 such activists. The material was thematically-coded to provide a typology of serial activists and their struggles with institutionalized power, political activism, and social media in the context of political turmoil. This research provides a bridge to the qualitative-quantitative gap in the social sciences by resorting to an ethnographic embedment of big data observations in the lifeworld of political activists.

Funding source

NSF, FAPESP,
USDA

References

- Bastos, M. T., & Mercea, D. (in press). Serial Activists: Political Twitter beyond Influentials and the Twittertariat. *New Media & Society*.
- Bastos, M. T., Mercea, D., & Charpentier, A. (2015). Tents, Tweets, and Events: The Interplay Between Ongoing Protests and Social Media. *Journal of Communication*, 65(2), 320-350.
- Bastos, M. T., Recuero, R., & Zago, G. (2014). Taking tweets to the streets: A spatial analysis of the Vinegar Protests in Brazil. *First Monday*, 19(3).

Thermocapillary Droplet Actuation on a Wall

A. Fath, D. Bothe

Fachgebiet Mathematische Modellierung und Analysis, TU Darmstadt

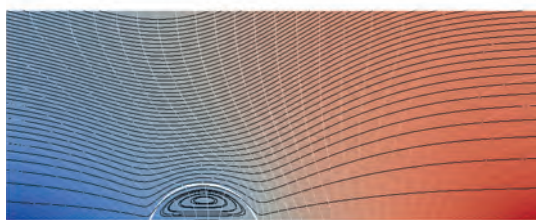
Funding source
GSCE
TU Darmstadt

Multiphase flows are present in many applications of industrial relevance. In addition, they are mostly accompanied by a multitude of physical phenomena. The capturing and accurate representation of these physical mechanisms can be achieved by Direct Numerical Simulations (DNS), where all relevant physical time and length scales are resolved. Focusing on the correct mathematical and numerical formulation of the physical laws allows to gain a better understanding and complements theoretical as well as experimental results. The focus of the present work lies on the correct numerical description of fluid motions due to thermocapillary Marangoni stresses. Marangoni stresses at the interface occur in free boundary flows in the presence of surface tension gradients. If the non-uniformity of surface tension is caused by interface temperature gradients, the Marangoni-driven flow is referred to as thermocapillary flow. Over the last years droplet actuation is attracting widespread attention because of its promising potential in droplet-based devices developed for various applications in industry. One way to actuate a droplet is to apply a thermal gradient along the solid wall to which it is attached.

In order to perform highly resolved Direct Numerical Simulations of multiphase/-physics systems, we employ the Finite Volume Code Free Surface 3D (FS3D).²

Fig. 1: Thermal droplet migration.

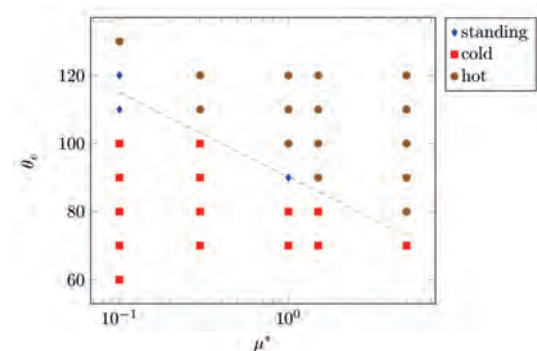
a.) Migrating droplet $\theta_e = 70$



This code framework is expanded to handle dynamic contact angles based on (Afkhami et al. and Schwieder).^{1,3} To simulate thermal droplet actuation a droplet is placed on an unevenly heated surface. One can distinguish three motion regimes: motion towards the cold side, the hot side, or no motion at all. The capturing of this phenomenon is quite new and has only been stated recently in (Sui)⁴. Figure 1a shows such a droplet on a heated wall moving towards the cold side. The black lines indicate the streamlines, the coloured lines are isothermal curves, and the white line represents the droplet surface. Figure 1b shows the regime map for such a droplet for different contact angles and different viscosity ratios between the outer and the inner fluid (the outer fluid was changed). As visible in Fig. 1b the droplet is not moving if the outer and inner viscosities are the same and the contact angle is 90° . For larger contact angles the droplet moves towards the hot side; for smaller angles the droplet moves towards the cold side. The dashed line shows how the stagnant regime changes with the viscosity ratio.

Due to the relevance of micro devices, thermal droplet migration is an ongoing research topic. Future work will also include the implementation of hysteresis in FS3D which will allow a more accurate capturing of the droplet motion in the non-moving regime.

b.) Regime map



References

1. S. Afkhami, S. Zaleski, and M. Bussmann (2009), A mesh-dependent model for applying dynamic contact angles to VOF simulations. *Journal of Computational Physics*, 228(15): 5370–5389.
2. M. Rieber (2004), PhD thesis: Numerische Modellierung der Dynamik freier Grenzflächen in Zweiphasenströmungen. ITLR University Stuttgart.
3. M. Schwieder (2014), Master thesis: Implementation and Study of a Dynamic Contact Angle Model with the Flow Solver FS3D. Technische Universität Darmstadt.
4. Y. Sui (2014), Moving towards the cold region or the hot region? Thermocapillary migration of a droplet attached on a horizontal substrate. *Physics of Fluids* (1994-present), 26(9):092102.

Untersuchungen zu PGAS-Systemen: Programmierbarkeit, Synchronisation, Taskpools und Fehlertoleranz

J. Breitbart, M. Bungart, J. Posner, C. Fohry

Fachbereich Elektrotechnik und Informatik, Universität Kassel

Die Verbreitung und zunehmende Größe von Parallelrechnern stellt die parallele Programmierung vor neue Herausforderungen, zu denen neben Geschwindigkeit und Skalierbarkeit auch die Steigerung der Produktivität der Programmierung sowie die Reaktion auf Hardwarefehler gehören. Innovative parallele Programmiersysteme setzen unter anderem auf das Konzept des Partitioned Global Address Space, bei dem alle Daten in einem gemeinsamen Adressraum untergebracht sind und der Programmierer dennoch zwischen schnellen lokalen und zeitaufwändigeren entfernten Zugriffen unterscheiden kann. In diesem Kontext wurden mehrere Arbeiten durchgeführt und folgende Ergebnisse erzielt:

- Konzeption des Partitioned Single Assignment Memory (PSAM) Modells: Im Mittelpunkt steht ein Synchronisationskonzept, das auf der Weitergabe von Datenpaketen nach Abschluss ihrer Berechnung basiert. Das Modell wurde prototypisch implementiert und an Beispielprogrammen getestet.
- Bewertung und Vergleich der PGAS-Sprachen Chapel und X10 anhand von Erfahrungen bei der Implementierung von Taskpools und dem Unbalanced Tree Search (UTS) Benchmark: Im Vordergrund stand die Untersuchung von Taskparallelität und des Zusammenspiels zwischen Objektorientierung und Parallelität/Verteilung. So wurden Varianten der Realisierung von Objekten, die intern verteilte Arrays enthalten, betrachtet und der Einsatz von Records mit dem von Objekten verglichen. Außerdem wurden Verbesserungsvorschläge für einzelne Sprachkonstrukte erarbeitet

(z. B. Reduktion, knoten- und aktivitätsintern verwaltete Daten). Die entwickelten Programme wurden getestet und Laufzeitmessungen mit mehreren Knoten durchgeführt.

- Entwicklung eines fehlertoleranten Frameworks für globale Lastenbalancierung: In dieser Arbeit wurde das Global Load Balancing (GLB) Framework der Sprache X10 um Fehlertoleranz erweitert. GLB ergänzt die knotenintern verwalteten Aktivitäten der Sprache um global verschiebbare Tasks, die aufwändiger zu spezifizieren sind. Ausgangspunkt unserer Arbeit war die relativ neue Sprachausprägung Resilient X10, bei der im Falle eines permanenten Knotenausfalls eine Ausnahme ausgelöst wird, die vom Programm abgefangen werden kann. GLB verwendet für seinen Taskpool ein kooperatives Workstealing-Schema, bei dem arbeitslose Aktivitäten zunächst zufällige Stehlversuche unternehmen und später vordefinierte Partner kontaktieren, welche ein geeignetes Netzwerk bilden. Fehlertoleranz wird durch regelmäßig erstellte Sicherungskopien erreicht, die auch während eines Stehvorgangs konsistent gehalten werden müssen. Dazu wurde ein konservatives Protokoll entwickelt und seine Korrektheit nachgewiesen. Tests und Laufzeitmessungen wurden mit UTS und dem Betweenness Centrality (BC) Benchmark durchgeführt.

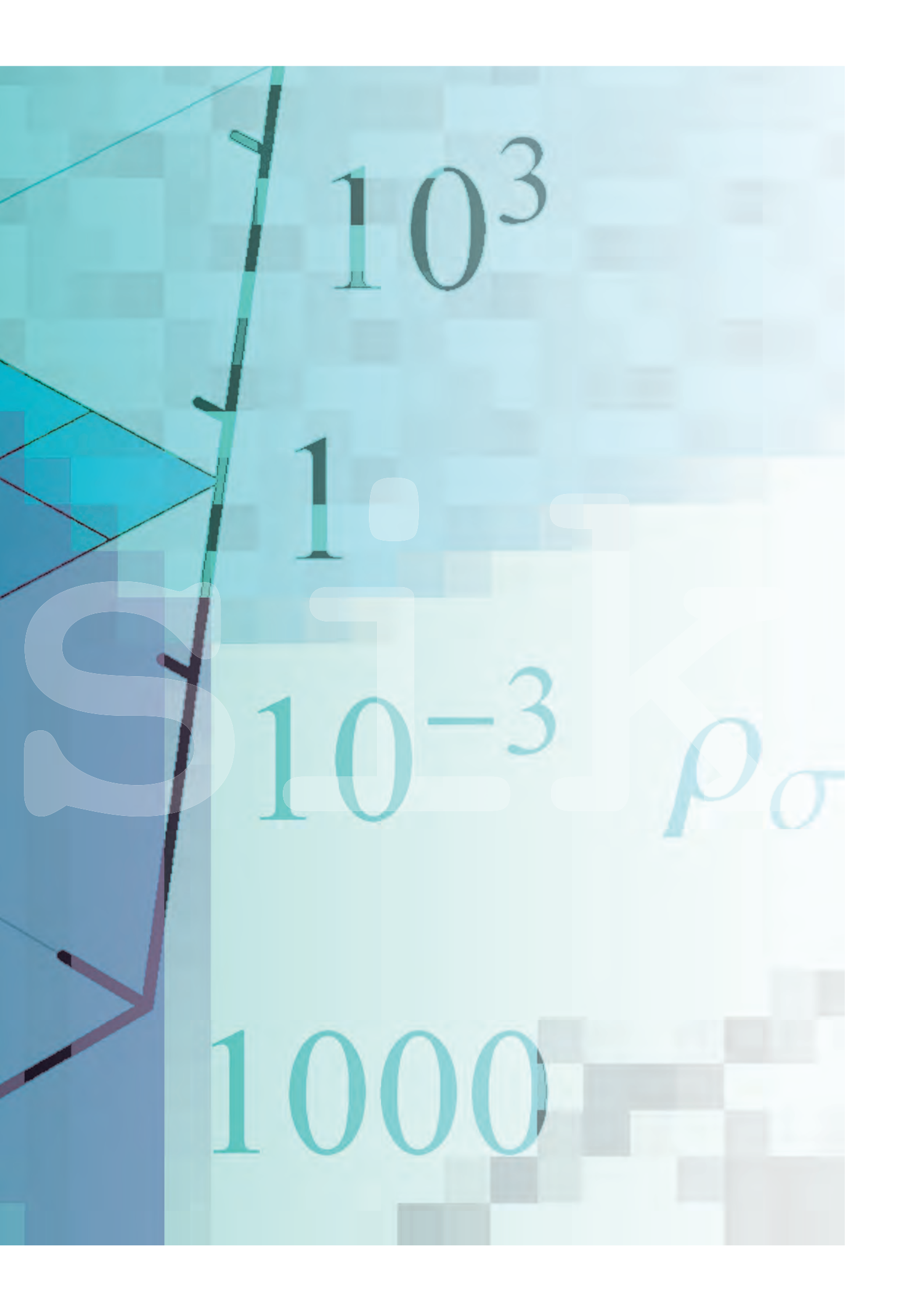
Für die Zukunft sind Arbeiten zur Erhöhung der Effizienz, Robustheit und Flexibilität des fehlertoleranten GLB-Frameworks geplant, außerdem zu Ressourcen-Elastizität, also dem durch Elastic X10 unterstützten Hinzufügen von Knoten während der Laufzeit, sowie zur Implementierung eines GLB-ähnlichen Frameworks in Chapel.

Literatur

- J. Breitbart (2012), Dataflow-like synchronization in a PGAS programming model, Proc. IEEE Int. Parallel and Distributed Processing Symposium Workshops (IPDPSW), Shanghai, China.
- J. Breitbart (2012), Programming models for next generation HPC systems, Euro-Par Workshop on UnConventional High Performance Computing (UCHPC), Rhodes Island, Greece, Eingeladener Vortrag.
- J. Breitbart (2013), A dataflow-like programming model for future hybrid clusters, Int. Journal of Networking and Computing 3(1): 15-36.
- J. Breitbart (2013), Dissertation: Programming Models for Next Generation HPC Systems, Universität Kassel.
- C. Fohry und J. Breitbart (2014), Experiences with Implementing Task Pools in Chapel and X10, Proc. Int. Conf. on Parallel Processing and Applied Mathematics (PPAM 2013), Part II, Springer LNCS 8385, 75–85.
- C. Fohry und J. Breitbart (2014), User Experiences with a Chapel Implementation of UTS; Chapel Implementers and Users Workshop.
- J. Posner (2014), Bachelor thesis: Fehlertolerante Taskpools in der parallelen Programmiersprache X10, Universität Kassel.
- M. Bungart, C. Fohry und J. Posner (erscheint demnächst), Fault-Tolerant Global Load Balancing in X10; Proc. SYNASC2014 Workshop on HPC research services.

Physik

phny



Ab-initio Description of p-shell Hypernuclei

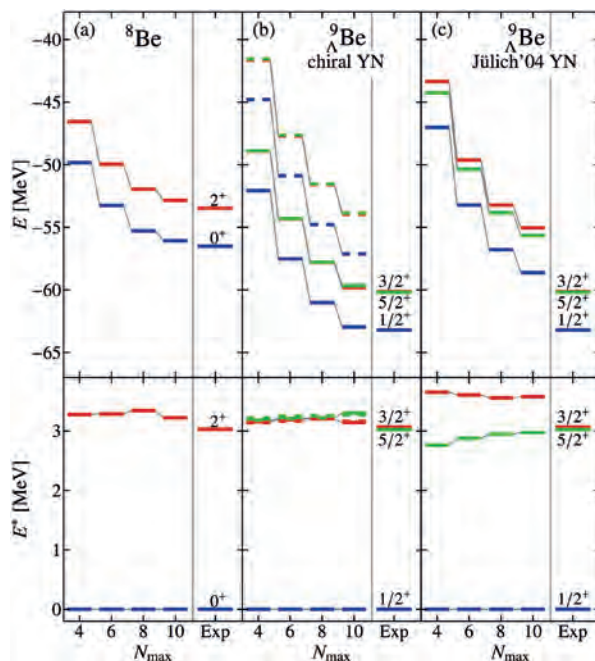
R. Wirth, R. Roth

Fachgebiet Theoretische Kernphysik, TU Darmstadt

Funding source
HIC4FAIR,
SFB 634, BMBF

Hypernuclei are atomic nuclei that contain other baryons apart from nucleons (protons and neutrons). These other baryons, called hyperons, contain Strange quarks, the third-lightest quark flavor, in addition to light up and down quarks. Hypernuclei have been produced in accelerator experiments for over 50 years and despite their very short lifetimes lots of data on their properties have been collected¹. Another site where hyperons and hypernuclei are believed to exist are neutron stars. Hence, understanding the interactions of hyperons among each other and with nucleons is crucial for the understanding of these stellar objects. Additionally, hyperon-nucleon interactions provide a generalization of nucleon-nucleon interactions that can be used to test models of these forces and explore the symmetries that link the models back to Quantum Chromodynamics (QCD), the theory of the strong force that binds nuclei and the baryons themselves. In order to really test our understanding of these forces, we need calculations of hypernuclei whose results we can compare to experimental data. The method for solving this many-body problem should make no assumptions on the structure of the hypernucleus, so that the results only depend on the interaction models used in the calculation. The class

of many-body methods that fulfills this requirement is the class of ab initio methods and, until recently, these methods were applicable to systems of five or less baryons, limiting the accessible range to only a handful of hypernuclei. Our group has developed a computer code that uses the Importance-Truncated No-Core Shell Model (IT-NCSM) to solve the hypernuclear many-body problem allowing us to calculate systems consisting of up to approx. 16 baryons and thus dramatically increasing the number of accessible hypernuclei². With this code we did calculations for a small set of hypernuclei and we can demonstrate that different models of the hyperon-nucleon interaction give very different results when applied to many-body systems, although they fit the data from the two-body system equally well. As an example we show in fig. 1 the ground-state energy and spectrum of $\Lambda^9\text{Be}$ calculated with a modern interaction resulting from a systematic expansion based on the symmetries of QCD (chiral YN) and with a modern meson-exchange interaction (Jülich'04). The chiral interaction predicts the excited-state doublet to be almost degenerate, while the Jülich'04 predicts a very large splitting. Also, depending on the interaction, the predicted ground-state energies range from slightly too low to slightly too high. These discrepancies originate in the hyperon-nucleon interaction, they do not stem from the nucleonic part because the parent nucleus (the nucleus that one gets after removing the hyperon from the system) is reproduced well by the interactions we employ. In conclusion, our calculations provide additional constraints that are vital to further the understanding of baryon-baryon interactions.



In the near future we will extend our calculations to a survey of hypernuclei throughout the applicable range. We also plan to extend the code so it can include hyperon-nucleon-nucleon three-body terms that either arise naturally during the expansion of the interaction or are induced by the procedure we employ to improve convergence of the many-body calculation.

References

1. D.H. Davis (2005), Nuclear Physics A 754, 3–13. doi:10.1016/j.nuclphysa.2005.01.002.
2. R. Wirth et al. (2014), Physical Review Letters 113, 192502. doi:10.1103/PhysRevLett.113.192502.

Zinnoxide mit verschiedenen Zusammensetzungen: Auf dem Weg zum elektronischen Bauelement Zinn ist ein ungiftiges Schwermetall, das schon seit über 5.000 Jahren vom Menschen gefördert, verarbeitet und für Bronzelegierungen verwendet wird. In der Natur kommt Zinn meistens als Zinndioxid (SnO_2) vor, das heutzutage vielseitig eingesetzt wird: Für Gassensoren, als Katalysatormaterial, als transparenter Halbleiter in Flüssigkristalldisplays (LCDs), aber auch als Polier- und Versiegelungsmittel. In der Grundlagenforschung sind die Eigenschaften von Zinndioxid sowohl theoretisch als auch experimentell bereits gut untersucht.

Allerdings bildet Zinn auch ein Monoxid (SnO), das deutlich andere elektronische Eigenschaften hat als das Dioxid. In Kombination sind das Monoxid und das Dioxid interessant für zusammengesetzte Halbleiterbauelemente wie zum Beispiel Dioden, die womöglich einfacher zu fertigen sind als Bauelemente mit mehreren verschiedenen Materialien. Vor allem aber werden im Moment noch viele seltene oder umweltschädliche Materialien für Halbleiteranwendungen benutzt, so dass der Einsatz von unbedenklichen und auf der Erde häufigen Materialsystemen wie den Zinnoxiden deutliche ökonomische und ökologische Fortschritte verspricht.

Darüber hinaus gibt es noch weitere Oxidphasen mit anderen Zusammensetzungen, wie beispielsweise Sn_2O_3 oder Sn_3O_4 . Diese Phasen entstehen, wenn Zinnmonoxid erhitzt wird, aber womöglich können sie auch gezielt hergestellt werden.

Die Eigenschaften des Monoxids und insbesondere die der Zwischenphasen sind allerdings noch nicht so gut erforscht wie die des Dioxids, deshalb untersuchen wir diese Materialien in unserem Zinnoxid-Projekt mithilfe theoretischer Rechnungen und Simulationen in enger Zusammenarbeit mit experimentell arbeitenden Gruppen.

Für die Zwischenphasen muss zunächst geklärt werden, welche Stöchiometrie vorliegt. In Frage kommen Zusammensetzungen mit 40 bzw. 43 Atomprozent Zinn (Sn_2O_3 bzw. Sn_3O_4), für die dann noch die genaue Kristallstruktur geklärt werden muss. Dazu haben wir Rechnungen mit einem sogenannten Evolutionsalgorithmus durchgeführt. Dabei werden Kristallstrukturen modifiziert und miteinander vermischt, danach wird festgestellt, ob die neu entstandenen Strukturen energetisch stabiler sind, und anschließend beginnt der Zyklus mit den jeweils stabilsten Strukturen von neuem - also ganz analog zur Evolution in der Biologie.

Für alle Zinnoxide haben wir dann Berechnungen zur elektronischen Struktur durchgeführt (Zustandsdichten, Bandstrukturen), außerdem auch Rechnungen zu optischen Eigenschaften (Raman-Streuung). Diese Ergebnisse werden jetzt mit den experimentellen Befunden verglichen, um zu klären, welche Phasen im Experiment unter welchen Bedingungen vorliegen und wie man ihre Eigenschaften gezielt verändern kann.

Darüberhinaus untersuchen wir auch die Veränderung der elektronischen und optischen Eigenschaften der Zinnoxide unter Einwirkung von äußerem Druck und Verspannungen, weil diese Parameter neben Dotierungen eine Möglichkeit darstellen, Materialeigenschaften gezielt so zu verändern, wie sie für Anwendungen benötigt werden.

Für 2015 sind mehrere Veröffentlichungen zu den Ergebnissen unserer Arbeit an den Zinnoxiden geplant.

Literatur

- M. Batzill and U. Diebold (2005), Prog. Surf. Sci. 79: 47.

ALICE Experiment - The Search for Signatures of the Quark-Gluon Plasma

R. Bailhache, C. Baumann, J. Book, I. Erdemir, S. Heckel, P. Huhn, C. Klein, M. Köhler, P. Lüttig, M. Marquard, M. Özdemir, P. Reichelt, S. Schuchmann, B. Schütz, H. Appelshäuser
Institut für Kernphysik, Goethe Universität Frankfurt

Funding source
BMBF, HGF

The group participates in the ALICE experiment at the Large Hadron Collider (LHC) at CERN. The research activities focus mainly on the search for signatures of the quark-gluon plasma (QGP), a state of matter in which quarks and gluons, the elementary constituents of hadronic matter, can be regarded as quasi-free particles. Measuring the properties of the QGP does not only extend our understanding of these elementary particles and their interactions, but also provides important input for cosmological models, as the QGP is believed to have existed during the early stage of the universe.

For the understanding of the QGP produced in heavy-ion collisions studying small systems like the collisions of two protons (pp) where no QGP is present constitutes an important baseline experiment.

We employ the Loewe-CSC cluster resources to analyse aggregated data, test new analysis software and, most of all, run simulations with high statistics. Two Bachelor students, two Master students, eight Ph.D. students and two Postdocs from the group are working on the cluster.

Due to the large size of data samples recorded by ALICE and other LHC experiments, most of the analysis activities are run distributed on the LHC-Grid. The Loewe-CSC is part of this worldwide computing grid. It also provides the possibility to test the analysis software locally on subsamples of the data on short time scales, which is crucial for large-scale analyses.

In the following, selected analyses using the Loewe-CSC resources will be explained.

A possible QGP signature studied in both pp and heavy-ion collisions is the fluctuation of the mean transverse momentum from event to event. For these analyses, several simulations of 100 million pp events each have been performed at the Loewe-CSC. Two simulations have been used for comparison to ALICE data in (Abelev et al.)¹. Recently, further simulations have been performed within a bachelor thesis.²

The measurement of the transverse momentum spectrum of charged particles measured in p-Pb collisions adds complementary information to the same measured observable in Pb-Pb collisions. By comparing these spectra in p-Pb and Pb-Pb collisions to spectra measured in pp collisions, especially at high transverse momenta, potential collective effects can be disentangled from the underlying particle production described by perturbative calculations. The Loewe-CSC has been used to simulate charged-particle spectra under the condition that the Electromagnetic Calorimeter (EMCal) of ALICE has selected events based on the deposited energy in the EMCal. The extension of inclusive charged-particle spectra to high transverse momenta and their possible modification based on such a selection have been studied within a bachelor thesis using these simulations.³

The ALICE experiment is preparing for a major detector upgrade for the future LHC run 3 that is expected to start in 2020. Extensive feasibility studies on the main physics goals have been performed to motivate and strengthen the need for this upgrade.⁴ The simulations for this upgrade for the measurement of low-mass dielectrons have exclusively been run at the Loewe-CSC. Using the planned detector upgrades for the ALICE Inner Tracking System ITS and the ALICE Time Projection Chamber, 20 million pp events including realistic detector response were simulated for three different magnetic field settings at the Loewe-CSC. Based on the analysis of these simulated events it was concluded that the temperature of the QGP becomes in reach to be extracted using the measurement of dileptons after the ITS upgrade. The results of these simulations entered the technical design report of the upgraded ITS⁵ and a master thesis⁶ is based on this analysis.

In the next years the group plans to use the Loewe-CSC to calculate contributions from particle decays to the invariant mass spectrum of dileptons (cocktail calculation). Furthermore, it is planned to intensify the study to evaluate the impact of EMCal triggers on the inclusive charged-particle spectra to extract a trigger efficiency.

References

1. B. Abelev et al. (2014), (ALICE Collaboration), Event-by-event mean pT fluctuations in pp and Pb-Pb collisions at the LHC, Eur. Phys.J. C74, 3077.
2. B. Schütz (2014), Bachelor thesis: Monte-Carlo-Studien zum Einfluss von Multi-Parton-Interaktionen auf die Fluktuationen des mittleren Transversalimpulses in pp-Kollisionen, Institut für Kernphysik, Goethe-Universität, Frankfurt.
3. P. Huhn (2015), Bachelor thesis: Studie zur Triggereffizienz geladener Teilchen in ALICE, Institut für Kernphysik, Goethe-Universität, Frankfurt.
4. B. Abelev et al. (2012), (ALICE Collaboration), Upgrade of the ALICE Experiment Letter of Intent, CERN-LHCC-2012-012 / LHCC-I-022.
5. B. Abelev et al. (2014), (ALICE Collaboration), Technical Design Report for the Upgrade of the ALICE Inner Tracking System, J. Phys. G 41, 087002.
6. C. Klein (2014), Master thesis: Studie zum Einfluss der Teilchenidentifizierung mit dem ALICE-ITS auf die Messung von Dileptonen kleiner invarianter Masse, Institut für Kernphysik, Goethe-Universität, Frankfurt.

— Advanced Electro-Optical Modeling of III-Nitride Light Emitters

A. Shedbalkar, B. Witzigmann

Fachgebiet Theorie der Elektronik und Photonik, Universität Kassel

Funding source

DFG

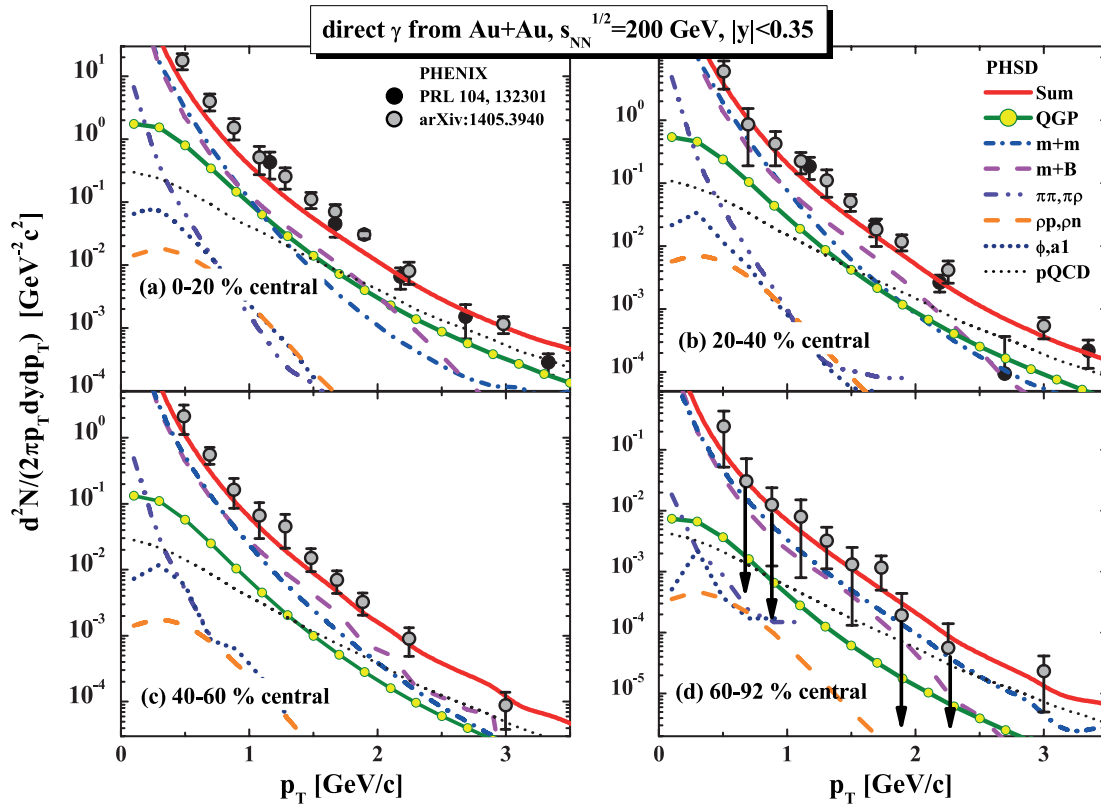
As part of the research group POLARCON, we intend to study the active region carrier dynamics in III-nitride light emitting devices using quantum-mechanical non-equilibrium models, such as an empirical scattering theory or the non-equilibrium Green's function method (NEGF). This method is applied to the analysis of active regions for III-nitride light emitters with different crystal orientations for the first time. It will overcome the limits of present simulation methods, such as lack of tunneling currents and thermally activated currents from non-equilibrium carrier distributions in the presence of radiative and non-radiative recombination. Using this model, we plan to improve the understanding of lasers and light emitting diodes (LEDs) for polar, semi-polar and non-polar configurations, in particular electro-optical efficiencies and threshold current densities.

Reference

- B. Witzigmann (invited), Non-Equilibrium Green's Functions for Optoelectronics, CECAM workshop on empirical methods in semiconductor nano-structures design and modelling, June 21-25 2010, Manchester, UK.

In our work,¹ the photons produced by partonic interactions in the quark-gluon plasma phase was found to have small elliptic flow v_2 , because they are dominated by the emission in the initial phase before the elliptic flow fully develops. On the other hand, our calculations reproduced the recent puzzling measurement of the PHENIX Collaboration that the v_2 of photons at $p_T < 3$ GeV is almost as large as the v_2 of the pions (which decouple only in the late stage). We attribute the strong v_2 of thermal photons to hadronic channels, i.e. to mesonic and baryonic binary reactions. In order to clarify the channel decomposition of the direct photon spectra, we investigated the centrality dependence of the thermal photon yield in (Linnyk et al.)² and predicted it to scale as the number of participating nucleons N_{part}

in the power approx $a=1.5$. Our prediction turned out to be in a very good agreement with the most recent estimate of $a=1.48 \pm 0.08 \pm 0.04$ by the PHENIX Collaboration, see the figure for the explicit comparison to the data. For the description of the collision evolution we use the covariant off-shell transport parton-hadron-string dynamics (PHSD).³ The degrees of freedom in the partonic and hadronic phases are the strongly interacting dynamical quasi-particles and off-shell hadrons, respectively. Within the PHSD one solves off-shell transport equations on the basis of the gradient expansion of the Kadanoff-Baym equations for effective Green's functions in phase-space representation for quarks, antiquarks and gluons as well as for the hadrons and their excited states.



References

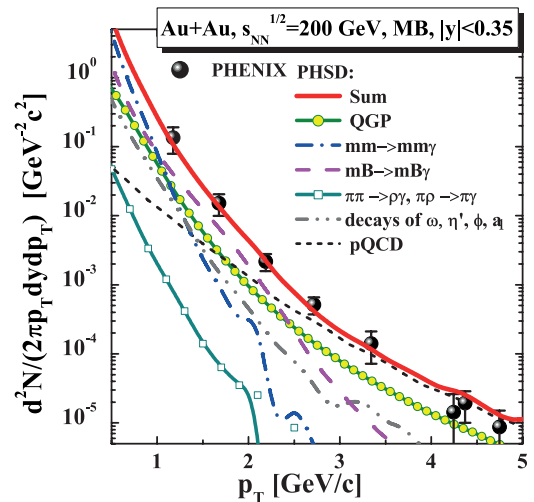
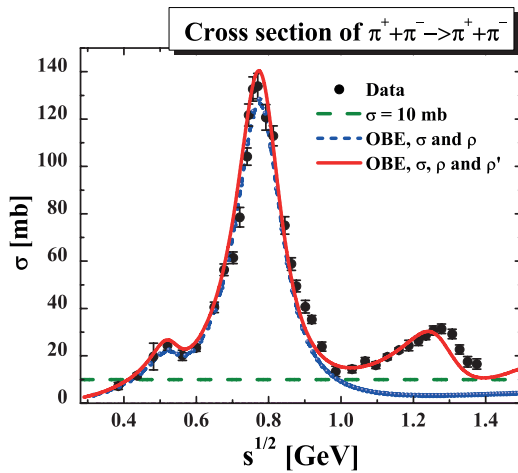
1. O. Linnyk, V.P. Konchakovski, W. Cassing, and E.L. Bratkovskaya (2013), Phys. Rev. C 88, 034904.
2. O. Linnyk, W. Cassing, and E.L. Bratkovskaya (2014), Phys. Rev. C 89, 034908.
3. W. Cassing and E.L. Bratkovskaya (2009), Nucl. Phys. A 831, 215.

O. Linnyk, E.L. Bratkovskaya, W. Cassing

Institut für Theoretische Physik, JLU Gießen und Goethe-Universität Frankfurt

Our ultimate goal is to understand the dynamical properties of the partonic phase with quarks, antiquarks and gluons as dynamical degrees of freedom (strongly-interacting QGP) and the phase transition to an interacting hadronic system that is colorless and confined. During 2012-2014 we focused on studying how the phase transition and the properties of the QGP are reflected in the emission of photons. We have investigated^{1,2} the transverse momentum spectrum and the elliptic flow v_2 of photons produced in Au+Au collisions at relativistic energies. The photons of low transverse momentum ($p_T < 3$ GeV) are of special interest, because they have been expected to originate dominantly from the thermal sources, i.e. the radiation from the strongly interacting Quark-Gluon-Plasma (QGP) and the thermalized hadronic matter. Microscopic description of the collision evolution was done using the covariant off-shell transport parton-hadron-string dynamics (PHSD), which has been developed by W. Cassing and collaborators.³⁻⁵

Our calculations^{1,2} reproduced the transverse momentum spectrum of the photon as measured by the PHENIX Collaboration at the Relativistic-Heavy-Ion-Collider (RHIC). We have shown that the QGP channels constitute about a half of the observed direct photon spectrum, with the rest coming from the secondary meson and baryon interactions. In particular the contribution of the bremsstrahlung in the meson+meson elastic scattering turned out to be important. Therefore, we have improved the modeling of this channel by going beyond the soft photon approximation, which has been used in the transport approached up to now. We calculated the process $m+m \rightarrow \gamma+m+m$ in the oneboson-exchange model with the effective Lagrangian fitted to the pion+pion scattering data (see left figure) and implemented the obtained cross sections into the PHSD. The resulting comparison to the PHENIX measurements is shown in the right figure.



References

1. O. Linnyk, E. Bratkovskaya, W. Cassing, V. Konchakovski, and V. Ozvenchuk (2014), EPJ Web Conf. 66, 04005
2. O. Linnyk, V.P. Konchakovski, W. Cassing, and E.L. Bratkovskaya (2013), Phys. Rev. C 88, 034904.
3. W. Cassing and E.L. Bratkovskaya (2009), Nucl.Phys. A831, 215.
4. E.L. Bratkovskaya, W. Cassing, V.P. Konchakovski, and O. Linnyk (2011), Nucl.Phys. A856, 162.
5. W. Cassing and S. Juchem (2000), Nucl. Phys. A 665, 377; (2000); 672, 417.

Funding source
Helmholtz-
Nachwuchsgruppe

In heavy ion collisions at lower beam energies the QCD phase diagram is probed at high net baryon densities. To gain insights about the equation of state of strongly interacting matter and the transport properties of the newly produced state of matter, the quark gluon plasma, sophisticated dynamical models are needed. In this work a hybrid approach based on ideal relativistic fluid dynamics for the hot and dense stage and hadronic transport for the initial and final non-equilibrium stage is used to explore flow observables in a wide range of beam energies, that has been recently investigated experimentally in the beam energy scan program at the Relativistic Heavy Ion Collider at Brookhaven National Laboratory. This kind of dynamical simulations requires high performance computing since event by event calculations are essential to compare to experimental data in a realistic fashion.

Anisotropic flow can be quantified by the Fourier coefficients of the azimuthal distribution of the produced particles and is particularly sensitive to the transport properties, such as the shear viscosity, of the produced system. At high collision energies it has been one of the main signals indicating that the quark gluon plasma behaves as a perfect liquid. Therefore, it was rather surprising that the amount of elliptic flow is rather insensitive to a change in beam energy. Our calculations (see Fig. 1) show that v_2 produced by hydrodynamics is considerably diminished at lower collision energies, but this decrease is partially compensated by the transport dynamics^{1,2}. The pre-hydrodynamics transport phase is of particular importance for understanding the collision energy evolution, while the hadronic rescatterings after the hydrodynamical phase contribute more systematically $\sim 10\%$ to the total flow at all energies.

References

1. J. Auvinen and H. Petersen (2013), Collision Energy Evolution of Elliptic and Triangular Flow in a Hybrid Model, PoS CPOD 2013, 034.
2. J. Auvinen and H. Petersen (2013), Evolution of elliptic and triangular flow as a function of collision energy in a hybrid model, Phys. Rev. C 88, 064908.
3. J. Steinheimer, J. Auvinen, H. Petersen, M Bleicher, and H. Stöcker (2014), Examination of directed flow as a signal for a phase transition in relativistic nuclear collisions, Phys. Rev. C 89, 054913.
4. J. Auvinen, J. Steinheimer, and H. Petersen (2014), What the collective flow excitation function can tell about the quark-gluon plasma, Nucl. Phys. A 931, 975.

Recent STAR data from the RHIC beam energy scan show that the slope of the net-proton directed flow v_1 near midrapidity changes sign twice within the investigated collision energy range which has been predicted by earlier fluid calculations to be a signal of a first-order phase transition between hadronic matter and quark-gluon plasma. We examine the sensitivity of the directed flow v_1 to the order of the phase transition by comparing hybrid simulations with a first-order phase transition „Bag model“ equation of state (EoS) to calculations with a chiral model EoS, which has a cross-over phase transition. As can be seen in Fig. 2 the two EoS are completely indistinguishable in the hybrid simulations, questioning the usability of v_1 as a signal of the first-order phase transition^{3,4}. However, the hybrid model results also deviate notably from experimental data, which makes further studies on the topic necessary.

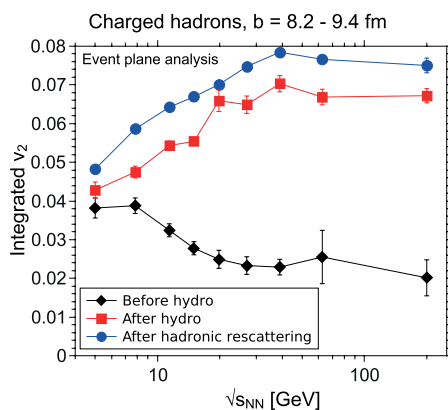


Fig. 1: Magnitude of v_2 in midcentral collisions at the beginning of hydrodynamical evolution (diamonds), immediately after the end of hydrodynamics phase (squares) and after the full simulation (circles).

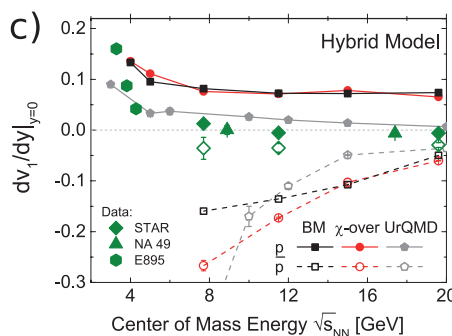


Fig. 2: v_1 slope at midrapidity for protons (solid symbols) and anti-protons (open symbols) for impact parameter range, extracted from the hybrid model calculations with a first order (black) and crossover EoS (red). Results are compared with the UrQMD model calculations (grey) and experimental data from STAR, NA49 and E895 collaborations (green).

Effektives Potential für ultrakurzpulslaser angeregtes Silizium

B. Bauerhenne, E.S. Zijlstra, M.E. Garcia

Institut für Theoretische Physik, Universität Kassel

Projektförderung
DFG

Silizium ist eines der wichtigsten Elemente in der modernen Halbleitertechnik und daher unverzichtbar in der Computer- und Elektronikindustrie. Die Verwendung von ultrakurzen Laserpulsen eröffnet völlig neue Möglichkeiten in der Materialverarbeitung: Der Beschuss einer Silizium-Oberfläche mit ultrakurzen Laserpulsen erzeugt Strukturen mit einer ungeahnten Regelmäßigkeit und Präzision. Um die Vorgänge bei einer solchen Bearbeitung von Silizium zu verstehen, hat Bernd Bauerhenne im Rahmen seiner Doktorarbeit u.a. ein effektives Potential für Silizium entwickelt, das die atomaren Bewegungen mit einer noch nicht dagewesenen Präzision reproduziert.

In der Arbeitsgruppe wurden die Bewegungen der einzelnen Silizium-Atome nach einer Anregungen mit einem ultrakurzen Puls mit Hilfe der Dichtefunktionaltheorie berechnet und analysiert^{1,2}. Bei Silizium führt ein intensiver ultrakurzer Puls dazu, dass die im Grundzustand vorliegende Diamantstruktur innerhalb von wenigen 100 Femtosekunden zerstört wird. Diesen Vorgang nennt man nichtthermisches Schmelzen.

An die Atombewegungen einer solchen oben genannten Molekulardynamik-Simulation wurde das Potential für eine ausgewählte Laserfluens angefitet. Denn ein effektives Potential ist eine Funktion, die die Energie des Festkörpers in Abhängigkeit von den Atompositionen angibt. Die funktionale Form des Potentials wurde ausgehend von bereits in der Literatur bekannten Formen optimiert. Der numerisch recht aufwändige Prozess des Anfitens wurde parallel programmiert und die Berechnungen wurden auf dem Linux-Cluster in Kassel, auf dem Lichtenberg-Cluster in Darmstadt und auf dem Computer Cluster Fuchs in Frankfurt durchgeführt. In Spitzenzeiten wurden für einen Fit 2901 Prozessoren in Darmstadt für mehrere Tage verwendet.

Zum Testen wurden unter Verwendung des neuen Potentials die Molekulardynamik-Simulationen wiederholt und mit den zum Fitten verwendeten Dichtefunktionaltheorie Molekulardynamik-Simulationen verglichen. Dies ergab eine sehr gute Übereinstimmung, wie man an Abb.1 sehen kann, wo der zeit aufgelöste mittlere quadratische Abstand der Kristallstruktur zur Diamantstruktur der Molekulardynamik-Simulationen mit unserem Potential und den Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen (CHIVES) aufgetragen ist. In Zukunft ist eine Erweiterung des Potentials auf einen ganzen Bereich von Laserfluens geplant.

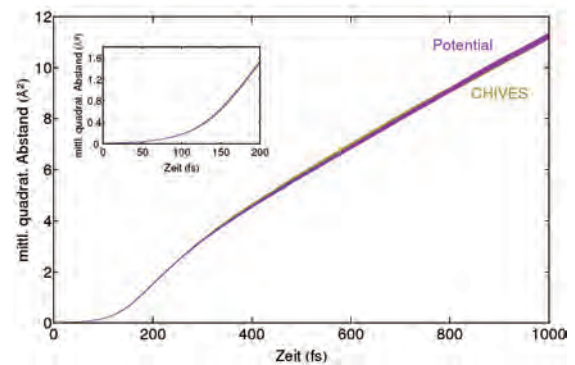


Abb. 1: Vergleich des zeitlich aufgelösten mittleren quadratischen Abstandes der Kristallstruktur zur Diamantstruktur für die Molekulardynamik-Simulationen mit unserem Potential zu den Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen, an die das Potential angefitet wurde.

Literatur

1. E.S. Zijlstra, A. Kalitsov, T. Zier, and M.E. Garcia (2013), Fractional diffusion in silicon, *Advanced Materials*, 25, 5605–5608.
2. T. Zier, E.S. Zijlstra, and M.E. Garcia (2014), Silicon before the bonds break, *Applied Physics A*, 117: 1-5.

Electronic Pairing in Low-Dimensional Systems — from Lattice Density-Functional Theory

M. Saubanère, G.M. Pastor

Fachgebiet Theorie niedrigdimensionaler und nanostrukturierter Materialien, Universität Kassel

The properties of strongly interacting electrons subject to local pairing interactions have been investigated theoretically in the framework of lattice density functional theory (LDFT). The ground-state properties and pairing interactions have been calculated by using the single-particle density matrix as basic variable of the many-body problem. Remarkable even-odd and super-even oscillations of the pairing energy ΔE_p have been observed as a function of band filling. Comparison with exact numerical Lanczos diagonalizations and density-matrix renormalization-group calculations show that LDFT yields a very good quantitative description of the properties of the model in the complete parameter range, thus providing a significant improvement over mean-field approaches. The role of dimensionality on the pairing coupling ΔE_p has been revealed.

The study of strong electron-correlation phenomena and in particular the description of pairing mechanisms leading to superconductivity remain a major challenge in condensed-matter physics. In conventional superconductors, pairing of electrons is known to be induced at the Fermi energy by an effective off-diagonal attractive interaction mediated by phonons. An alternative approach to study the consequences of electronic pairing in metals is to consider the Hubbard model with attractive local interactions. In contrast to the BCS

Hamiltonian, the Hubbard interaction is strictly local in real space. It involves pairs of electrons occupying the same lattice site with opposite spins. It is therefore considerably important to investigate the properties resulting from such contrasting types of interactions.

In this work the attractive Hubbard model has been studied in the framework of lattice-density functional theory. The ground-state energy $E = T + W$ is regarded as a functional of the single-particle density matrix γ_{ij} with respect to the lattice sites, where $T[\gamma]$ represents the kinetic and crystal-field energies and $W[\gamma]$ the interaction energy. Aside from the exactly known kinetic energy functional $T[\gamma]$, we have proposed a simple scaling approximation to the attractive interaction energy $W[\gamma]$, which is based on exact analytic results for the Hubbard dimer and on a scaling hypothesis within the domain of representability of γ . A computer program has been developed from which the ground-state properties are derived. For the applications of the theory we consider one-, two-, and three-dimensional finite and extended bipartite lattices having homogeneous or alternating onsite energy levels. In addition, the Bethe lattice is investigated as a function of coordination number. The kinetic, Coulomb, and total energies, the density distribution γ_{ii} , nearest-neighbor bond order γ_{ij} , and pairing energy ΔE_p have been determined as a function of the interaction strength $|U|/t$, onsite potential ε/t , and band filling $n = N_e/N_a$.

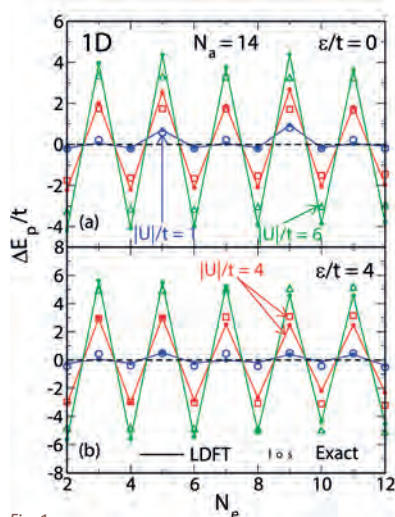


Fig. 1: Pairing energy ΔE_p of the attractive Hubbard model as a function of the number of electrons N_e in one-dimensional rings.

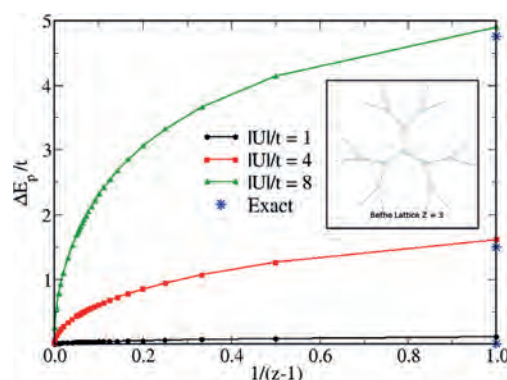


Fig. 2: Pairing energy ΔE_p of the attractive Hubbard model on a Bethe lattice as a function of $1/(z-1)$, where z is the local coordination number (see inset).

References

- M. Saubanère and G. M. Pastor (2014), Phys. Rev. B 90, 125128.
- W. Töws, M. Saubanère, and G. M. Pastor (2014), Theor. Chem. Acc. 133, 1422.

M. Heinemann, M. Giar, C. Heiliger

I. Physikalisches Institut, JLU Gießen

Halbleiterstrukturen basierend auf Kupferoxiden sind insbesondere für die Solartechnologie vielversprechende Kandidaten. Man unterscheidet drei kristallographische Phasen dieser Oxide des Kupfers: Kuprit, Tenorit und Paramelaconit, wobei letztere eine eher instabile Phase darstellt und chemisch zwischen den beiden Erstgenannten anzusiedeln ist. Kuprit ist als die erste halbleitende Kristallphase bekannt. Diese oxidischen Strukturen sind in den letzten Jahren in den Fokus wissenschaftlicher Forschung gerückt, insbesondere vor dem Hintergrund ihrer Attraktivität für die solartechnische Anwendungen.

Auf experimenteller Ebene wurden besonders Präparationsverfahren für die Herstellung von Dünnschichten im Nano- bis Mikrometerbereich der drei Phasen entwickelt. Theoretische Betrachtungen haben sich verstärkt auf die elektronische Struktur der Kupferoxide konzentriert, um die Verwendbarkeit dieser Materialien für Solarzellen zu untersuchen.

Die atomaren Schwingungszustände dieser Materialien sind allerdings noch nicht erschöpfend betrachtet worden. Kollektive Schwingungen der Atome auf dieser Größenskala (10-10m) werden als Phononen bezeichnet. Innerhalb dieses Projektes wurde die Phononenstruktur dieser Materialien ausführlich auf der Basis von ab-initio Berechnungen untersucht und in Zusammenarbeit mit dem Experiment präsentiert.

Grundlage der ab-initio Rechnungen ist die Dichtefunktionaltheorie welche eine rein quantenmechanische Betrachtung der Kupferoxide ermöglicht. Mittels dieser Methode wurden die Schwingungsspektren berechnet. Das dazu verwendete Softwarepaket ist das kommerzielle Vienna ab-initio Simulation Package (VASP).

Ein besonderer Schwerpunkt lag auf der Berechnung von Raman- und Infrarotspektren. Wir haben eine Methodik entwickelt, welche die reproduzierbare und rechnerisch effiziente Berechnung dieser Spektren erlaubt. Die Raman-Spektroskopie ist eine experimentelle Methodik, die auf der Streuung von Licht an Festkörpern beruht. Insbesondere im Falle des Kuprit zeigt das Ramanspektrum mehrere Anomalien, da es durch atomare Fehlstellen geprägt ist.

Im Rahmen einer detaillierten Analyse konnten wir in diesem Projekt dazu beitragen, die Art und Struktur dieser Defekte näher zu beleuchten.¹ Weiterhin haben wir für alle drei Kristallphasen Raman- und Infrarotspektren berechnet,² was bis dato noch nicht in der Literatur existiert. Eine theoretische Berechnung solcher Spektren ist auch für experimentelle Betrachtungen wichtig, da sie Voraussagen treffen und bestehende Unklarheiten klären können.

In Zukunft werden die Ramanspektren von Defektstrukturen der Kupferoxide Gegenstand näherer Betrachtung sein. Zudem sind die physikalischen Linienbreiten der Resonanzen in den Raman- und Infrarotspektren von Interesse, welche in den gegenwärtigen Untersuchungen noch nicht berücksichtigt sind. Diese Linienbreiten werden unter Verwendung anharmonischer interatomarer Kraftkonstanten errechnet und erlauben einen besseren Vergleich zwischen berechneten und experimentellen Daten.

Literatur

1. T. Sander, C.T. Reindl, M. Giar, B. Eifert, M. Heinemann, C. Heiliger, and P.J. Klar (2014), Physical Review B 90.
2. M. Giar, M. Heinemann und C. Heiliger (in Vorbereitung).

Evolution of Partonic and Hadronic Matter in Relativistic Heavy-Ion Collisions

E.L. Bratkovskaya, W. Cassing, V. Konchakovski, W. Cassing
Institut für Theoretische Physik, JLU Gießen

Funding source
BMBF, LOEWE
center HIC for
FAIR

The Parton Hadron String Dynamics (PHSD) transport approach has been used to study the evolution of hadronic and partonic matter as well as their transition into each other in relativistic heavy-ion collisions. We found that partonic matter at midrapidity lives only during a few fm/c and then hadronizes into mesons and baryons during the expansion of colliding system and decreasing of energy density.

The PHSD model is a covariant dynamical approach for strongly interacting systems formulated on the basis of Kadanoff-Baym equations or off-shell transport equations in phase-space representation, respectively. The PHSD model includes the creation of massive quarks via hadronic string decay – above the critical energy density $\sim 0.5 \text{ GeV}/\text{fm}^3$ – and quark fusion forming a hadron in the hadronization process. With some caution, the latter process can be considered as a simulation of a crossover transition because the underlying EoS in PHSD is a crossover.

At energy densities close to the critical energy density the PHSD describes a coexistence of this quark-hadron mixture. This approach allows for a simple and transparent interpretation of lattice QCD results for thermodynamic quantities as well as correlators.

Two snapshots for non central Au+Au collisions along the z axis at the times $t = 3$ and $6 \text{ fm}/c$ after first contact illustrate the evolution of energy density of baryons (color scale) and partons (two black levels for 0.6 and $0.01 \text{ partons}/\text{fm}^3$). At the early times when the energy density is above the critical energy density $\sim 0.5 \text{ GeV}/\text{fm}^3$ partonic matter is created (left) and when the colliding system expands (and its energy density decreases) partons hadronize into mesons and baryons already after $6 \text{ fm}/c$ for Au+Au collisions at collision energy 11.5 GeV . The arrows on the figures show the local velocity of the baryonic matter.

For more details and also for the analysis of recent STAR data for the directed flow of protons, antiprotons, and charged pions obtained within the beam energy scan program we refer the reader to (Konchakovski et al.)¹ and references therein.

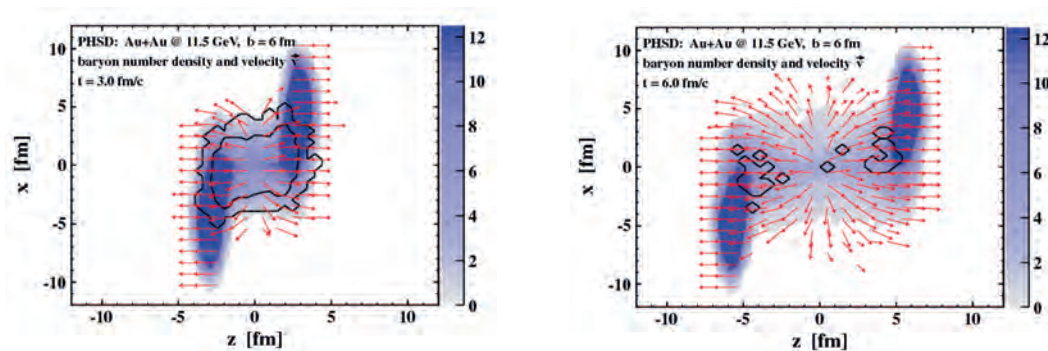


Figure:

Snapshots of the baryon energy density distribution in the PHSD model at the time $t = 3$ and $6 \text{ fm}/c$ for Au+Au collisions and collision energy 11.5 GeV . The energy density scale is given on the right side in GeV/fm^3 . The solid curves display parton density levels for 0.6 and $0.01 \text{ partons}/\text{fm}^3$. The arrows show the local velocity of baryonic matter.

Reference

1. V.P. Konchakovski, W. Cassing, Yu. B. Ivanov, and V.D. Toneev (2014), Examination of the directed flow puzzle in heavy-ion collisions, Phys.Rev. C90, 014903.

Extracting Hadron Masses from Lattice QCD Simulations at Fixed Topology

C. Czaban, A. Dromard, M. Wagner

Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt

Topology is an important concept in physics, e.g. in field theory, in condensed matter physics or in cosmology. Topology characterizes the shape of an object in terms of properties that are preserved under continuous deformations including stretching and bending, but not tearing or gluing.

Two simple strips of paper can serve as an illustrative example. Take the first one and glue its two ends together without introducing any unnecessary turns (like closing a belt; cf. Fig. 1). Proceed in a similar way with the second strip, but make a full turn with one end, before attaching it to the other end (cf. Fig. 2). The two strips have now a different topological structure. It is not possible to deform the second strip to look exactly like the first strip without cutting the strip and removing the winding. This idea can be generalized in a straightforward way. To each closed strip one can associate a winding number or topological charge Q , which counts the number of left handed turns minus the number of right handed turns (Fig. 1 corresponds to $Q=0$, Fig. 2 to $Q=+1$). Two strips with the same topological charge can be deformed continuously into each other. If two strips have different topological charges, this is not possible.

Fig. 1: Closed strip with trivial topology ($Q=0$).

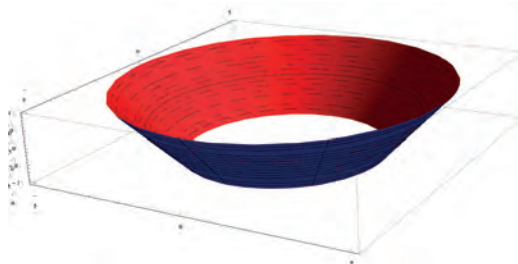
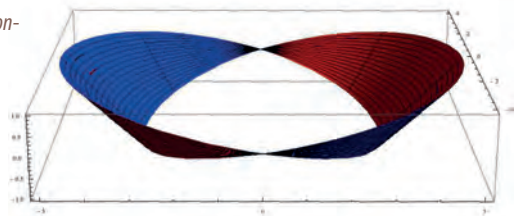


Fig. 2: Closed strip with non-trivial topology ($Q=+1$).



Quantum chromodynamics (QCD) is the theory of quarks and gluons, which for example explains the formation and the mass of protons and neutrons. The gluons, which bind the quarks together, are described by a field, which is similar to the well-known electromagnetic field. Similar to the previously discussed closed strip of paper also gluonic field configurations can exhibit windings, instantons, and anti-instantons. These (anti-) instantons cannot be removed or generated by continuous deformations of the gluonic field configuration. They are localized in space and in time and hence can be interpreted as particles formed by gluons with a very short life time (they are also called pseudoparticles). The number of instantons minus the number of anti-instantons is the topological charge of a gluonic field configuration.

Lattice QCD is a method to solve the extremely complicated equations of QCD numerically. To be able to compute a physical quantity, for example the proton mass, one needs to generate a representative set of gluonic field configurations with many different topological charges with Monte Carlo algorithms. Unfortunately, these algorithms have severe difficulties in changing the topological charge of a gluonic field configuration, in particular, when the lattice spacing is small. Due to this problem, which is called topology freezing, it is of interest, to develop methods, to compute physical quantities like the proton mass from a set of gluonic field configurations from a single topological sector. Such methods have been suggested some time ago. We are among the first to test these methods in practice, by considering models, which are simpler, but similar to QCD: quantum mechanics on a circle, the 2D Schwinger model and $SU(2)$ Yang-Mills theory.

Recently, we have also improved the methods from a theoretical point of view, by developing higher order (i.e. preciser) equations.¹⁻⁴

References

1. RC. Czaban and M. Wagner, Lattice study of the Schwinger model at fixed topology, PoS LATTICE 2013, 465 (2014) [arXiv:1310.5258 [hep-lat]].
2. A. Dromard and M. Wagner, Extracting hadron masses from fixed topology simulations, Phys. Rev. D 90, 074505 (2014) [arXiv:1404.0247 [hep-lat]].
3. C. Czaban, A. Dromard and M. Wagner, Studying and removing effects of fixed topology, Acta Phys. Polon. Supp. 7, no. 3, 551 (2014) [arXiv:1404.3597 [hep-lat]].
4. A. Dromard, C. Czaban and M. Wagner, Hadron masses from fixed topology simulations: parity partners and $SU(2)$ Yang-Mills results, arXiv:1410.4333 [hep-lat].

Gitter-QCD-Berechnung der Massen von D- und D_s-Mesonen und von Charmonium

J. Berlin, M. Kalinowski, D. Palao, M. Wagner

Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt

Die Quantenchromodynamik (QCD) ist die elementare Theorie der Quarks und Gluonen. Auf Grund der Komplexität der zugrunde liegenden Gleichungen ist es jedoch für die meisten Probleme nicht möglich, analytische Lösungen zu finden. Im Gegensatz z. B. zur Quantenelektrodynamik (QED) scheitern häufig auch störungstheoretische Ansätze, speziell im Bereich niedriger Energien. Gitter-QCD-Rechnungen bieten dagegen die Möglichkeit, QCD-Observablen numerisch zu berechnen. Die Gitter-QCD basiert auf dem Pfadintegralformalismus und der numerischen Auswertung unter Verwendung stochastischer Methoden. Da hierfür eine sehr große Anzahl von Matrixinversionen erforderlich ist und diese Matrizen typischerweise viele Millionen Zeilen und Spalten enthalten, ist man auf die Nutzung von modernen Hochleistungscomputern wie dem Loewe-CSC angewiesen. Im Idealfall werden sämtliche Rechnungen mehrfach mit unterschiedlich großen Gitterabständen ausgeführt. Das Ziel dieses Projekts ist die Gitter-QCD-Berechnung der Massen von D- und D_s-Mesonen und von Charmonium. Solche Mesonen bestehen vorwiegend aus einem Quark-Antiquark-Paar, wobei mindestens eines der beiden Quarks ein schweres charm-Quark ist. Solche Mesonen werden gegenwärtig und auch in naher Zukunft experimentell untersucht, z. B. am PANDA-Experiment des sich im Bau befindlichen FAIR-Beschleunigers. Für die Berechnung der für die Mesonmassen erforderlichen Pfadintegrale benutzen wir von der European Twisted Mass Collaboration (ETMC) produzierte Gluon-Konfigurationen. Auf Grund des mit sinkender Masse der leichten up/down-Quarks sehr stark ansteigenden rechentechnischen Aufwands, wurden alle Gluon-Konfigurationen für mehrere unphysikalisch schwere up/down-Quarks erzeugt. Berechnungen der Mesonmassen für diese unphysikalisch schweren up/down-Quarks ermöglichen letztendlich eine Extrapolation in der leichten up/down-Quarkmasse, eine sogenannte chirale Extrapolation, zur

physikalischen up/down-Quarkmasse. Gegenwärtig haben wir Mesonmassen für unterschiedliche leichte up/down-Quarkmassen aber nur für einen Gitterabstand berechnet¹⁻³. In Abb. 1, Abb. 2 und Abb. 3 sind diese Massen als Funktion der quadratischen Pionmasse dargestellt, die wiederum proportional zur up/down-Quarkmasse ist (die Ordnung rot, blau und schwarz entspricht ansteigender up/down-Quarkmasse). Trotz der momentan noch fehlenden Kontinuumsextrapolation beobachtet man für viele Mesonen bereits hervorragende Übereinstimmung mit den entsprechenden experimentellen Ergebnissen. Darüber hinaus konnten Informationen über die Struktur dieser Mesonen gewonnen werden, z.B. welcher Anteil des Gesamtdrehimpulses von den Quarks und welcher von den Gluonen getragen wird.³ Für die nähere Zukunft sind Rechnungen bei feineren Gitterabständen geplant, um eine verlässliche Kontinuumsextrapolation ausführen und so eine potentielle Fehlerquelle eliminieren zu können. Außerdem werden Rechnungen mit kürzlich erzeugten Gluon-Konfigurationen mit physikalisch leichten up/down-Quarkmassen ausgeführt, um Unsicherheiten, die mit der Extrapolation in der up/down-Quarkmasse verknüpft sind, zu entfernen.

Abb. 1: D-Meson-Massen.

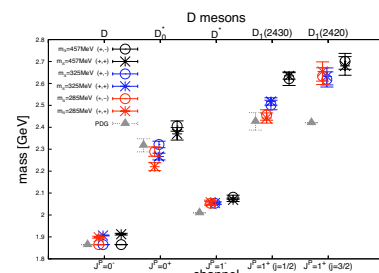


Abb. 2: D_s-Meson-Massen.

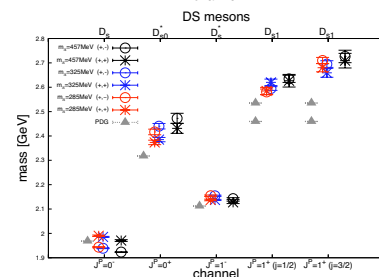
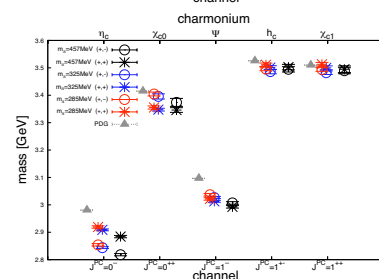


Abb. 3: Charmonium-Massen.



Literatur

1. M. Kalinowski and M. Wagner (2012), [ETM Collaboration], Strange and charm meson masses from twisted mass lattice QCD, PoS Confinement X 303 [arXiv:1212.0403 [hep-lat]].
2. M. Kalinowski and M. Wagner (2013), [ETM Collaboration], Masses of mesons with charm valence quarks from 2+1+1 flavor twisted mass lattice QCD, Acta Phys. Polon. Supp. 6 3, 991 [arXiv:1304.7974 [hep-lat]].
3. M. Kalinowski and M. Wagner (2014), [ETM Collaboration], Twisted mass lattice computation of charmed mesons with focus on D**, PoS LATTICE 2013 241 [arXiv:1310.5513 [hep-lat]].

Die Quantenchromodynamik (QCD), die Theorie der Quarks und Gluonen, beschreibt den Aufbau eines Großteils der uns umgebenden Materie. Zum Beispiel bestehen sowohl Proton als auch Neutron aus drei Quarks, die von Gluonen zusammengehalten werden. Gebundene Zustände von Quarks werden allgemein als Hadronen bezeichnet. Man unterscheidet zwischen Mesonen (typischerweise gebundene Quark-Antiquark-Paare) und Baryonen (gebundene Zustände aus drei Quarks).

Tetraquarks sind viel diskutierte, möglicherweise existierende mesonische Zustände, die aus zwei Quarks und zwei Antiquarks bestehen. Tetraquarks bieten eine Erklärung für eine Reihe unbeantworteter Fragen im Bereich der Mesonphysik. Neben der Existenz und den Massen von Tetraquarks ist auch deren Struktur von Interesse, da unterschiedliche Möglichkeiten diskutiert werden, wie die Quarks in einem Tetraquark angeordnet sind. Ist die Bindung zwischen jeweils einem Quark und einem Antiquark stark, spricht man von einem mesonischen Molekül. Bei einer starken Bindung zwischen den beiden Quarks und den beiden Antiquarks liegt ein Diquark-Antidiquark vor (Abbildung 1).

Das Hauptziel dieses Projekts besteht darin, ein besseres qualitatives Verständnis von möglicherweise existierenden Tetraquarks zu gewinnen. Unsere Arbeitsgruppe verfolgt dabei zwei komplementäre Ansätze.

Zum einen werden konzeptionelle Untersuchungen in technisch vergleichsweise einfachen Systemen durchgeführt, bei denen zwei der vier Quarks als unendlich schwer angenommen werden. Mit Hilfe von numerischen Gitter-QCD-Rechnungen kann bestimmt werden, welche anziehenden beziehungsweise abstoßenden Kräfte zwischen zwei Mesonen auftreten. In einem zweiten Schritt wird dann mit quantenmechanischen Modellrechnungen überprüft, ob diese Kräfte

stark genug sind, um vier Quarks zu einem Tetraquark zusammenzubinden. Erste Ergebnisse hierzu sind vielversprechend: Es wurden starke Anzeichen dafür gefunden, dass zwei schwere B-Mesonen in einer speziellen Anordnung einen gebundenen Vier-Quark-Zustand bilden können, also ein Tetraquark¹⁻⁴. Gegenwärtig werden diese Rechnungen für den experimentell interessanteren aber gleichzeitig technisch schwierigeren Fall eines B- und eines Anti-B-Mesons erweitert. Außerdem ist eine Verfeinerung der erwähnten quantenmechanischen Modellrechnungen in Arbeit.

Unser zweiter Ansatz besteht in der Berechnung und Analyse sogenannter Korrelationsmatrizen von Tetraquark-Operatoren. Dabei werden bei vorgegebenen Quantenzahlen die möglichen Strukturen eines Tetraquarkkandidaten (z.B. mesonisches Molekül und Diquark-Antidiquark (Abb. 1), aber auch Quark-Antiquark- und nichtgebundene Zwei-Meson-Zustände) durch eine Reihe von Operatoren modelliert. Diagrammatisch ist eine typische Korrelationsmatrix in Abbildung 2 skizziert. Aus ihr können Informationen über die Masse und Struktur des $a_0(980)$ -Mesons extrahiert werden. Die numerische Berechnung der Korrelationsmatrix ist jedoch ausgesprochen aufwändig, da sie in etwa der Lösung eines einhundertmillionen-dimensionalen Integrals entspricht. Gegenwärtig sind Teile der in Abbildung 2 gezeigten Matrix verfügbar.⁵⁻¹¹ Eine entsprechende Analyse hat gezeigt, dass es sich beim $a_0(980)$ -Meson nicht um einen stabilen Vier-Quark-Zustand handelt.⁶ Um weitere Informationen über die Struktur des $a_0(980)$ -Mesons zu erhalten, werden momentan die verbleibenden Diagramme aus Abbildung 2 berechnet. Geplant ist außerdem die Verwendung des entwickelten Codes zum Studium schwererer Tetraquark-Kandidaten aus dem D- und D_s-Meson- und dem Charmonium-Sektor, wie sie voraussichtlich auch in näherer Zukunft mit dem PANDA-Experiment am FAIR-Beschleuniger experimentell untersucht werden.

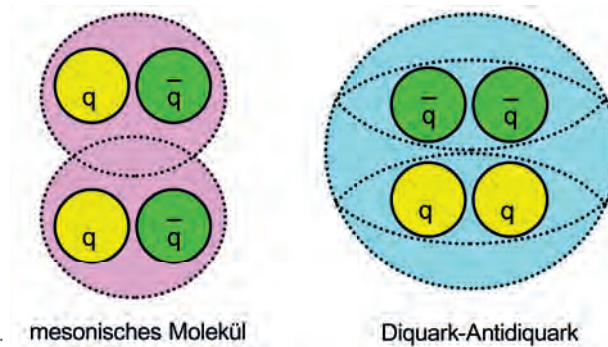


Abb. 1:
Ein mesonisches Molekül im Vergleich mit einem Diquark-Antiquark.

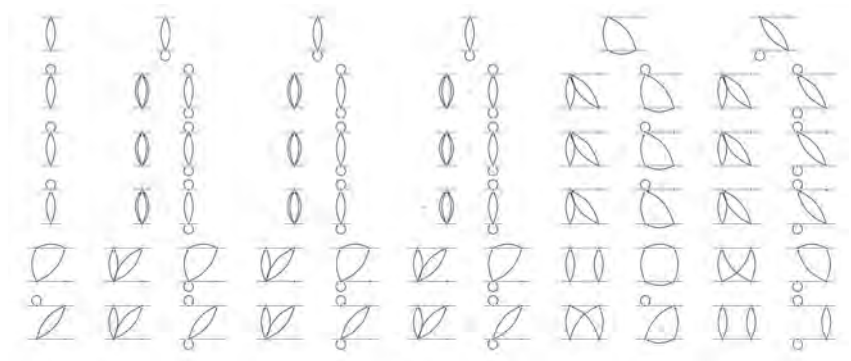


Abb. 2:
Die Korrelationsmatrix für das $a_0(980)$ -Meson.

Literatur

1. M. Wagner (2010), [ETM Collaboration], Forces between static-light mesons, PoS LATTICE 2010, 162 [arXiv:1008.1538 [hep-lat]].
2. M. Wagner (2011), [ETM Collaboration], Static-static-light-light tetraquarks in lattice QCD, Acta Phys. Polon. Supp. 4, 747 [arXiv:1103.5147 [hep-lat]].
3. P. Bicudo and M. Wagner (2013), Lattice QCD signal for a bottom-bottom tetraquark, Phys. Rev. D 87, 11, 114511 [arXiv:1209.6274 [hep-ph]].
4. B. Wagenbach, P. Bicudo, and M. Wagner (2014), Lattice investigation of heavy meson interactions, arXiv:1411.2453 [hep-lat].
5. J.O. Daldrop et al. (2012), [ETM Collaboration], Lattice investigation of the tetraquark candidates $a_0(980)$ and κ , PoS LATTICE 2012, 161 [arXiv:1211.5002 [hep-lat]].
6. C. Alexandrou et al. (2013), [ETM Collaboration], Lattice investigation of the scalar mesons $a_0(980)$ and κ using four-quark operators, JHEP 1304, 137 [arXiv:1212.1418].
7. M. Wagner et al. (2012), [ETM Collaboration], Scalar mesons and tetraquarks by means of lattice QCD, PoS Confinement X, 108 [arXiv:1212.1648 [hep-lat]].
8. M. Wagner et al. (2013), [ETM Collaboration], Scalar mesons and tetraquarks from twisted mass lattice QCD, Acta Phys. Polon. Supp. 6, no. 3: 847 [arXiv:1302.3389 [hep-lat]].
9. M. Wagner et al. (2014), Study of the $a_0(980)$ on the lattice, PoS LATTICE 2013, 258 [arXiv:1309.0850 [hep-lat]].
10. M. Wagner et al. (2014), Investigation of light and heavy tetraquark candidates using lattice QCD, J. Phys. Conf. Ser. 503, 012031 [arXiv:1310.6905 [hep-lat]].
11. A. Abdel-Rehim et al. (2014), Investigation of the tetraquark candidate $a_0(980)$: technical aspects and preliminary results, arXiv:1410.8757 [hep-lat].

Gluonic Green's Functions of Quantum Chromodynamics

M. Huber, A. Blum, A. Cyrol, L. v. Smekal

Institute für Theoretische Kernphysik, TU Darmstadt

Funding source

Alexander von Humboldt-Stiftung, HIC for FAIR, EU

According to modern physics, nature can be explained by four fundamental forces: the gravitational, the electromagnetic, the weak and the strong force. Quantum chromodynamics (QCD) is the contemporary theory of the strong interaction and describes the interaction of quarks and gluons. Although QCD was formulated in the 1970s, many aspects still have to be explored.

While so-called perturbation theory provides a very good description at high energies, it cannot be applied at low energies. To access the low energy regime of this quantum field theory, non-perturbative methods have been developed. Some of these methods demand a very large amount of computing power, and high performance computing allows performing numerical calculations that were not feasible until recently.

Dyson-Schwinger equations (DSEs) are a practical tool for non-perturbative calculations. One possible application is the calculation of the elementary Green's functions of the strong force which describes the interaction of quarks. Green's functions can be considered the elementary building blocks of a quantum field theory and the Dyson-Schwinger equations are their equations of motion. An aspect is that for the strong force Green's functions are not physical objects themselves in the sense that they cannot be measured directly. However, they are the input needed to calculate physical quantities like the mass and form factors of the proton.

In this project we have overcome technical limitations in the solution of the DSEs for the gluonic two-point functions in Landau-gauge QCD, i.e. the gluon and ghost propagators.¹ We have for the first time included dynamical 3-point vertexfunctions selfconsistently in

the solutions of the coupled non-linear integral equations that are obtained from truncating the infinite tower of DSEs in the spirit vertex expansions.^{2,3,4,5} Our fully iterated solution to a system of DSEs that is complete on the level of 3-point functions, in comparison to lattice data and previous results for the propagators, for the first time demonstrated that these kinds of vertex expansions are feasible and it provided encouraging evidence for their convergence.

Vertex functions also are needed for a wide range of phenomenological studies in hadron physics. Thus, to calculate how these vertices behave at low energies enables more precise calculations of hadronic observables. In (Cyrol et al.)⁶ we have calculated this four-gluon vertex from its DSE. Our results are: First, a self-consistent solution of four-gluon vertex Dyson-Schwinger equation did not exist before and it was not clear if a solution in the suggested truncation scheme was possible at all. Secondly, we have calculated the full momentum dependence. This allows employing the obtained results to study the influence of the four-gluon vertex on other scattering processes. Furthermore, we have gathered promising evidence that the full four-gluon vertex can be approximated rather well by a single quantity. This will alleviate future studies significantly. To calculate the four-gluon vertex, it is necessary to know the non-perturbative behavior of the propagators and the three-gluon vertex. We used results from previous Dyson-Schwinger studies.^{2,3,4} However, these results depend on the four-gluon vertex.

Now we want to combine all these separate studies to obtain a self-contained and self-consistent description of the propagators and the vertices. The first important step to achieve that is documented in a master thesis.⁷

References

1. M.Q. Huber and L. von Smekal (2014), Spurious divergences in Dyson-Schwinger equations, JHEP 1406 (2014) 015.
2. M.Q. Huber and L. von Smekal (2013), On two- and three-point functions of Landau gauge Yang-Mills theory, PoS (LATTICE 2013) 364.
3. M.Q. Huber and L. von Smekal (2013), On the influence of three-point functions on the propagators of Landau gauge Yang-Mills theory, JHEP 1304 (2013) 149.
4. A. Blum, M.Q. Huber, M. Mitter, and L. von Smekal (2014), Gluonic three-point correlations in pure Landau gauge QCD, Phys. Rev. D 89, 061703(R).
5. A. Blum (2014), Master Thesis: Gluonic three-point correlations in pure Landau gauge QCD, TU Darmstadt.
6. A.K. Cyrol, M.Q. Huber, and L. von Smekal (submitted), A Dyson-Schwinger study of the four-gluon vertex, EPJ C, arXiv:1408.5409 [hep-ph].
7. A.K. Cyrol (2014), Master thesis: Gluonic Vertices of Landau Gauge Yang-Mills Theory in the Dyson-Schwinger Approach, TU Darmstadt.

Gravitational-Wave Modeling from Binary Neutron Stars — on Loewe Cluster

K. Takami

Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt

One of the last predictions of Einstein's general relativity is the existence of gravitational waves (GWs), which is ripples of spacetime with the speed of light and is produced by the acceleration of mass. In order to confirm this prediction, there is currently a global effort to detect the radiation from astrophysical sources. One of the most likely sources is the inspiral and merger of binary neutron stars (BNSs) because they are the most violent events in the universe.

Although those waves are extremely weak at the Earth, i.e., the typical non-dimensional amplitude is „ $h \sim (\text{size of atom}) / (\text{distance between Sun and Earth})$ “, the first signal will be observed by advanced detectors such as LIGO, Virgo, and KAGRA, which will be operational within five years. The expected realistic detection-rate is around 40 events per year.¹ In order to enhance the detectability and to interpret the observational data, it is necessary to prepare theoretically accurate modeling for the dynamics of the sources and for the radiated waveforms, in which we rely on cutting-edge numerical relativity simulations. Such simulations can only be carried out on large scale supercomputers.

In this project, we statistically studied the merger of BNSs with various masses and equation of states (EOSs). Our calculations were performed by using a large collection of software modules based on the CACTUS computational toolkit,² which provides infrastructure for large scale simulations, including MPI parallelization, mesh refinement, memory management, and data storage. The equations of general relativity are integrated using the McLachlan module from the Einstein Toolkit,³

which is based on high order finite differencing methods. The hydrodynamic equations are evolved using our privately developed code, Whisky, in which it employs modern finite volume methods for conservation laws in conjunction with various approximate Riemann problem solvers and a piecewise parabolic reconstruction algorithm. Initial data for BNSs was generated using the LORENE code,⁴ a solver for elliptic PDEs based on spectral methods.

For each model, we extracted the gravitational waveform, and obtained a few peak-frequencies via the corresponding power spectrum contains contributions from the hyper-massive neutron star (HMNS) stage. We studied important and interesting correlations between such characteristic frequencies and physical quantities in the binary such as the averaged mass and radius. Then, for example, we found a new correlation between the low-frequency peak and the total compactness of the stars in the binary is essentially universal, while the high-frequency peak depends on the equation of state. By using these correlations we found, finally we constructed a method to decide the redshift⁵ and developed a powerful tool to constrain EOS^{6,7} from observed GWs.

These results are really important and will help us to extract many physical information of BNSs from observed GWs in near future. Although we consider only the merger of BNSs and the HMNSs in this project, we will focus on the late inspiral phase of BNSs to more robustly extract the physical information in our next project.

References

1. J. Abadie et al. (2010), TOPICAL REVIEW: Predictions for the rates of compact binary coalescences observable by ground-based gravitational-wave detectors“, CQG, 27,173001.
2. Cactus Computational Toolkit. URL: <http://www.cactuscode.org/>
3. Einstein Toolkit URL: <http://einstein toolkit.org/>
4. LORENE URL: <http://www.lorene.obspm.fr/>
5. C. Messenger, K. Takami, S. Gossan, L. Rezzolla, and B.S. Sathyaprakash (2014), Source redshifts from gravitational-wave observations of binary neutron star mergers“, Phys. Rev. X, 4, 041004.
6. K. Takami, L. Rezzolla, and L. Baiotti (2014), Constraining the Equation of State of Neutron Stars from Binary Mergers, Phys. Rev. Lett., 113, 091104.
7. K. Takami, L. Rezzolla, and L. Baiotti (accepted), Spectral properties of the post-merger gravitational-wave signal from binary neutron stars“, arXiv:1412.3240, Phys. Rev. D.

Hartree-Fock Many-Body Perturbation Theory

A. Tichai, J. Langhammer, R. Roth
 Institut für Theoretische Kernphysik, TU Darmstadt

Funding source
 HIC for FAIR

In modern nuclear structure theory, interactions are constructed from the fundamental symmetries imposed by quantum chromodynamics (QCD). The derived Hamiltonians allow for a realistic description of nuclear observables. Furthermore, the Hamiltonian is evolved by means of the Similarity Renormalization Group (SRG) in order to soften short-range repulsion and tame tensor correlation effects.

In order to access ground-state energies for medium-heavy closed-shell nuclei different frameworks have been considered. An obvious approach is many-body perturbation theory. One starts with defining an additive splitting of a given Hamiltonian and assumes that the exact eigenfunction may be expanded in terms of a power series. By deriving the expansion coefficients we can deduce the corresponding observables of interest. However, perturbation theory requires a convergent power series expansion. We have shown that the choice of the partitioning heavily affects the convergence behaviour of the perturbation series. Prior analysis in terms of harmonic oscillator (HO) single-particle states revealed divergent power series expansions. In recent calculations we were able to overcome this problem by using Hartree-Fock (HF) single-particle states (Fig. 1).

We started with deriving high-order corrections of the perturbation series by means of a recursive formulation. This enables for a deeper understanding of the perturbative expansion. Moreover, we investigated the impact of the SRG flow parameter on the convergence properties of the perturbation series. It has been shown that perturbation series from Hartree-Fock many-body perturbation theory (HF-MBPT) are sensitive to the flow parameter. In particular, increasing its value induces a stronger suppression of higher-order corrections. This property is not present in HO-MBPT.

In order to compare the results of HF-MBPT we used the configuration interaction (CI) framework that solves for the ground-state energy by using Lanczos algorithms. Both high-order MBPT and CI calculations require strong use of parallelisation in a hybrid MPI/OpenMP framework.

However, due to computational requirements these approaches are limited to light nuclei. Motivated by the promising results from the high-order MBPT calculations we expect low-order partial sums to be a reasonable approximation for the ground-state energy. Exploiting symmetries of the Hamiltonian enables calculations of ground-state energies up to heavy tin isotopes. The results were in good agreement to coupled cluster (CC) and in-medium similarity renormalization group (IM-SRG) calculations, which both have shown their reliability in the past.

In the future we will extend HF-MBPT to the open-shell region and the calculation of spectra. This requires a treatment of degeneracies by means of a full diagonalization of the subspaces. First calculations for oxygen isotopes showed that high-order HF-MBPT is also robust in the degenerate setting. Formulating low-order energy corrections will allow us to proceed to medium-mass open-shell systems. Furthermore, by deriving low-order state corrections we are able to calculate other nuclear observables through the corresponding one- and two-body density matrices.

Additionally we will focus on expanding the closed-shell treatment up to fourth order and the derivation of ladder- and ring-type resummations. This allows for the analysis of error bounds intrinsic in the MBPT framework.

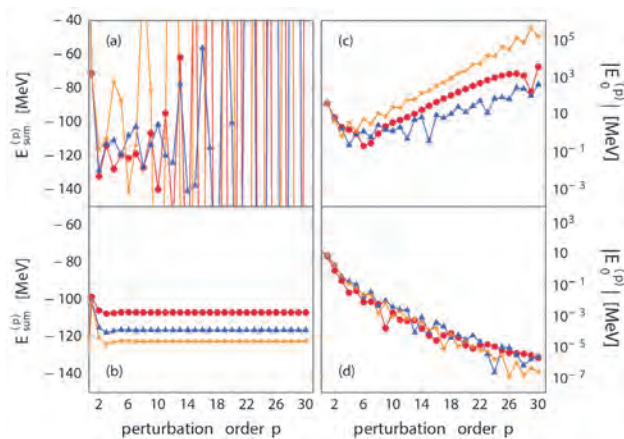


Fig. 1: Partial sums (a) and high-order energy corrections (c) for HO-MBPT for ^{16}O . The corresponding values for HF-MBPT are displayed in (b) and (d), respectively. All calculations are performed in a $e_{\text{max}} = 4$ truncated model space with $\hbar\Omega = 24\text{MeV}$ and $a = 0.08\text{fm}^4$. We use a NN+3N-full interaction with a three-body cutoff $\Lambda_{3N} = 450\text{MeV}$.

Reference

- J. Langhammer, R. Roth (2010), Phys. Lett. B 683, 272.

The application of ultrashort laser pulses in the field of materials processing is promising, because it provides a novel way to manipulate matter: Atomic bonds can be softened or hardened faster than the timescale of the motions of the atoms. The atomic movements are generally not affected directly by the laser light, but only indirectly by the induced bond strength changes. The thus induced atomic pathways cannot be reached by conventional thermodynamic means. Ultrafast laser-induced structural changes can be measured optically, by means of time-resolved electron diffraction, and using new x-ray sources, like XFEL in Hamburg. Our research provides the relevant theory that is necessary to understand these ultrafast processes on an atomic scale and that can be used to predict new phenomena.

We explained the electronic origin of ultrashort laser-induced bond strength changes.¹ Atomic pathways were reproduced by combining experimental data with optical properties that we computed under highly excited conditions.² A Code for Highly-excited Valence Electron Systems (CHIVES) was programmed and found to be 200 times faster than state-of-the-art methods at the same level of accuracy.³ Using CHIVES, in laser-excited Si we predicted thermal phonon squeezing at low excitation densities⁴ and fractional diffusion at high excitation levels.³ We also studied laser-excited TiO₂, BN-nanotubes, diamond, and germanium. CHIVES makes use of two levels of parallelization: MPI-parallel distribution of k points over different nodes and OPEN-MP-parallel computation of all properties related to a single k point. Huge parallel clusters, like, Lichtenberg-Cluster in Darmstadt and the Linux-Cluster in Kassel are essential to achieve the above-mentioned results at the forefront of science.

Future planned research includes (1) extension of CHIVES to insulators and to the semimetal Sb, (2) implementation of schemes to efficiently treat surfaces, (3) simulation of coherent phonons, and (4) a study of the role of electron-phonon coupling. Apart from these scientific goals we are committed to continually improve CHIVES, among other things, for the hardware provided by HPC Hessen. In Sb, preliminary results show a decay of diffraction peaks within a few picoseconds after intense ultrashort excitation (Figure 1).

Funding source
DFG

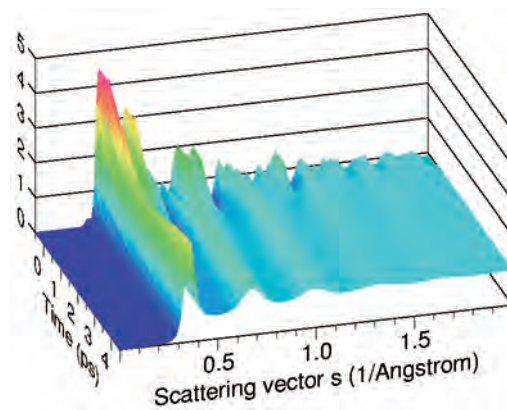


Fig. 1: Structure function of Sb as a function of the scattering vector s and the time after ultrashort laser excitation. The structure function before excitation (time = 0 ps) is characterized by peaks, which disappear after the excitation.

References

1. N.S. Grigoryan, E.S. Zijlstra, and M.E. Garcia (2014), Electronic origin of bond softening and hardening in femtosecond-laser-excited magnesium, *New Journal of Physics* 16, 013002.
2. H. Katsuki, J.C. Delagnes, K. Hosaka, K. Ishioka, H. Chiba, E.S. Zijlstra, M.E. Garcia, H. Takahashi, K. Watanabe, M. Kitajima, Y. Matsumoto, K.G. Nakamura, and K. Ohmori (2013), All optical control and visualization of ultrafast 2D atomic motions in a single crystal of bismuth, *Nature Communications* 4, 2801.
3. E.S. Zijlstra, A. Kalitsov, T. Zier, and M.E. Garcia (2013), Fractional diffusion in silicon, *Advanced Materials* 25, 5605.
4. E.S. Zijlstra, A. Kalitsov, T. Zier, and M.E. Garcia (2013), Squeezed thermal phonons precure nonthermal melting of silicon, *Physical Review X* 3, 011005.

Importance-Truncated Valence-Space Shell Model and Energy-Variance Extrapolation

C. Stumpf, J. Braun, R. Roth

Institut für Theoretische Kernphysik, TU Darmstadt

Funding source
SFB 634, HIC for FAIR

In nuclear structure theory, models have been developed which describe nuclear properties precisely. One well established model is the valence-space shell model, which provides access to spectra and other observables of a wide range of nuclei. The results show remarkable agreement with experimental data where available and can be used to make quantitative predictions.

We extend the shell model to model spaces and nuclei beyond the reach of the conventional shell model. In the shell model, only nucleons occupying orbits on top of an inert core are treated as active degrees of freedom. This implies the definition of a suitable model space constructed from the single-particle states of the valence nucleons and an effective interaction adapted to it, accounting, e.g., for the influence of core on valence nucleons. Eigenstates of the system are obtained by constructing and diagonalizing the Hamilton matrix, which is computationally demanding (typical matrix dimensions are of the order of 10^9). The model space sizes grow combinatorially with the number of valence orbits and the number of valence nucleons.

To overcome these limitations, we introduce an importance-truncation scheme to the shell model. This approach has already been applied successfully to nuclear structure theory in the no-core shell model.¹ It is based on the assumption that many of the basis states in the model space are dispensable for the description of a few low-lying target eigenstates. By employing an importance measure derived from perturbation theory, we estimate the relevance of the individual basis states for the target eigenstates and reduce the model space significantly by considering only the important basis states for the computationally demanding construction and diagonalization of the Hamilton matrix. In this way, the quality of the results remains almost unchanged, but the applicability of the shell model is extended to larger model spaces and a greater variety of nuclei. For our calculations, we have developed a highly optimized hybrid MPI code that constructs the basis and calculates and diagonalizes the Hamilton matrix efficiently.

The importance-truncated shell model (IT-SM) accounts approximately for basis states excluded from the model space by an extrapolation to vanishing importance threshold. We estimate the uncertainty of the extrapolated energy by repeating the extrapolation using different fit functions. Both, energies and observables, e.g. quadrupole moments or transition strengths, can be calculated in remarkable agreement with the exact values. However, this extrapolation scheme suffers from the fact that no physical model is available for the fit function. In some cases, this can be reflected in a large extrapolation uncertainty. For the energies, a more reliable extrapolation based on the energy variance can be carried out. The energy variance provides a measure for the quality of an approximate eigenstate and vanishes in the limit of the exact eigenstate. We exploit this property by calculating the energy variance for the IT-SM energies and extrapolating to vanishing energy variance. As proposed in (Mizusaki and Imada),² we use a quadratic function for the fit, which has been shown to reproduce the exact energies precisely. The energy-variance extrapolation corrects, in principle, for effects of the different truncations employed in the IT-SM.

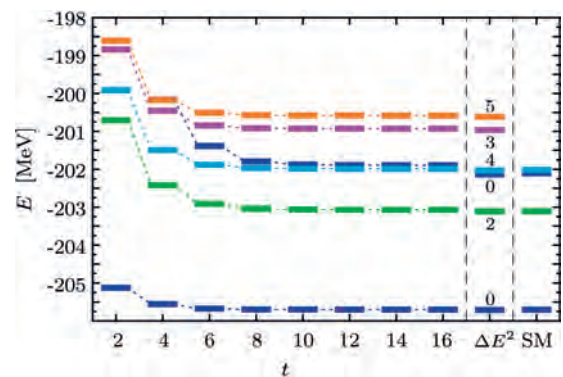


Fig. 1: Lowest part of the spectrum of ^{56}Ni as a function of the model-space parameter t computed in the ITSM using the GXPFI1A interaction.³ In the right columns, the results obtained with energy-variance extrapolation (ΔE^2) and the exact values (SM) extracted from (Horoi et al.)⁴ are shown. Colors denote different J quantum numbers.

References

1. R. Roth (2009), R., Phys. Rev. C 79:064324.
2. T. Mizusaki and M. Imada (2003), Phys. Rev. C 67:041301(R).
3. M. Honma, T. Otsuka, B.A. Brown, and T. Mizusaki (2005), EPJA 25: 499.
4. M. Horoi, B.A. Brown, T. Otsuka, M. Honma, and T. Mizusaki (2006), Phys. Rev. C 73:061305(R).

Influence of Magnetic Material on Tunnel Magnetoresistance and Spin-Transfer Torque in MgO-based Tunnel Junctions

C. Mahr, C. Franz, M. Czerner, C. Heiliger

I. Physikalisches Institut, JLU Gießen

Some Heusler alloys, i.e. intermetallic compounds of the stoichiometric composition X_2YZ with $L2_1$ structure,¹ are assumed to be half-metals: one spin direction shows metallic behavior at the Fermi energy E_F , while the other channel has an energy gap.² Thus, they could be employed as spin filters to assemble devices with near infinite (tunnel) magnetoresistance. As they further carry high magnetic moments at the order of 3 to $6\mu_B$,^{1,3} they are promising options for the construction of spin-transfer torque magnetic random-access memories (STT-MRAMs).

Since our experimental collaborators at Bielefeld university are especially interested in magnetic tunnel junctions (MTJs) containing Co_2FeSi and its inverse Heusler Fe_2CoSi , we calculated the magnetic moment, band structure, density of states (DOS), and transport properties of bulk Co_2FeSi and, as a reference, Co_2MnSi . These calculations were done using our density-functional theory (DFT)⁴ based Korringa-Kohn-Rostocker (KKR) Green's function formalism code.⁵

In non-relativistic generalized-gradient approximation (GGA), Co_2FeSi has a magnetic moment which is much lower than the theoretically expected value.⁶ In addition, no half-metallic behavior is observed. Although published results vary drastically,⁶ our result is still much lower than the average published value. Changes in the exchange-correlation functional produced values as low as $4.94\mu_B$, whilst taking relativistic effects into account proved to be nearly ineffective.

Co_2MnSi , in contrast, behaves much better: The magnetic moment in non-relativistic local spin-density approximation (LSDA) is near the theoretically predicted value, and this result may readily be improved by employing a GGA. Further, this Heusler compound displays

half-metallic behavior, as the band structure shows a direct band gap at the gamma point for the minority spin polarization, which is reflected in a near zero-valued minimum in the DOS around E_F (Fig.1), and a vanishing transmission rate for the corresponding spin.

We assume that our computational scheme might underestimate the magnetic polarization. To verify this, we implemented a fixed spin-moment (FSM) method, being a slight generalization of.⁷ This allows us to perform DFT calculations analogous to (Meinert et al.).⁸

We performed two FSM calculations: The first with the total magnetic moment fixed to the theoretical $6\mu_B$, the second with atomic moments fixed to the experimental values from x-ray magnetic circular dichroism.⁸ The effect of both was to shift the minority bands up by $\Delta E/2$ and the majority bands down by the same amount, which lead to corresponding displacements in the DOS. This is to be expected, as the fixation of the magnetic moments is done by shifting the potentials accordingly. Given the case of Co_2FeSi , no band gap opens, and the Heusler thus stays metallic. In conclusion, the possible underestimation of magnetic moments in our computational scheme seems not to be the major issue when trying to predict (half-)metallic behavior. With regard to our results, calculations on $Co_2Fe_xMn_{1-x}Si$ might show that the different properties of both alloys may be combined to gain even higher performances.

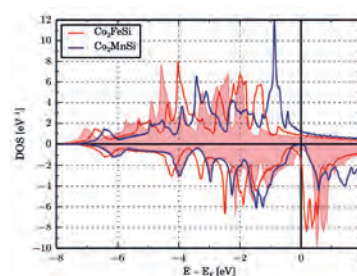


Fig. 1: Density of states for Co_2FeSi (red) and Co_2MnSi (blue) in generalized-gradient approximation (GGA). The latter has a band gap at E_F and behaves therefore half-metallic, while the first does not. Filled: FSM calculation.

References

1. P.J. Webster (1969), Heusler alloys, Contemporary Physics, 10 (6): 559-577.
2. T. Block, M.J. Carey, B.A. Gurney, and O. Jepsen (2004), Band-structure calculations of the half-metallic ferromagnetism and structural stability of full- and half-Heusler phases, Physical Review B, 70 (20): 205114.
3. B. Balke, G.H. Fecher, H.C. Kandpal, C. Felser, K. Kobayashi, E. Ikenaga, J. Kim, and S. Ueda (2006), Properties of the quaternary half-metal-type Heusler alloy $Co_2Mn_{1-x}Fe_xSi$, Physical Review B, 74, 104405.
4. W. Kohn (1999), Nobel Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals, Reviews of Modern Physics, 71 (5), 1253-1266.
5. P. Mavropoulos and N. Papanikolaou (2006), The Korringa-Kohn-Rostoker (KKR) Green Function Method. I. Electronic Structure of Periodic Systems, NIC Series, 31: 131-158, 2006.
6. S. Wurmehl, G.H. Fecher, H.C. Kandpal, V. Ksenofontov, C. Felser, H. Lin, and J. Morais (2005), Geometric, electronic, and magnetic structure of Co_2FeSi : Curie temperature and magnetic moment measurements and calculations, Physical Review B, 72: 184434.
7. K. Schwarz P. and Mohn (1984), Itinerant metamagnetism in YCo_2 , Journal of Physics F: Metal Physics. 14: L129-L134.
8. M. Meinert, J.M. Schmalhorst, M. Glas, G. Reiss, E. Arenholz, T. Böhnert, and K. Nielsch (2012), Insights into the electronic structure of Co_2FeSi from x-ray magnetic linear dichroism, Physical Review B, 86: 054420.

Simulationsrechnungen zur Photoproduktion von ω -Mesonen

S. Friedrich, M. Nanova, K.-T. Brinkmann

II. Physikalisches Institut, JLU Gießen

Projektförderung
DFG (SFB/TR16)

Das Standardmodell der Elementarteilchenphysik beschreibt die Interaktion von Teilchen anhand von fundamentalen Kräften, die durch den Austausch von Eichbosonen vermittelt werden. Eine dieser Kräfte ist die starke Wechselwirkung (Quantenchromodynamik, kurz QCD), welche z. B. attraktiv auf die Nukleonen innerhalb eines Atomkerns wirkt. Eine Besonderheit dabei ist, dass die „Übermittler“ der Kraft, die Gluonen (von engl. glue: Kleber), selbst der Wechselwirkung unterliegen. Dies führt u. a. dazu, dass man aus den grundlegenden Prinzipien der Theorie nur schwer exakte Vorhersagen für zusammengesetzte Teilchen treffen kann.

Die Eigenschaften von stark wechselwirkenden Teilchen (Hadronen), z. B. Mesonen, sind Forschungsgegenstand mehrerer Beschleunigerexperimente weltweit. Es wird untersucht, inwieweit sich durch die Anwesenheit der Nukleonen eines Atomkerns die Eigenschaften von freien Mesonen wie Lebensdauer, Zerfallskanäle oder Ruhemasse ändern. Dies würde Hinweise darauf liefern, dass eine fundamentale Symmetrie der Quantenchromodynamik zumindest partiell wiederhergestellt werden kann. Erste Hinweise zu Modifikationen von ω -Mesonen im nuklearen Medium wurden in (Kotulla et al.)¹ veröffentlicht. Dabei wird die Produktion der ω -Mesonen durch hochenergetische Photonen an verschiedenen Atomkernen untersucht und diese durch den Zerfall in drei Photonen mit entsprechenden Detektoren nachgewiesen. Durch Messung der Mesonen-Ausbeute konnte

im Vergleich zu theoretischen Vorhersagen² eine Verkürzung der Lebensdauer des ω -Mesons in Kernmaterie nachgewiesen werden.

Von Interesse ist auch, dass gebundene Zustände eines neutralen ω -Mesons an den Atomkern existieren könnten, die nur durch die starke Wechselwirkung gebildet werden.³ Theoretische Vorhersagen liegen nur für die Bildung von quantenmechanischen Zuständen eines solchen ω -mesischen Kerns vor. Der Zerfall in den zu beobachtenden Kanal und eine mögliche Endzustandswechselwirkung der Zerfallsprodukte müssen jedoch für einen direkten Vergleich mit experimentellen Daten berücksichtigt werden. Solche Vorhersagen für zu erwartende Verteilungen der ω -Mesonen lassen sich durch Rechnungen mithilfe des Gießen Boltzmann-Uehling-Uhlenbeck Transportmodells (GiBUU) realisieren. Dieses semiklassische Modell beschreibt die Dynamik von Hadronen in Raum und Zeit für gegebene Parameter. Zurzeit beinhaltet es 83 verschiedene Hadronen und beschreibt deren Freiheitsgrade in nuklearen Reaktionen inklusive Propagation, Kollisionen und Zerfällen im Energiebereich von einigen Megaelektronenvolt (MeV) bis einigen Gigaelektronenvolt (GeV).⁴⁻⁶

Für unterschiedliche Szenarien von In-Medium Modifikationen des ω -Mesons, wie z. B. einer Lebenszeitverkürzung und/oder einer Verminderung der Ruhemasse, können nun Rechnungen durchgeführt werden, deren Ergebnis mit experimentellen Daten verglichen werden können. In Abb. 1 ist der Wirkungsquerschnitt der ω -Photoproduktion an Kohlenstoff für verschiedene In-Medium-Szenarien im Vergleich zu experimentellen Daten gezeigt.⁷

Für die Zukunft ist geplant, die Impulsabhängigkeit der Lebensdauerverkürzung in GiBUU zu implementieren ebenso wie das η' -Meson, das bisher noch nicht berücksichtigt wurde, jedoch Gegenstand aktueller Datenanalysen ist.

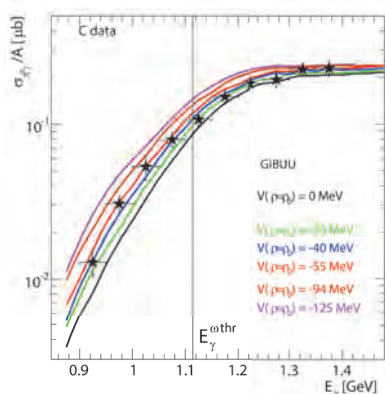


Abb. 1:
Wirkungsquerschnitt der
 ω -Photoproduktion an Kohlenstoff für
verschiedene In-Medium Szenarien im
Vergleich zu experimentellen Daten.

Literatur

1. M. Kotulla et al. (2008), Modification of the ω -Meson Lifetime in Nuclear Matter, Physical Review Letters, 100: 192302.
2. P. Mühlich and U. Mosel (2006), ω attenuation in nuclei, Nuclear Physics A, 773: 156-172.
3. S. Friedrich et al. (2014), Experimental constraints on the ω -nucleus real potential, Physics Letters B, 736: 26-32.
4. URL: <https://gibuu.hepforge.org/trac/wiki>
5. O. Buss et al. (2012), Transport theoretical description of nuclear reactions, Physics Reports, 512: 1-124.
6. J. Weil (2013), Dissertation: Vector Mesons in Medium in a Transport Approach, Gießen.
7. V. Metag et al. (2012), Experimental approaches for determining in-medium properties of hadrons from photo-nuclear reactions, Progress in Particle and Nuclear Physics, 67: 530-535.

Funding source
SFB 634,
HIC for FAIR,
BMBF

Theoretical nuclear physics aims at a consistent theoretical description of nuclei as quantum-mechanical many-body systems and at a quantitative prediction of experimental observables such as ground-state or excitation energies. In order to achieve this, two main challenges have to be overcome, namely the construction of a nuclear Hamiltonian and the solution of the nuclear many-body problem. An ab initio many-body method that can be very successfully applied to heavy-mass nuclei in the vicinity of shell closures is the Coupled Cluster (CC) method.¹ Recently, the In-Medium Similarity Renormalization Group (IM-SRG) has been introduced as a new ab-initio method for solving the nuclear many-body problem. It uses the very efficient SRG flow-equation approach to directly extract nuclear structure observables, or to derive effective Hamiltonians as input for subsequent shell model calculations, showing the great flexibility of this many-body approach.² We have derived an efficient set of IM-SRG flow equations and implemented them in C. By, for example, using Basic Linear Algebra Subprograms (BLAS) and parallelization, our code is highly optimized and scales very well with the number of CPU cores. Based on nucleon-nucleon and three-nucleon interactions derived from chiral effective field theory that were transformed through the free-space SRG for improving the convergence behavior, we used the IM-SRG for systematic studies of ground-state energies of closed-shell nuclei up to ^{123}Sn .

Furthermore, we validated this new many-body approach by comparing the results to those of the most advanced CC approaches, namely the CCSD and CR-CC(2,3). Therefore, Fig. 1 shows binding energies per nucleon for a range of nuclei from ^4He up to ^{132}Sn based on calculations with the IM-SRG, CCSD, CR-CC(2,3) and on experimental values. We observe a deviation between the IM-SRG and the CCSD below 1.5 % whereas the IM-SRG and the CR-CC(2,3) deviate at most 0.4 % from each other, which is a remarkably good agreement. A comparison of results of the IM-SRG with experimental binding energies reveals that the light nuclei up to ^{24}O are very well predicted, whereas the heavier nuclei are consistently overbound by about 0.8-1.6 MeV per nucleon. In conclusion, we can see that the IM-SRG is a very promising tool of nuclear structure theory which is especially illustrated by the very good agreement with the sophisticated CR-CC(2,3) approach. As the IM-SRG is a very flexible tool, we can use its formalism for various other purposes. For example, we have started to use the IM-SRG for calculating excited states and observables and plan to derive effective Hamiltonians for a subsequent use in shell-model calculations.

Furthermore, we are in the process of generalizing the formalism of the IM-SRG to a multi-reference formulation which enables us to apply the IM-SRG directly to open-shell nuclei.

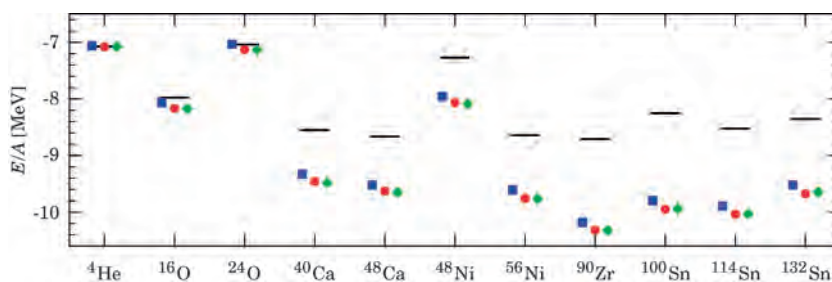


Fig.1:

Ground-state energies per nucleon for a range of nuclei from ^4He to ^{132}Sn calculated with the CCSD (squares), IM-SRG (circles) and CR-CC(2,3) (diamonds). Black bars indicate experimental values.

References

1. S. Binder, P. Piecuch, A. Calci, J. Langhammer, P. Navrátil, and R. Roth, Extension of coupled-cluster theory with a noniterative treatment of connected triply excited clusters to three-body Hamiltonians, *Physical Review C* 88, 054319.
2. H. Hergert, S.K. Bogner, S. Binder, A. Calci, J. Langhammer, R. Roth, and A. Schwenk (2013), In-medium similarity renormalization group with chiral two- plus three-nucleon interactions, *Physical Review C* 87, 034307.

M. Bach, F. Cuteri, C. Czaban, V. Lindenstruth, O. Philipsen, C. Pinke, A. Sciarra
Institut für Theoretische Physik, Goethe-Universität Frankfurt

The strong force is described by Quantum Chromodynamics (QCD). This theory has been experimentally tested to be a valid description of the interactions of quarks and gluons, the elementary constituents of hadronic matter. In particular, QCD is relevant for physics investigated presently at the LHC at CERN or in the near future at FAIR in Darmstadt. One important research topic is the phase diagram of QCD. It is known that at high temperatures hadronic matter undergoes a phase transition from confined to a deconfined phase (quark gluon plasma). The nature of this transition at non-zero chemical potential μ is not known, and its clarification is one goal of ongoing experiments. In particular, the possible existence of a critical endpoint (CEP) is of interest. In the energy ranges of interest, QCD is inherently non-perturbative and a perturbative approach to QCD is in general not possible. Lattice QCD (LQCD) provides an alternative and well-established non-perturbative approach by formulating QCD on a spacetime lattice with lattice spacing a . LQCD can then be studied using numerical methods. Results are extrapolated to the continuum limit, $a = 0$. A certain freedom in choosing the lattice version of QCD exists. One particular formulation of LQCD employs Wilson fermions. In addition, we use Twisted mass Wilson fermions within the tmfT collaboration. Present lattice simulations algorithms are based on Monte Carlo sampling and require an enormous amount of computing power. Simulating at small quark masses increases the numerical costs. Computing clusters like the Loewe-CSC are therefore an essential tool, where a lot of CPUs can be used in a parallel fashion to

carry out the computations. Apart from this traditional approach, Graphic Processing Units (GPUs) are used for LQCD application since recent years. GPUs offer a very promising performance per cost ratio which comes more and more into focus. Ever since, the Loewe-CSC has been equipped with GPUs, and especially after the hardware upgrade in 2014 this section constitutes a relevant part of its total computing power. However, third party LQCD solutions predominantly focus on NVIDIA hardware. To enable full utilization of the AMD based Loewe-CSC cluster, we have developed the OpenCL based LQCD application `cl2qcd`.¹ OpenCL is a vendor independent programming language. `cl2qcd` shows very good performance and utilizes GPUs in an optimal way. See Figure 1 for a comparison against a reference CPU based code². Here, both GPUs used in the Loewe-CSC show a significant speedup compared to two full CPU nodes. Investigating QCD at non-physical parameters is a promising approach to determine its phase diagram, because observations made here allow for predictions and constrains for the physical point. A point of particular interest is the chiral limit of two flavours of massless quarks, as a CEP would be favored if the transition here is of second order. However, this point is not directly accessible by lattice simulations and therefore a rigorous proof has not been given yet. Clarifying this issue is the central point of our current efforts at $\mu=0$ using twisted mass fermions.³ An alternative approach to this issue can be pursued by simulating at purely imaginary values μ . This circumvents the sign-problem of QCD, which renders LQCD simulation algorithms ill-defined at non-zero (real) μ . In this region, QCD possesses additional symmetries, which allow for strong constraints on the physically relevant region. We are currently mapping out the phase structure of QCD at imaginary μ , where we have already found agreement with existing studies.⁴ We are currently extending these investigations towards the continuum limit.

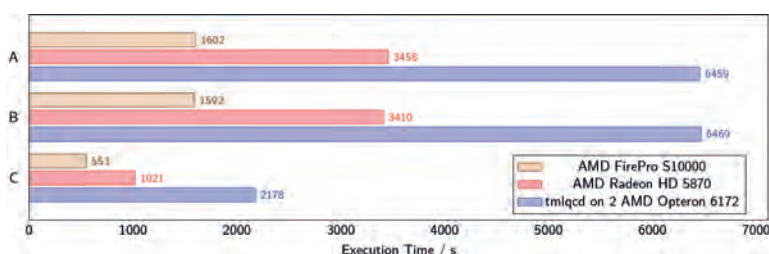


Fig.1: Performance `cl2qcd` compared to `tmlqcd`.

References

1. M. Bach et al. (2013), LatticeQCD based on OpenCL, *Comput.Phys.Commun.* 184.
2. K. Jansen and C. Urbach (2009), tmLQCD: a program suite to simulate Wilson Twisted mass Lattice QCD, *Comput. Phys. Commun.* 180: 2717.
3. tmfT collaboration (2013), Thermal QCD transition with two flavors of twisted mass fermions, *Phys.Rev. D87*; O. Philipsen et al. (2014), The Thermal Quark Hadron Transition in Lattice QCD with two Quark Flavours, *NIC Series Volume 47*: 33.
4. O. Philipsen and C. Pinke (2014), The nature of the Roberge-Weiss transition in $N_f=2$ QCD with Wilson fermions, *Phys.Rev. D89*.

Das Hauptaugenmerk unseres Forschungsprojektes ist die Simulation des Wachstums von Gold Atomen (Au) auf eine vorgegebene Unterlage (Substrat), bestehend aus der Materialverbindung Manganarsenid (MnAs). In Abb. 1 ist dieser Wachstumsprozess zu einem bestimmten Simulationszeitpunkt als Resultat festgehalten.

Der Hintergrund des Projektes ist die Untersuchung des Riesenmagnetowiderstandes (englisch, giantmagnetoresistance, GMR),¹ der z. B. für die magnetische Speicherung von Daten in heutigen Festplatten ausgenutzt wird. Prinzipiell wird jedes Speicherbit einer solchen Festplatte durch ein System aus magnetischer, nicht-magnetischer und magnetischer Schicht verwirklicht.

So eine Situation trifft auch auf MnAs und Gold zu, da MnAs magnetisch und Au nicht-magnetisch ist. Das Neue an diesem Materialsystem ist, dass MnAs im Experiment in Form von so genannten nano-strukturierten Cluster hergestellt wird. Das sind kleine „Inseln“ bzw. „Gruppierungen“ von Atomen, die in verschiedenen Geometrien auf einem Substrat aufgebracht werden. Das Schichtsystem des GMRs stellen dann zwei MnAs-Cluster dar, welche mit Gold verbunden werden.

Unsere Forschung befasst sich ganz konkret mit der Frage, wie die exakte Struktur der Gold Atome auf dem MnAs-Substrat aufgebaut ist. Diese Struktur ist unbekannt und wird für weitere Untersuchungen des GMRs benötigt. Hierfür wird die Molekulardynamik verwendet. Eine Methode, bei der die Atome als klassische Teilchen aufgefasst werden, um aus den Kräften zwischen diesen Atomen zu einem späteren Zeitpunkt die neuen Positionen zu bestimmen. Für die Bestimmung dieser Kräfte wird ein Modell genutzt, welches an Kräfte aus quantenmechanischen Rechnungen angepasst wird. Auf diese Weise umgeht man den hohen Zeitaufwand der quantenmechanischen Rechnung.

Insgesamt werden alle 3 Fälle, Berechnung der quantenmechanischen Ergebnisse,² Anpassung des Modells an diese Ergebnisse³ sowie die eigentliche Simulation⁴ auf den Hochleistungsrechnern ausgeführt.

Das Ergebnis der Simulation zeigt, dass sich zunächst eine 1-atomige Goldschicht auf dem Substrat bildet, anschließend „Inseln“ entstehen, welche im Zuge der Simulation wieder zusammenwachsen.

Mit dem Wissen der Goldstruktur sind nun Rechnungen des elektrischen Transportes durch das Schichtsystem möglich um den GMR zu untersuchen und mit dem Experiment zu vergleichen. Zusätzlich können mit dem gewonnenen Modell für die Beschreibung des Materialsystems die Oberflächenstrukturen der MnAs-Nanocluster untersucht werden, welche für die experimentelle Herstellung der Cluster von Relevanz sind.

Projektförderung

DFG

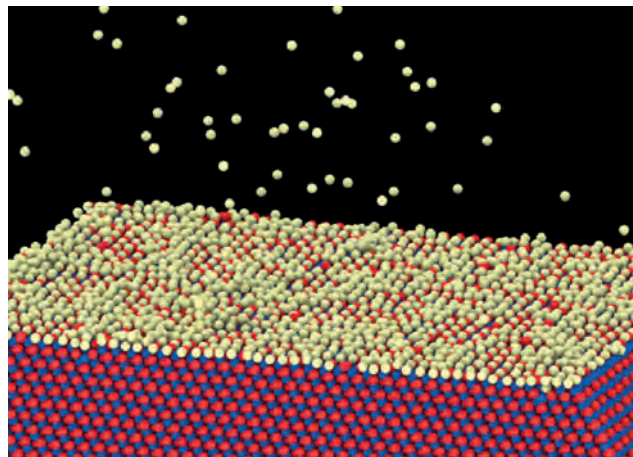


Abb. 1: Darstellung eines Simulationszeitpunktes: Gold Atome (gelb) „wachsen“ auf Manganarsenid (blau-rot).

Literatur

1. P. Grünberg et al. (1986), Phys. Rev. Lett. 57, 2442.
2. URL: <http://www.vasp.at/>
3. URL: <http://potfit.sourceforge.net/wiki/doku.php>
4. URL: <http://lammps.sandia.gov/>

Modelling of Neutron Star Properties

R. Nandi, R. Gomez, J. Steinheimer, T. Schürhoff, R. Mallick, P. Rau, R. Negreiros, S. Schramm
Fachgebiet Kernphysik, Astrophysik, Goethe Universität Frankfurt

Funding source

HIC for FAIR, Nuclear
Astrophysics Virtual
Institute (Helmholtz),
DAAD

The investigation of neutron stars is a central topic in modern astrophysics. Whereas the crust of the star consists of exotic extremely-neutron rich nuclei densities in the core of the star can reach densities perhaps up to ten times the density of ordinary nuclei. Under these conditions, in addition to neutron, protons, and electrons, the star might contain exotic baryons like hyperons or even a core of quark matter.

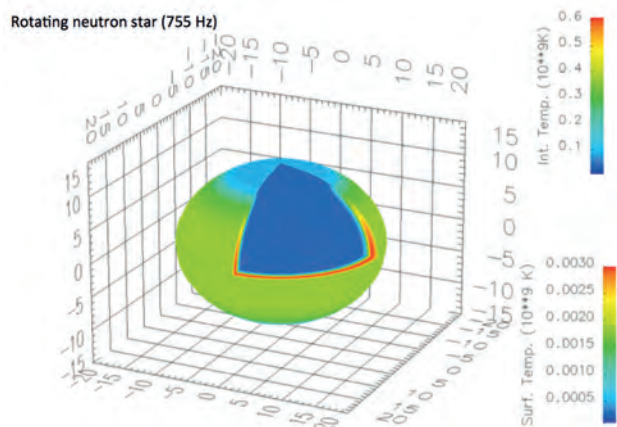
In our project we address all these different conditions, from ordinary nuclei in the crust to quark matter in the interior. To this end we adopt a model for the strong interactions¹ that has been developed in our group and has been successfully applied to problems of heavy-ion, nuclear and astrophysics.

The chiral mean-field (CMF) approach contains as degrees of freedom nucleons, hyperons and the corresponding mesonic states. Here, the masses of the baryons are generated through the interaction with the scalar mesons. Quarks are included in an analogous formulation. Thus, the model contains the correct asymptotic degrees of freedom in a unified approach in contrast to many approaches that connect the hadronic and quark sector by hand.

Using this model we studied the properties of compact stars.¹ One advantage of our approach is that, in agreement with lattice QCD calculations, the model does not necessarily lead to a first-order phase transition to quark matter. Lattice simulations show that for baryon-poor systems like in the fireball created in ultrarelativistic collision of heavy nuclei, the transition to quark matter is a smooth crossover. Such a transition can be described within our quark-hadron approach. We could show that it is possible to obtain a neutron star with quarks present even without a first-order phase transition. In general, however, the finding is that a large quark component requires a strong repulsive force between the quarks, which contradicts lattice gauge simulations of quantum chromodynamics.^{2,3}

A specific important observable of neutron stars is their cooling behavior, which is affected by a fast rotation of the star. To study this point we extended our investigation to model the temperature evolution of the rotating star within a novel two-dimensional code. The figure⁴ shows the example of a snapshot of the cooling exhibiting a warm polar region and a cooler equator, which can have observable consequences.

Currently we extend our studies to a microscopic modeling of the neutron star crust. In a first step we have improved our model parameters to achieve an excellent description of the binding energies of all known nuclei. This required large-scale computations of several thousand nuclei using our two-dimensional nuclear structure code. In the neutron star crust much more exotic and neutron-rich nuclei are present. Therefore, we calculate the properties of exotic neutron-rich isotopes including the transition to the so-called pasta phase of nuclear rod- and slab-like shapes in the inner crust of the star. The dynamics of the system is implemented using a GPU-accelerated code, which we have developed in the recent years.



References

1. V. Dexheimer, J. Steinheimer, R. Negreiros, and S. Schramm (2013), Hybrid Stars in a SU(3) Parity Model, Phys. Rev. C87, 015804.
2. P. Rau, J. Steinheimer, S. Schramm, and H. Stöcker (2014), Conserved Charge Fluctuations in a Chiral Hadronic Model including Quarks and Hadrons, Phys. Lett. B733: 176.
3. J. Steinheimer and S. Schramm (2014), Do lattice data constrain the vector interaction strength of QCDf, Phys. Lett. B736: 241.
4. R. Negreiros, S. Schramm, and F. Weber (2012), Thermal Evolution of Neutron Stars in 2 Dimensions, Phys. Rev. D85, 104019.

Monte Carlo Modelling of Ion-Beam Cancer Therapy — on Sub-Micron Scales

L. Burigo, I. Pshenichnov, I. Mishustin, M. Bleicher

Frankfurt Institute for Advanced Studies, Goethe-Universität Frankfurt

The modern radiation therapy of localized tumours applies accelerated beams of protons and carbon ions to deliver a high dose to the target volume while minimizing the dose to healthy tissues. This technique has the potential to reduce side effects compared to conventional radiotherapy using x-rays due to a better dose distribution in the patient. Despite of the successful clinical experience with proton and carbon-ion beams, other light nuclei can be also considered as possible therapy options. Questions can be raised whether light nuclei as helium could be more advantageous in particular cases. While a decisive answer should come from radiobiological experiments and clinical trials, theoretical simulations may help to identify optimal ion beams for cancer therapy, i.e. to evaluate the most appropriate ion to minimize the damage to healthy tissues at specific irradiation conditions. The Monte Carlo method is a powerful tool to describe the interactions of beam nuclei and all secondary particles with extended media. The Monte Carlo model for Heavy-Ion Therapy (MCHIT)¹, based on the Geant4 toolkit,² was created in FIAS for simulating complex radiation fields in ion-beam cancer therapy. MCHIT can be applied to simulate dose distributions in a tissue-like phantom representing a patient. It takes into account fragmentation of beam nuclei leading to secondary particles with their radiobiological properties different from primary nuclei. Besides, it is able to calculate the energy deposition in volumes of a few cubic micrometers. Such information is needed for modelling radiation effects in individual cells. MCHIT in combination with the modified Microdosimetric Kinetic model³ has been applied to estimate the relative biological effectiveness (RBE) of different ion beams,^{4,5} which is needed to scale the required x-ray dose to reach equivalent results for ions. Figure 1 shows the predicted RBE in the case of a tumour located between 100 and 160 mm and surrounded by healthy tissues. As one can see,

helium ions present an enhanced RBE at the depth of the tumour similar to carbon ions that helps to reduce the physical dose of the treatment. Besides, the RBE for helium ions in the healthy tissues located in front and behind the tumour is relatively low which helps to reduce the side effects in the healthy tissues. In addition, irradiation with helium ions lead to lower yields of secondary nuclear fragments and less dose at distal tissues compared to carbon ions. Such results indicate that helium beam should be regarded as a promising option for ion-beam cancer therapy in the future.

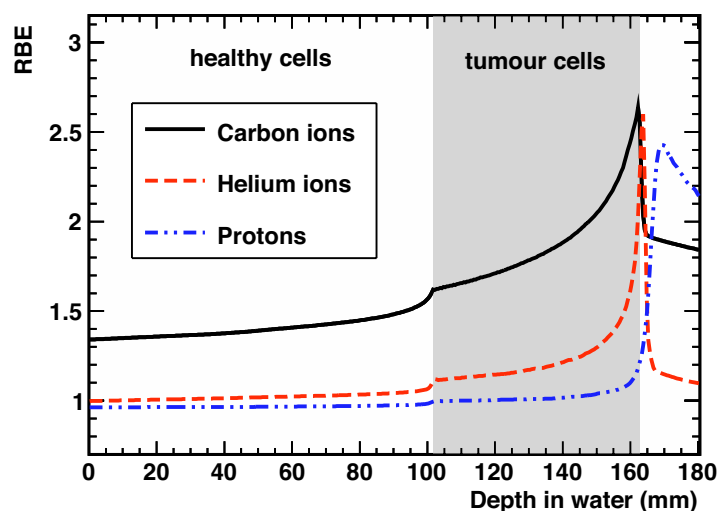


Fig. 1: Relative biological effectiveness (RBE) for human salivary gland (HSG) cells irradiated with proton, helium, and carbon ions. Calculations are performed to reach 10% survival of tumour cells located between depth of 100 and 160 mm.

Reference

1. I. Pshenichnov et al. (2010), Nuclear fragmentation reactions in extended media studied with Geant4 toolkit, Nucl. Instrum. Methods B, 268(6):604-615.
2. S. Agostinelli et al. (2003), Geant4 – a simulation toolkit, Nucl. Instrum. Methods A, 506:250-303.
3. Y. Kase et al. (2006), Microdosimetric measurements and estimation of humal cell survival for heavy-ion beams, Radiat. Res., 166:629-638.
4. L. Burigo et al. (2014), Microdosimetry spectra and RBE of 1H, 4He, 7Li and 12C nuclei in water studied with Geant4, Nucl. Instrum. Methods B, 320:89-99.
5. L. Burigo et al. (2015), Comparative study of dose distributions and cell survival fractions for 1H, 4He, 12C and 16O beams using Geant4 and Microdosimetric Kinetic model, Phys. Med. Biol., 60:3313-3331.

Monte-Carlo-Simulationen der elektronischen Eigenschaften von Graphen

D. Smith, L. v. Smekal

Institut für Theoretische Kernphysik, TU Darmstadt

Projektförderung
SFB 634

Das Projekt befasst sich mit der ab-initio Simulation der elektronischen Eigenschaften von Graphen (einem zweidimensionalen Allotrop von Kohlenstoff, dessen Atome ein hexagonales Gitter bilden) auf Grafikprozessoren (GPUs). Hierbei kommt ein Hybrid-Monte-Carlo Algorithmus zum Einsatz, welcher ein etabliertes Verfahren der Hochenergiephysik zur Simulation stark gekoppelter Fermionensysteme ist. Genutzt werden die GPU-Knoten des Lichtenberg-Clusters in Darmstadt.

Erster Schwerpunkt des Projekts war eine Untersuchung des Halbleiter-Nichtleiter Übergangs, welcher durch die starke Zweikörper-Wechselwirkung der freien Valenzelektronen im Graphengitter hervorgerufen wird. Dabei war insbesondere eine genaue Lokalisation der kritischen Kopplungsstärke für die Bildung der Nichtleiter-Phase, bei realistischer Modellierung des Zweikörper-Potentials, das Ziel.

Motiviert wurde diese Arbeit durch die Diskrepanz zwischen existierenden theoretischen Rechnungen und Simulationen, welche die Nichtleiter-Phase für freistehendes Graphen (ohne Substrat) vorhersagten und experimentellen Resultaten welche diese Phase nicht vorfanden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde gezeigt, dass diese Diskrepanz verschwindet wenn die Abschirmung der Zweikörper-Wechselwirkung durch Elektronen in tieferliegenden Orbitalen („Sigma-Band“) berücksichtigt wird.

Basierend auf theoretischen Arbeiten von Katsnelson et al., welche mittels einer dynamischen Hartree-Fock-Näherung exakte Werte des abgeschirmten Coulomb Potentials auf kurzen Distanzen im Graphengitter berechneten, wurde ein „teilweise-abgeschirmtes Potential“ (partially screened Potential) konstruiert welches im Grenzfall großer Abstände in ein reguläres Coulomb-Potential uebergeht. Simulationen unter

Verwendung dieses Potentials zeigten, dass die kritische Kopplungsstärke nunmer außerhalb des physikalisch realisierbaren Bereichs liegt.¹⁻³

Aktuell beschäftigt sich dieses Projekt mit der Untersuchung des topologischen Lifshitz-Übergangs, welcher bekanntermaßen in einer reinen Tight-Binding Beschreibung (nicht-wechselwirkender Grenzfall) von Graphen auftritt, wenn ein äußeres chemisches Potential (hervorgerufen im Experiment z.B. durch Dotierung) berücksichtigt wird.² Dieser Übergang ist charakterisiert durch eine Änderung der Topologie der Fermi-Fläche, sowie durch eine Veränderung der Dispersionsrelation niederenergetischer Anregungen. Dabei soll durch die Simulation vor allem geklärt werden in welcher Weise Zweikörper-Wechselwirkungen diesen Übergang beeinflussen. Dieses Teilprojekt ist unter anderem im Zusammenhang mit Hochtemperatur-Supraleitung interessant.

Weiterhin wird aktuell eine Studie zum Effekt eines externen Magnetfeldes, senkrecht zur Ebene des Gitters, auf die elektronischen Eigenschaften von Graphen vorbereitet. Insbesondere ist dabei von großem Interesse (sowohl aus theoretischer Sicht als auch im Bezug auf technologische Anwendung) ob sich eine Nichtleiter-Phase durch ein externes Feld, mittels magnetischer Katalyse erzeugen lässt. Eine entsprechende Simulation ist bereits implementiert und befindet sich aktuell in der Testphase.

Literatur

1. D. Smith and L. von Smekal (2014), Monte-Carlo simulation of the tight-binding model of graphene with partially screened Coulomb interactions, *Phys. Rev. B* 89, 195429.
2. D. Smith, M. Körner, and L. v. Smekal (2014), On the semimetal-insulator transition and Lifshitz transition in simulations of mono-layer graphene, *Proceedings of Science, LATTICE2014*, 055
3. D. Smith and L. v. Smekal (2013), Hybrid Monte-Carlo simulation of interacting tight-binding model of graphene, *Proceedings of Science LATTICE 2013*, 048.

Monte-Carlo-Simulationen von G2-QCD bei endlicher Baryonendichte

B. Wellegehausen, L. v. Smekal

Institut für Theoretische Kernphysik, TU Darmstadt

Projektförderung
HIC for FAIR, EU

Stark wechselwirkende Materie befeuert die Sterne und bildet fast die gesamte Masse des sichtbaren Universums. Die zugrunde liegende Theorie ist die Quantenchromodynamik (QCD). Diese Wechselwirkungen sind jedoch so komplex, dass unsere Beschreibung noch immer unvollständig ist. Sie sind dafür verantwortlich, dass Quarks und Gluonen in Hadronen wie dem Proton, dem Neutron oder dem Pion eingeschlossen sind.

Bei extrem hohen Temperaturen, wie sie etwa 10 Millisekunden nach dem Urknall geherrscht haben, schmelzen die Hadronen und es entsteht ein neuer Materiezustand, den man das Quark-Gluon-Plasma nennt. Materie bei derartig extremen Temperaturen wird heute in relativistischen Schwerionenkollisionen wie im RHIC des Brookhaven National Laboratory oder im LHC am CERN künstlich erzeugt und experimentell untersucht.

Die theoretische Beschreibung des dabei beobachteten QCD-Phasenübergangs durch Monte-Carlo-Simulationen im Gitter-QCD ist sehr weit fortgeschritten und liefert Resultate, die mit den experimentellen Beobachtungen auf einem hohen Niveau übereinstimmen. Etwas anders ist die Situation bei vergleichbar extremen Dichten, wie sie etwa im Inneren von Neutronensternen herrschen. Hier brechen unsere derzeitigen Simulationsmethoden aufgrund des Fermionen-Vorzeichenproblems zusammen, und man ist auf effektive Modelle und Theorien angewiesen, um das Phasendiagramm der QCD, die verschiedenen Phasen stark-wechselwirkender Materie und die Übergänge zwischen ihnen als Funktion von Temperatur und Baryonendichte theoretisch zu beschreiben.

Für ein Verständnis der generellen Phänomene bei endlicher Baryonendichte bieten sich QCD-artige Theorien ohne Vorzeichenproblem als Alternative an. Selbst wenn sich solche Theorien von der QCD unterscheiden, sind sie doch auch für die Weiterentwicklung effektiver Theorien und Modelle zur Beschreibung dichter Materie von großer Bedeutung.

Wir haben in (Wellegehausen et al.)¹ eine QCD-artige Theorie vorgeschlagen, die im Unterschied dazu alle relevanten Eigenschaften der QCD in sich vereint und für Simulationen auch bei großen Dichten und vergleichsweise niederen Temperaturen geeignet ist. Diese Theorie, die G2-QCD, enthält Quarks mit sieben

unterschiedlichen anstatt der üblichen drei Farben und 14 anstatt der üblichen acht verschiedenen Gluonen. Sie ist noch teurer zu simulieren als die QCD selbst, aber man darf noch reichhaltigere Phänomene erwarten. Wir sind zuversichtlich, dass mit dieser Theorie z. B. die Eigenschaften von Kernmaterie zumindest qualitativ untersucht werden können.

In ersten Simulationen ist es uns gelungen, dass auch der problematische Bereich des Phasendiagramms, in dem das chemische Potential für die Baryonendichte groß im Vergleich zur Temperatur ist, tatsächlich Gitter-Monte-Carlo-Simulationen zugänglich ist, und neue Einblicke in die Theorie der starken Wechselwirkung ermöglicht.¹ Erste Evidenz für einen Phasenübergang zu gebundener Kernmaterie konnten wir durch Vergleich des von uns berechneten Baryonenspektrums dieser Theorie mit unseren Messungen der Baryonendichte als Funktion des chemischen Potentials bei niederen Temperaturen liefern.^{2,3}

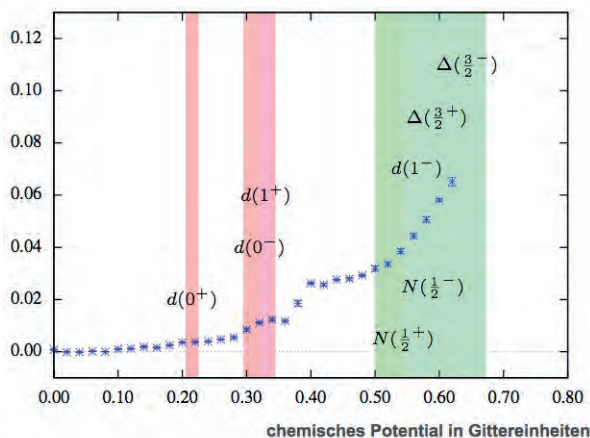


Abbildung: Baryonendichte in Gittereinheiten. Die vertikalen Bänder entsprechen den Baryonmassen pro Quarkzahl (2 für Diquarks (δ), 3 für Nukleonen (N) und Deltas (Δ)).

Literatur

1. B.H. Wellegehausen, A. Maas, A. Wipf, and L. von Smekal (2012), The phase diagram of a gauge theory with fermionic baryons, Phys. Rev. D86, 111901.
2. L. von Smekal, B.H. Wellegehausen, A. Maas, and A. Wipf (2013), G2-QCD: Spectroscopy and the phase diagram at zero temperature and finite density, PoS (LATTICE 2013) 186.
3. A. Maas, L. von Smekal, B.H. Wellegehausen, and A. Wipf (2014), Hadron masses and baryonic scales in G2-QCD at finite density, Phys. Rev. D89, 056007.
– URL: http://www.pro-physik.de/details/news/4260621/Das_Innere_von_Neutronensternen_berechnen.html

Nuclear Matter in the Parity Doublet Model with Fluctuations

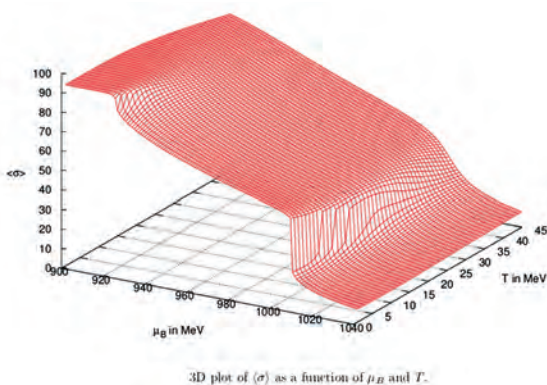
J. Weyrich, L. v. Smekal
Institut für Theoretische Kernphysik, TU Darmstadt

Funding source
HIC for FAIR

Strong-interaction matter fuels the stars and makes up almost the entire mass of the luminous universe. The underlying theory of quarks and gluons, Quantum Chromodynamics (QCD), completely specifies these interactions, which are so complex and non-linear that they have not yet to be fully understood. Indeed, it is these strong interactions that under normal conditions confine quarks and gluons into the interior of hadrons. Understanding the generation of their masses, the confinement of quarks and gluons, the different phases of QCD at extreme temperatures or densities and the transitions between them are some of the great challenges in physics.

Of particular interest is the behavior of QCD matter at extremely high densities, as they exist, for example, in the interior of neutron stars. These are described by introducing the baryon chemical potential which prevents direct studies of dense baryonic matter in QCD by ab-initio Monte-Carlo simulations due to the fermion-sign problem. An alternative non-perturbative method without this problem is provided by the Functional Renormalization Group (FRG).

At temperatures below 20 MeV nuclear matter forms in a first-order phase transition analogous to the condensation of water vapor. In a relativistic description, this liquid-gas transition occurs at a critical value of the baryon chemical potential of 923 MeV which is about 16 MeV below the rest mass of the nucleon, corresponding to the binding energy per nucleon of nuclear matter. Here, we study the nuclear matter transition using the Parity Doublet Model with fluctuations as described by the FRG.



3D plot of $\langle \sigma \rangle$ as a function of μ_B and T .

From a technical point of view our calculations require the numerical integration of a flow equation which can be reduced to integrate a high-dimensional differential equation on a grid in field space over a multi-dimensional parameter space. This flow integration is followed by a minimization with respect to the fields. This procedure has to be repeated for a range of values in order to study the phase structure of the model. Depending on the size of the grid in field space this can require a large amount of computing power, but the calculations can trivially be parallelized and making the problem feasible for multi-core calculations to be performed on a CPU cluster (in our case the Lichtenberg-cluster). For the numerical integration the GNU Scientific Library (GSL) is used in combination with Open-MPI for the multi-core implementation on a CPU cluster.

The characteristic physical quantity to investigate the nuclear matter transition is the chiral condensate. It is extracted from the above-mentioned calculations as the minimum with respect to one of the field directions. This condensate is shown as a function of baryon chemical potential and temperature in the figure. The discontinuities at low temperatures indicate two distinct first-order phase transitions which get weakened with temperature until they eventually disappear in critical endpoints. The model is capable of describing the liquid-gas transition of nuclear matter together with a chiral symmetry restoration transition at even higher baryon chemical potentials. Although we observe rather strong quantitative modifications due to the fluctuations, as compared to existing mean-field studies, the qualitative description is quite compelling.

Future extensions will include explicit quark degrees of freedom with wave-function renormalization to avoid double counting of quarks and hadrons in a Quark-Meson-Baryon model possibly with additional Polyakov-loop variables to incorporate confinement. These extensions will require even larger amounts of computing resources in the future. They will be crucial to arrive at a more concise description of strong-interaction matter in the high net-baryon density region of the QCD phase diagram.

Reference

– J. Weyrich (2014), Master thesis: The Parity Doublet Model with Fluctuations, TU Darmstadt.

On the Properties of Hypermassive Neutron Stars Formed in Mergers of Spinning Binaries

F. Galeazzi, W. Kastaun, J.A. Font, L. Rezzolla

Institut für Theoretische Physik, Astrophysik, Goethe Universität Frankfurt

Funding source
HIC for FAIR

Binary neutron star (BNS) mergers are among the most promising sources of gravitational waves (GW). In this project, we performed three dimensional, fully relativistic numerical simulations of coalescing binary neutron star systems with different spins and two different nuclear equations of state (EOS).

The outcome of BNS mergers is mainly determined by the masses and spins of the two neutron stars (NS), and by the behaviour of matter at high densities, as described by EOS. If the mass is above some threshold, the two stars promptly collapse to a black hole (BH) upon merger. Below the threshold, they form a metastable or even stable NS. The threshold depends

strongly on the EOS and on the spin. The case where a hypermassive neutron (HMNS) star is formed is particularly interesting since it emits a strong GW signal which carries information about the EOS. By varying the spin we determined its influence on the GW signal and the rotation profile of the HMNS. Figure 1 displays a snapshot of the density profile showing an HMNS formed during the merger. In the GW signal (see Figure 2) we can observe a modulation during the HMNS stage induced by strong quasi-radial oscillation. Figure 3 shows an example for the time-dependent GW frequency spectrum, from the increasing orbital frequency during the inspiral, over the rich spectrum of the HMNS stage, to the formation of a BH.

Fig. 1: Snapshot of a merger simulation of two NS with 2 solar masses each, assuming the Shen-Horowitz-Teige EOS. The NS spins are aligned to the orbital angular momentum. Color-coded is the mass density in the orbital plane (lower panel) and the x-z-plane (upper panel).

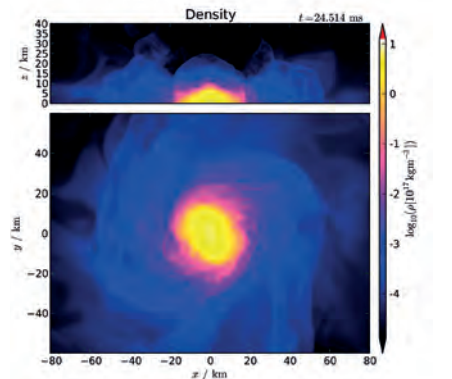


Fig. 2: Gravitational wave signal of a merger of two NS with 1.5 solar masses each, assuming the Lattimer-Swesty EOS. The first part of the signal is caused the inspiral phase, the next stage is due to a hypermassive neutron star created in the merger, which then collapses to a BH (vertical line) responsible for the remaining signal (ring-down).

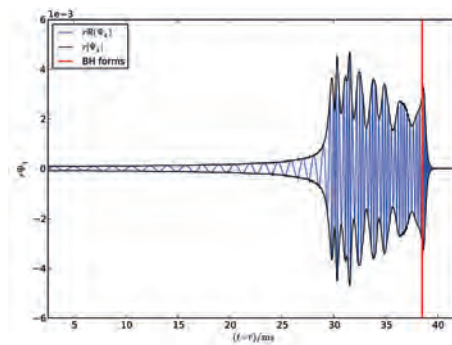
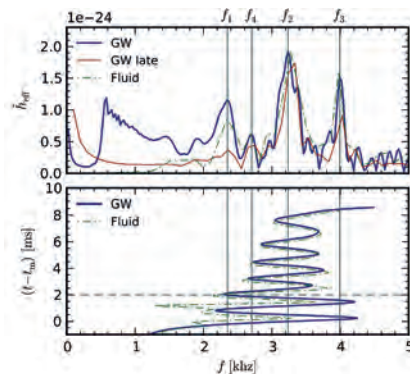


Fig. 3: (Top panel) Gravitational wave effective strain spectrum the gravitational signal shown in Figure 2. (Bottom panel) Evolution of the instantaneous frequencies. The instantaneous gravitational wave frequency is strongly modulated during the HMNS stage.



References

- W. Kastaun, F. Galeazzi (2015), On the Properties of Hypermassive Neutron Stars Formed in Mergers of Spinning Binaries, Phys. Rev. D 91, 064027.
- F. Galeazzi (2014), PhD thesis: Towards realistic modelling of relativistic stars, University of Potsdam, Max Planck for Gravitational Physics.

Orbital-Dependent Exchange-Correlation Energy Functionals

N. Noll, I. Vinograd, E. Engel

Fachgebiet Vielteilchentheorie, Goethe-Universität Frankfurt

In this phase of the project the exact exchange (EXX) of density functional theory was applied to both free-standing graphene and Si(111) slabs, using the plane-wave pseudopotential (PWPP) approach and a periodic repetition of the supercell containing the slab (in z-direction). It was shown^{1,2} that

(i) EXX-PWPP calculations for slabs in supercell geometry are basically feasible (in spite of the high cut-off energy for the plane-wave basis required for an accurate description of the exponential decay of the Kohn-Sham states into the vacuum between neighboring slabs),

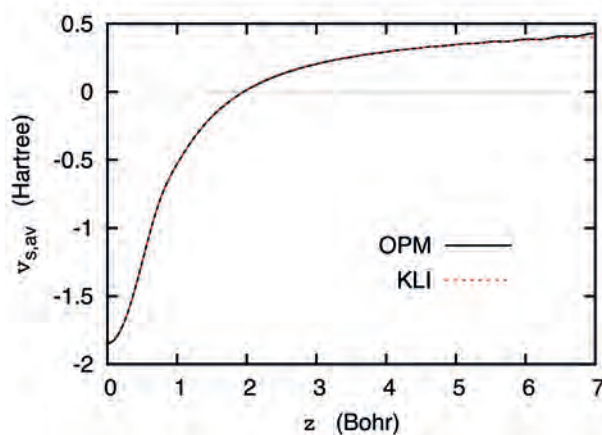
(ii) the Krieger-Li-lafrate approximation for the EXX potential³ reproduces the exact EXX potential v_x obtained by solution of the EXX integral equation⁴ (which is not feasible for large slab separation) quite accurately for moderate slab separation (Fig.1),

(iii) the width of the vacuum required for a decoupling of the slabs is only slightly larger than in the case of the local-density approximation (LDA) (in spite of the long-range EXX functional),

(iv) the corrugation of the EXX potential close to the surface of the slab is more pronounced than that of the LDA for v_x ,

(v) v_x shows an extended region, both far outside the surface of the slab and far from the middle of the vacuum region between the slabs, in which v_x behaves as $-e^2/z$, provided the width of the vacuum is chosen sufficiently large, and

(vi) this intermediate $-e^2/z$ behavior of v_x can be used for an absolute normalization of v_x and the total Kohn-Sham potential, which, in turn, allows the determination of the work function.



More recently, it was demonstrated in a Bachelor thesis⁵ that the EXX predicts elastic constants for graphene which are somewhat closer to experiment than their LDA counterparts.

Unrelated to the main theme of this project, PWPP calculations for those defects in hexagonal ice which trigger the melting process⁶ were performed⁷. In particular, it was shown that density functional calculations yield a much higher barrier for the formation of the 5-7 defect than the phenomenological TIP4P potential⁶.

References

1. E. Engel (2014), J. Chem. Phys. 140, 18A505.
2. E. Engel (2014), Phys. Rev. B 89, 245105.
3. J.B. Krieger, Y. Li, and G.J. lafrate (1990), Phys. Lett. A 146, 256.
4. J.D. Talman and W.F. Shadwick (1976), Phys. Rev. A 14, 36.
5. N. Noll, Bachelor Thesis (Frankfurt, 2014).
6. K. Mochizuki, S. Saito, and I. Ohmine (2013), Nature 498, 350.
7. I. Vinograd, Bachelor Thesis (Frankfurt, 2013).

Auf der Suche nach Materialien für zukünftige Anwendungen in Bereichen der Energiegewinnung und Elektronik stehen vor allem Materialsysteme im Fokus der Forschung, die sich durch ihre Nachhaltigkeit bezüglich Verfügbarkeit und Umweltverträglichkeit auszeichnen. In diesem Kontext steht auch die aktuelle Erforschung des Halbleitermaterials Kupferoxid. Dieses besitzt kristallographisch die Phasen Tenorit (Kupfer(II)-oxid), Cuprit (Kupfer(I)-oxid) und Paramelaconit. Alle drei Phasen lassen sich als Dünnschichten abscheiden¹ und zeigen aufgrund ihrer elektronischen Eigenschaften großes Potential für Anwendungen in verschiedenen Gebieten der Halbleitertechnologie. Diskutiert werden dabei vor allem Verwendungen in optoelektronischen Bauelementen wie zum Beispiel Leuchtdioden, als auch der Einsatz als nicht-toxisches Absorbermaterial in Solarzellen.

Voraussetzung für diese Anwendungen ist ein fundiertes Verständnis der elektronischen und optischen Eigenschaften. Am 1. Physikalisches Institut der Justus-Liebig Universität Gießen wird zurzeit in Kooperation zwischen experimentellen und theoretischen Forschern versucht, Kupferoxid diesbezüglich zu charakterisieren. Obwohl Kupferoxid schon lange bekannt ist, sind immer noch viele wichtige Eigenschaften insbesondere von Tenorit und Paramelaconit unzureichend geklärt. Von zentraler Bedeutung für viele Eigenschaften ist die elektronische Bandstruktur der Kristalle. Diese beschreibt das Verhalten der Elektronen in dem kristallinen Festkörper. Durch sie ist also bspw. festgelegt, ob es sich um ein leitendes, halbleitendes oder isolierendes Material handelt. Auch optische Eigenschaften des Festkörpers werden durch sie bestimmt. Sie legt fest, wie ein Material sich unter Lichteinstrahlung verhält und man kann verstehen, warum zum Beispiel verschiedene Farben des Lichts unterschiedlich stark absorbiert werden.

Physikalisch handelt es sich dabei um eine quantenphysikalische Eigenschaft des Festkörpers, die sich im Kristall aus der Wechselwirkung der Elektronen untereinander und mit den Atomkernen ergibt. Ziel dieses Projektes ist es, die Wechselwirkungen in Kupferoxid auf fundamentaler quantenmechanischer Ebene zu beschreiben und ab initio computergestützt zu berechnen, das heißt, ohne dass Parameter aus dem Experiment einfließen. Methodisches Mittel der Wahl ist die Dichtefunktionaltheorie, mit welcher sich das

komplexe Vielteilchenproblem so beschreiben lässt, dass es sich mit Hochleistungsrechnern berechnen lässt. Für die Rechnungen in diesem Projekt wurde dabei das Software-Paket VASP² eingesetzt.

Zunächst wurden die strukturellen Eigenschaften des Materialsystems untersucht, speziell die Frage, unter welchen Bedingungen bezüglich Druck und Temperatur die drei Kupferoxidphasen stabil existieren. Das berechnete Phasendiagramm stimmt sehr gut mit experimentellen Ergebnissen überein und deutet darauf hin, dass es sich bei der Mischphase Paramelaconit um eine metastabile Phase handelt.³ Bei der Berechnung der elektronischen Eigenschaften zeigte sich, dass die üblichen Standard-Näherungen bei Dichtefunktionaltheorie-Rechnungen nicht ausreichend sind, um die Bandstruktur korrekt zu beschreiben. Insbesondere die Bandlücke wird unter Verwendung dieser Näherungen falsch beschrieben. Um sie und damit die Eigenschaften als Halbleiter der drei Materialien korrekt zu beschreiben ist es daher nötig, rechnerisch zum Teil sehr aufwendige Verfahren einzusetzen. Verschiedene solcher Verfahren wurden im Rahmen des Projektes untersucht und miteinander verglichen. Die Ergebnisse weisen darauf hin, dass es sich bei Paramelaconit und Tenorit um Halbleiter mit indirekter Bandlücke im Bereich von 1,3 – 1,4 eV handelt, während Cuprit eine direkte Lücke von etwa 2 eV hat.

Zusammenfassend wurden im vorliegenden Projekt die strukturellen und elektronischen Eigenschaften des Halbleitermaterialsystems Kupferoxid mit Hilfe von computergestützten Rechnungen beschrieben. Unter Nutzung dieser Ergebnisse lassen sich weiterführend optische Eigenschaften wie z. B. das Absorptionsverhalten bestimmen.

Literatur

1. B.K. Meyer, A. Polity, D. Reppin, M. Becker, P. Hering, P. J. Klar, T. Sander, C. Reindl, J. Benz, M. Eickhoff, C. Heiliger, M. Heinemann, J. Bläsing, A. Krost, S. Shokovets, C. Müller, and C. Ronning (2012), Phys. Status Solidi B 249, 1487.
2. URL: www.vasp.at
3. M. Heinemann, B. Eifert, and C. Heiliger (2013), Phys. Rev. B 87, 115111.

p-Pb collisions at 5.02 TeV in the PHSD Transport Approach

V. Konchakovski, W. Cassing, V. Toneev
Institut für Theoretische Physik, JLU Gießen

Funding source
BMBF, LOEWE
center HIC for
FAIR

The Parton Hadron String Dynamics (PHSD) transport model that successfully describes the evolution of relativistic heavy-ion collisions from Alternating Gradient Synchrotron (AGS) to Relativistic Heavy-Ion Collider (RHIC) energies is employed for p-Pb collisions at collision energy 5.02 TeV and compared to recent experimental data from the Large Hadron Collider (LHC).

Ultra-relativistic nucleus-nucleus collisions provide an opportunity for exploring strongly interacting QCD matter under extreme conditions. The complexity of heavy-ion collisions is reduced essentially in the case of proton-nucleus collisions owing to the expected dominance of the initial state effects. The energy density E in local cells from PHSD is presented in the figure in the transverse ($x - y$) plane (a) as well as the reaction ($x - z$) plane (b) for a single p-Pb event at collision energy 5.02 TeV. Here we have selected an event that leads to about 300 charged hadrons in the final state. The time of this event ($t = 0.002$ fm/c) corresponds to the moment when the proton has passed the Lorentz contracted nucleus and is very small compared to the initial times considered for hydrodynamical models ($\sim 0.5 - 1$ fm/c).

Note that the energy density at this moment is huge due to the fact that the spacial volume is very tiny ($\sim 5 \cdot 10^{-3}$ fm³) and the full inelasticity of the previous inelastic reactions is incorporated. Due to the Heisenberg uncertainty relation this energy density cannot be specified as being due to 'particles' since the latter may form only much later on a timescale of their inverse transverse mass (in their rest frame). The maximal energy density in the p-Pb reaction (at $t = 0.002$ fm/c) is comparable with that in heavy-ion collisions at the LHC energy for local cells due to fluctuations of the initial conditions in PHSD (in case of a high spatial resolution). Note that the formed high energy density "tube" is strongly Lorentz contracted along the collision axis z and is reminiscent of the energy density in a 'string' that stretches in the longitudinal direction with increasing time.

In (Konchakovski et al.)¹ we have focused on the question of initial state dynamics, i.e. if the initial state might be approximated by a superposition of independent nucleon-nucleon collisions or should be considered as a coherent gluon field as predicted within the color glass condensate (CGC) framework.

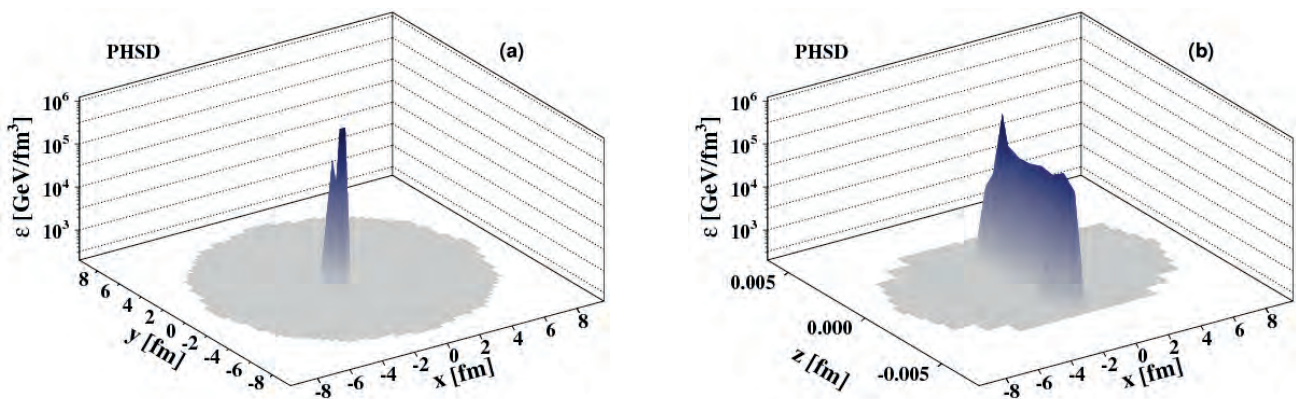


Figure:
 $x - y$ (a) and $x - z$ (b) projections of the energy density in a single p-Pb collision at collision energy 5.02 TeV at the time when the proton has passed through the Pb-nucleus ($t \approx 0.002$ fm/c). The region occupied by the Pb nucleus is also shown by the shaded area.

Reference

1. V.P. Konchakovski, W. Cassing and V.D. Toneev (2014), p-Pb collisions at 5.02 TeV in the Parton-Hadron-String-Dynamics transport approach, J.Phys. G41, 105004.

In theoretical nuclear structure physics one tries to explain the properties of nuclei that have already been measured by experiment, as well as to predict the yet unknown attributes of, e.g., exotic nuclei. The theoretical interpretation of known qualities serves the purpose of validating the accuracy of the respective theories and models, while the prediction of so far unexplored characteristics is important to obtain information about the properties of nuclei that are not – or only with great effort – accessible to an experimental investigation. Additionally, theoretical predictions also provide information for the design of future experiments.

The randomphase approximation (RPA) provides a framework, which allows for the investigation of excited collective states and their transition strengths. While other methods such as the no-core shell model (NCSM) or the coupled-cluster theory may yield results which are superior from a methodological perspective to those from RPA, this improved accuracy comes at great computational cost, limiting such calculations to low- and medium-mass nuclei. The RPA on the other hand allows for a computationally reasonable description of excited collective states and their structure for all nuclei across the nuclear chart. Thus, the RPA provides a theoretical approach to a series of observables which are experimentally well accessible but cannot be reached via ab initio methods such as the NCSM. Our research focuses on different electric multipole transitions, which are also accessible to an experimental analysis.

For a long time, the only RPA calculations that have been conducted were on the level of two-body (2B) forces or phenomenological three-body (3B) forces. However, in recent years the advances in theoretical and computational methods have made it possible to also include full 3B forces. In our research, we extended the existing RPA code to full 3B forces, as well as to normalordered (NO) Hamiltonians for closed-shell nuclei. The input for our calculations are not phenomenological but chiral NN+3N interactions, the same ones as are used in NCSM. We were able to perform the corresponding

calculations for a series of nuclei and found a significant improvement in the agreement between our theoretical results and the ones obtained from experiment. An extension of the standard RPA is the Second RPA (SRPA), which we extended to normal-ordered 3B forces. Here we found an even better agreement between theory and experiment. In the past, the theoretical predictions for transitions often were at much higher energies than the experimental results. Thanks to these advances, in many cases the theoretical predictions are now in reasonable agreement with experiment, validating both the underlying interaction as well as the RPA.

However, this increased accuracy of our predictions comes at a great computational cost. We already put a lot of effort into the development of our models as well as our codes to ensure that they use as little resources as possible. Still, for larger systems the runtime, especially for models such as the SRPA, increases tremendously, even when using parallelization (OpenMP and MPI). In order to be able to improve the predictions of systems we already investigated and to push to even larger ones, we need the continued support of high performance computers.

Funding source
SFB 634,
HIC for FAIR

Das „Radiofrequenz Ionentriebwerk“ (RIT) gehört zu der Klasse der elektrischen Triebwerke. Bei dieser Klasse wird Treibstoff nicht verbrannt, sondern ionisiert, d.h. elektrisch aufgeladen. Dies geschieht meist in einer Plasma-Gasentladung. Hierbei ersetzt der Ionisator die Brennkammer herkömmlicher chemischer Raketen. Als Treibstoff verwendet man in der Regel das schwere Edelgas Xenon. Die ionisierten Atome können nun durch starke elektrische Felder auf hohe Austrittsgeschwindigkeiten beschleunigt und zum Antriebsstrahl gebündelt werden. Der Ionenbeschleuniger tritt hierbei an die Stelle einer konventionellen Raketendüse. Damit erreicht man 10- bis 20-mal höhere Strahlgeschwindigkeiten als mit den besten chemischen Triebwerken. Bei gegebenem Antriebsbedarf spart man dadurch erhebliche Treibstoffmengen ein und kann so ein Mehr an Nutzlast transportieren. Alternativ hierzu erreicht man entsprechend höhere Fluggeschwindigkeiten der Rakete bzw. kürzere Flugzeiten bis zum Ziel.

Da der Treibstoff nur als Rückstoßmasse, aber nicht zugleich als Energieträger (wie bei den chemischen Raketen) dient, benötigt ein elektrisches Triebwerk eine eigene Energieversorgung im Weltraum. Als Energiequellen werden im Allgemeinen Solarzellen benutzt. Satelliten können aus einer niedrigen Erdumlaufbahn in die geostationäre Bahn „aufspiralt“ werden, was die Verwendung einer kleineren und billigeren Startrakete ermöglicht. Die Kompensation von Störkräften auf den Satelliten durch Ionentriebwerke spart erhebliche Treibstoffmengen ein. Solar-elektrische Raumsonden sind hinsichtlich Nutzlastkapazität und Missionsdauer den konventionell angetriebenen Sonden umso überlegen, je schwieriger und anspruchsvoller ein Flugauftrag ist. Schließlich verlangt eine neue Generation wissenschaftlicher Satelliten und Sonden derart präzise Positions- und Lagekontrollen, dass Ionentriebwerke konkurrenzlos sind.

Die Effizienz eines RITs wird an den zwei Faktoren, Treibstoffeffizienz und Leistungseffizienz, gemessen. Die Treibstoffeffizienz gibt an wie viel Prozent des Treibstoffes tatsächlich ionisiert wird, denn nur dieser Anteil kann mit den elektrischen Feldern beschleunigt werden und trägt zum Schub bei. Die Leistungseffizienz hingegen besagt, wie viel Energie für die Ionisierung

benötigt wird. Sowohl die Treibstoffmenge als auch die zur Verfügung stehende Energie ist aus Kostengründen auf einem Satelliten stark begrenzt. Weitere Effizienzsteigerungen sind daher von großer Bedeutung. Diese können jedoch nur erreicht werden durch ein sehr gutes Verständnis der physikalischen Vorgänge in dem Ionisator. Da die Messung dieser Eigenschaften nur schwer realisierbar ist und zusätzlich eine Störung des Experiment darstellen, ist eine Simulation des Triebwerks notwendig.

Hierfür wurde an der Justus-Liebig-Universität Gießen das Plasmasimulationsprogramm „PlasmaPIC“ entwickelt. Dieses Programm basiert auf der „particle in cell“ – Methode (PIC). Hierbei wird der zu simulierende Bereich in Zellen unterteilt und die Bewegung ausgewählter Atome des Treibstoffes durch diese Zellen bestimmt. In einer Simulation des kleinsten RITs, das lediglich ein Zentimeter Durchmesser hat, müssen bereits Milliarden von Bewegungsbahnen bestimmt werden. Mit nur einem CPU-Kern würde die Berechnung über ein Jahr dauern. Dank einer sehr effektiven Parallelisierung in „PlasmaPIC“ ist es möglich diese Simulationszeit durch den Einsatz von 400 CPU-Kernen auf einen Tag zu reduzieren.

Ein weiteres Highlight von „PlasmaPIC“ ist die vollwertige dreidimensionale Berechnung des Triebwerks. Dies ermöglicht, beliebige Geometrien eines RITs in „PlasmaPIC“ zu importieren und deren Einfluss zu simulieren. Auf diese Weise können neue Designs schnell und effizient getestet werden, ohne diese erst herstellen zu müssen.

Mit dem hier entwickelten Programm „PlasmaPIC“ wird eine räumliche und zeitliche Auflösung physikalischer Eigenschaften in dem Triebwerk erreicht, die mit einer Messung heutzutage nicht erreichbar ist. „PlasmaPIC“ ermöglicht dadurch ein ganz neues Verständnis der physikalischen Vorgänge und eröffnet einen neuen Weg für die Optimierung der RITs.

Das Verhalten von Quarks und Gluonen wird durch die starke Wechselwirkung bestimmt, die theoretisch durch die Quantenchromodynamik (QCD) beschrieben wird. Die Elementarteilchen können in verschiedenen Formen auftreten. In „normaler“ Materie sind sie zu Neutronen und Protonen im Atomkern und zu weiteren Hadronen wie beispielsweise Pionen verbunden. Bei extrem hohen Temperaturen oder Dichten bildet sich allerdings ein Quark-Gluon-Plasma, wie es auch kurz nach dem Urknall existiert hat. Der Zustand von stark wechselwirkender Materie in Abhängigkeit von Temperatur und Dichte wird im Phasendiagramm zusammengefasst. Experimentell wird das Phasendiagramm der QCD zumeist durch hochenergetische Schwerionenstöße untersucht (z. B. am LHC, demnächst auch bei FAIR).

Monte-Carlo-Simulationen im Rahmen der Gittereichtheorie bieten einen wichtigen nicht-störungstheoretischen Zugang zur Untersuchung des QCD-Phasendiagramms. Dabei wird die vierdimensionale Raum-Zeit auf einem Gitter diskretisiert. Auf den Gitterpunkten werden dann Bewegungsgleichungen für Quarks und Gluonen gelöst. Aus den Ergebnissen von Simulationen bei verschiedenen Gitterabständen kann man zum Kontinuumslimit extrapolieren. Der Aufwand der Simulationen ist dabei abhängig von der verwendeten Gittergröße und den gewählten Parametern. Der interessante Fall von kleinen Quarkmassen verlangt besonders lange Rechnungen.

Aufgrund des sogenannten Fermion-Vorzeichenproblems sind allerdings keine solchen QCD-Simulationen bei endlicher Dichte möglich. Ein Ausweg bietet die Untersuchung von QCD mit zwei statt drei Farbfreiheitsgraden. Diese QCD-artige Theorie hat kein Vorzeichenproblem. Zwei-Farb-QCD unterscheidet sich in manchen Punkten zur gewöhnlichen QCD. So sind beispielsweise Baryonen Bosonen. Außerdem ist die chirale Symmetriegruppe erweitert und es ergibt sich dadurch ein anderes Brechungsmuster der chiralen Symmetrie. Dennoch ist die Simulation von Zwei-Farb-QCD ein wichtiges Mittel zur Entwicklung und zur Kontrolle von Methoden bei endlicher Baryonendichte.

Bei der Diskretisierung der Bewegungsgleichungen gibt es gewisse Wahlfreiheiten, die im Kontinuumsfall äquivalent werden. Wir nutzen den Staggered-Fermion-Formalismus für zwei leichte Quarksorten und eine (tree-level) verbesserte Eichwirkung. Der Rational Hybrid Monte Carlo (RHMC) Algorithmus zur Generierung von Gitterkonfigurationen und die Messung von diversen Observablen ist vollständig in CUDA implementiert, sodass die Rechenleistung der NVIDIA-Grafikkarten des Lichtenberg-Clusters genutzt werden kann. Zentrales Element ist ein Conjugate Gradient-Modul zur Matrixinversion.

In einem ersten Projekt wurden bei mehreren großen Quarkmassen das effektive Polyakov-Loop-Potential und Polyakov-Loop-Korrelatoren bestimmt. Dieses Potential kann als Input für Modellrechnungen und funktionale Methoden genutzt werden. Aus dem Vergleich mit Rechnungen in der reinen Eichtheorie (Theorie ohne Quarks) lässt sich die Rückkopplung der Quarks auf die Eichfreiheitsgrade (Gluonen) bestimmen. Zudem dienen die Ergebnisse als Vergleichspunkt für effektive Feldtheorie, die ebenfalls in der Gruppe behandelt wird.

Als Vorarbeiten zu Untersuchungen bei endlicher Dichte haben wir in einem zweiten Projekt zunächst Simulationen entlang der Temperaturachse bei verschwindender Dichte durchgeführt. Von hohem Interesse ist das Verhalten der Ordnungsparameter für die chirale Restoration und des Deconfinement-Übergangs als Funktion der Temperatur. Beide Übergänge treten als kontinuierliche Crossover auf. Für kleine Quarkmassen wurde das Skalierungsverhalten des chiralen Kondensats und der chiralen Suszeptibilität und daraus kritische Exponenten bestimmt. Weiter wurden Mesonenmassen berechnet.

Für genauere Aussagen sind noch Rechnungen mit größeren Gittern nötig. In der Zukunft sind außerdem Simulationen bei endlicher Dichte geplant.

Literatur

- D. Scheffler, C. Schmidt, D. Smith, and L. von Smekal (2013), Chiral restoration and deconfinement in two-color QCD with two flavors of staggered quarks, PoS (LATTICE 2013) 191.
- P. Scior, D. Scheffler, D. Smith, and L. von Smekal (2014), Effective SU(2) Polyakov Loop Theories with Heavy Quarks on the Lattice, PoS (LATTICE 2014) 173.

Projektförderung
HIC for FAIR,
BMBF

— Simulationsrechnungen zum zukünftigen PANDA Experiment

R. Novotny, H.G. Zaunick, A. Pitka, C. Rosenbaum, S. Diehl, K.T. Brinkmann

Fachgebiet Experimentalphysik, JLU Gießen

Projektförderung
BMBF,
HIC for FAIR

PANDA ist einer der geplanten Detektoren an der im Bau befindlichen FAIR-Forschungseinrichtung am GSI Helmholtzzentrum für Schwerionenforschung bei Darmstadt.

Forschungsobjekt ist dabei nahezu ausschließlich die starke Wechselwirkung. Diese ist einerseits für die anziehende Kraft zwischen Quarks verantwortlich, in komplexerer Form bindet sie jedoch auch die Protonen und Neutronen in Atomkernen. Vermittelt wird diese durch Gluonen (engl. „Glue“ - Kleber), ähnlich wie Photonen die elektromagnetische Kraft zwischen geladenen Teilchen vermitteln.

Gebundene Zustände, die von der starken Wechselwirkung gebildet werden, unterscheidet man nach Bindungszuständen aus drei Quarks (Baryonen) und solche aus einem Quark und einem Antiquark (Mesonen). Abgesehen von ihren bekanntesten Vertretern (Proton und Neutron) sind diese Zustände ausnahmslos sehr kurzlebig.

Zum Studium solcher Zustände sollen bei PANDA kontrolliert Antiprotonen (die Antiteilchen des Protons) mit Wasserstoff und schweren nuklearen Targets zur Reaktion gebracht werden. Dies ermöglicht über die Analyse des Anregungsspektrums der entstehenden Teilchen eine Untersuchung der starken Wechselwirkung, ähnlich wie eine Untersuchung des Anregungsspektrums des Wasserstoffatoms Aufschluss über die zugrunde liegende Wechselwirkung zwischen Proton und Elektron gibt.

Geplant sind aber auch Untersuchungen zum Verhalten von Mesonen und Baryonen in Kernmaterie und die Suche nach gebundenen Zuständen die ausschließlich aus Gluonen bestehen - sogenannte Glueballs.¹ Gießener Beiträge zur technischen Entwicklung des PANDA-Detektors beziehen sich größtenteils auf den Mikro-Vertex-Detektor (Ortsmessung), das Elektromagnetische Kalorimeter (Energiesmessung) und die Cherenkov-Detektoren (Teilchenidentifikation).²

Die Verwendung des Gießener Rechenclusters Skylla erlaubt aufwendige Computersimulationen, die einerseits zur technischen Optimierung der jeweiligen Detektorkomponenten dienen, aber auch Machbarkeitsstudien bezüglich spezieller Reaktionskanäle des angestrebten physikalischen Programms ermöglichen.

Simulationen zum Elektromagnetischen Kalorimeter: Mit dem Elektromagnetischen Kalorimeter (EMC) bestehend aus ca. 15.000 Bleiwolframat Kristallen unterschiedlicher Geometrien verwendet bei -25°C sollen Photonen und Elektronen im gesamten Raumwinkel nachgewiesen werden.³ Für den Detektor sind sehr detaillierte Leistungsfähigkeiten und Effizienzen über einen großen Energiebereich von 10 MeV bis zu 15 GeV vorgesehen. In der Phase der Forschung und Entwicklung des Detektors sind daher Simulationen des gesamten Detektors nötig, um die Erreichbarkeit dieser Ziele zu überprüfen. In einer Studie werden daher am Targetpunkt ausschließlich Photonen erzeugt und die Detektoreffizienz, d.h. das Verhältnis von erzeugten und detektierten Photonen, überprüft. Des Weiteren werden Energie-, Positions- und Zeitauflösung des Elektromagnetischen Kalorimeters aus diesen Simulationen bestimmt und mit experimentellen Tests von Prototypen verglichen.

Antiteilchen-Teilchen-Mischung von D-Mesonen: Seit den 1960er Jahren ist bekannt, dass sich elektrisch neutrale Mesonen in ihre Antiteilchen umwandeln können.⁴ Abhängig von der Lebensdauer eines Teilchens lassen sich dabei periodische Oszillationen zwischen Teilchen und Antiteilchen beobachten. Von besonderem Interesse sind derartige Systeme auch, weil sich in ihnen eine kleine Verletzung der Teilchen-Antiteilchen Symmetrie (CP-Erhaltung) zeigt. Die im Gang befindliche Studie beschäftigt sich mit der prinzipiellen Messbarkeit der CP-Verletzung an schweren D-Mesonen am PANDA Detektor.

Literatur

1. PANDA Kollaboration (2009), Physics Performance Report for PANDA – Strong Interaction Studies with Antiprotons.
2. PANDA Kollaboration (2005), Full Technical Progress Report.
3. PANDA Kollaboration (2008), EMC Technical Design Report.
4. J.H. Christenson, J.W. Cronin, V.L. Fitch, and R. Turlay (1964), Regeneration of K1 Mesons and the K1-K2 Mass Difference, Physical Review, 140(1B): 74-84.

Spectral Functions and Transport Coefficients of Matter under Extreme Conditions

R.A. Tripolt, J. Wambach, L. v. Smekal

Institut für Theoretische Kernphysik, TU Darmstadt

A few milliseconds after the Big Bang, the universe was about 200,000 times hotter than the core of the sun, so that matter existed in the so-called quark-gluon plasma phase with quarks and gluons interacting as described by Quantum Chromodynamics (QCD). Such extreme conditions of matter are nowadays being recreated in heavy ion collision experiments as carried out for example at CERN, the Brookhaven National Laboratory (BNL), or the future Facility for Antiproton and Ion Research (FAIR) where extremely hot and dense matter will be investigated with the Compressed Baryonic Matter (CBM) experiment.

In our project, we use effective models of QCD, the theory of strong interactions, to investigate the properties of such hot and dense matter. In particular, our aim is to calculate spectral functions, which contain information on particle masses, life-times, and decay channels as well as transport coefficients like the shear viscosity of hot and dense matter.

Our calculations are based on the Functional Renormalization Group (FRG) as a non-perturbative continuum field theory framework for originally Euclidean correlation functions. The calculation of spectral functions from these Euclidean correlations is normally a numerically ill-posed inverse problem such as an inverse Laplace transform. We have developed a new approach based on analytic continuation of the FRG flow equations to avoid this problem.^{1,2} With this new method we are now able to calculate the energy and momentum dependence of mesonic spectral functions, cf. Fig. 1, which are needed as input to compute transport coefficients like the shear viscosity of the corresponding hot and dense medium in a next step.

The obtained spectral functions show many interesting features which can be interpreted in terms of different in-medium particle creation and annihilation processes. The sigma spectral function for example, cf. Fig. 1, shows a non-vanishing regime at energies larger than two times the pion mass, where a sigma particle can decay into two pions. At energies smaller then the corresponding

spatial momentum we also find non-vanishing values for the spectral function, since here space-like processes like the emission or absorption of a particle can occur. The pion spectral function shows a similar behavior in the space-like regime and for higher energies, where a pion can for example decay into a sigma meson and a pion or into a quark anti-quark pair. At small time-like energies we see that the pion spectral function exhibits a peak that determines its mass and which is Lorentz-boosted to higher energies for larger spatial momenta.

As an outlook, we aim at further improving our framework, for example by employing the Polyakov quark-meson model which takes important confinement properties into account, and by studying the scale-dependence of wave function renormalization factors which will allow us to also calculate quark spectral functions.

Our results were obtained with MPI-code on typically 256 CPU cores in parallel on the Loewe-CSC at Frankfurt University and the Lichtenberg high-performance computer at TU Darmstadt.

Funding source
HIC for FAIR,
H-QM

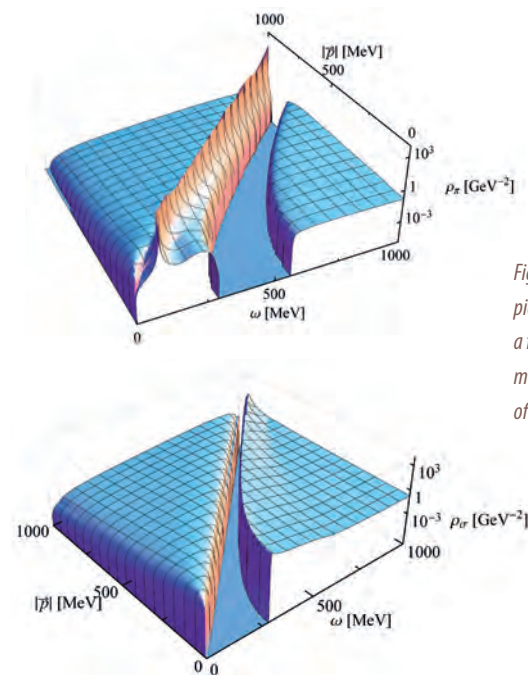


Fig. 1: Spectral functions of pion and sigma meson as a function of energy and momentum at a temperature of $T=100$ MeV.

References

1. R.A. Tripolt, N. Strodthoff, L. von Smekal, and J. Wambach (2014), Spectral functions for the quark-meson model phase diagram from the functional renormalization group, Phys. Rev. D 89, 034010.
2. R.A. Tripolt, L. von Smekal, and J. Wambach (2014), Flow equations for spectral functions at finite external momenta, Phys. Rev. D 90, 074031.

SPP 1386 Nanostrukturierte Thermoelektrika - Wärmetransport in Silizium auf der Nanoskala

M. Bachmann, M. Giar, C. Heiliger

I. Physikalisches Institut, JLU Gießen

Projektförderung
DFG

Ein limitierender Faktor für die weitere Miniaturisierung elektronischer Halbleiterbauelemente auf der Nanoskala ist die starke lokale Wärmeentwicklung unter Betriebsbedingungen und verminderter Wärmetransport durch komplexe Geometrien der Bauteile. Vor diesem Hintergrund ist ein grundlegendes Verständnis der dem Wärmetransport zugrunde liegenden Prozesse unbedingt notwendig. Ein Ansatz hierfür gelingt über eine quantenmechanische Betrachtung der Wärmetransportprozesse auf einer atomaren Größenskala. Wärmetransportprozesse auf dieser Größenskala werden durch Schwingungen der Atome des Festkörpers um ihre Gleichgewichtslage – Phononen – bestimmt. Insbesondere ist hier die computergestützte Umsetzung eines solchen Wärmetransportmodells hilfreich. Da Silizium nach wie vor das gängige Element für die Entwicklung von Halbleiterbauelementen darstellt – insbesondere auf dem Feld der Computerchips – haben wir uns in unseren Betrachtungen auf dieses Element beschränkt. Die in diesem Projekt angestellten Untersuchungen fallen auch in den Rahmen des Schwerpunktprogrammes SPP 1386 Nanostrukturierte Thermoelektrika der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG).

Zur Umsetzung des Wärmetransportmodells ist die Berechnung einiger Daten vorab notwendig. Hauptbestandteil des Modells sind anharmonische Kraftkonstanten, welche für Silizium berechnet werden. Die anharmonischen Kraftkonstanten beschreiben die Wechselwirkung der Phononen untereinander. Für die Berechnung derselben greifen wir auf quantenmechanische ab-initio Methoden zurück, welche ohne experimentelle Werte zur Berechnung physikalischer Größen auf Basis der Dichtefunktionaltheorie (DFT) auskommen. In diesem konkreten Fall sind die Daten für Silizium mit dem Vienna ab-initio Simulation Package (VASP) gewonnen worden, einem kommerziellen Softwarepaket, welches maßgebend auf dem Gebiet der computerbasierten Umsetzung von ab-initio Methoden ist. Die anharmonischen Kraftkonstanten sind u.a. wichtig für die Berechnung von Lebensdauern der atomaren Schwingungszustände im Festkörper. Als Test für die für Silizium berechneten Daten haben wir diese

Lebensdauern berechnet und gute Übereinstimmung mit in der Literatur vorhandenen Daten erhalten. Die zugrunde liegende Methodik für die Berechnung der anharmonischen Kraftkonstanten und die damit erhaltenen Ergebnisse wurden auf der Jahrestagung der Deutschen Physikalischen Gesellschaft (DPG) der Sektion Kondensierte Materie im Frühjahr 2013 in Regensburg präsentiert. Im Rahmen des SPP 1386 Schwerpunktprogrammes sollen die entwickelten Methoden verfeinert und insbesondere in Bezug auf die Berechnung der Wärmetransporteigenschaften von komplizierten Halbleiterbauelementen auf Silizium-Basis ausgebaut werden. Die theoretische Betrachtung des Wärmetransportes auf der Nanoskala basiert auf der Methode der Nichtgleichgewichts-Greenschen-Funktionen, einer Theorie, welche in ihrer computergestützten Umsetzung sehr komplex ist und daher bis dato eher selten Anwendung gefunden hat. Wir haben eine Umsetzung dieser Methode in einer Dimension entwickelt und die damit erhaltenen Ergebnisse auf dem Doktoranden Workshop des SPP 1386 Schwerpunktprogrammes 2013 in Heidelberg präsentiert. Bereits innerhalb eines vereinfachten Modells in einer Dimension lassen sich bereits qualitativ Ergebnisse erhalten, welche auch im allgemeinen, dreidimensionalen Fall zu erwarten sind.

Ziel ist es, in Zukunft die bisher entwickelte Methodik für den eindimensionalen Fall auf den drei Dimensionen zu erweitern. Für den wechselwirkungsfreien Fall verfügen wir bereits über eine Software.¹ Hierbei ist es insbesondere von Bedeutung, den wesentlich komplizierteren dreidimensionalen Fall rechnerisch effizient umzusetzen, was nur unter geschickter Verwendung hochparalleler Hochleistungsrechner geschehen kann. Besonders wichtig ist daher die Einbettung des Wärmetransportformalismus in einen parallelen Algorithmus, welcher auf einem Hochleistungsrechner gut umsetzbar ist.

Literatur

1. M. Bachmann, M. Czerner, S. Edalati-Boostan, and C. Heiliger 82912, European Physical Journal B 85, 146.

Biological matter, as well as any complex form of inanimate matter, consists of many different components linked by numerous, different interactions. Important efforts in deepening of our molecular-level understanding of biological systems and their dynamical behavior concern the origin, nature and evolution of various complex molecular systems and processes, as well as the emergence of new features, properties, functions in the systems with increasing their complexity. On the meso- and nanoscales, the physics and chemistry of biological macromolecules and atomic clusters typically deal with such behavior. Many examples of the emergence of qualitatively new features can be quoted, e.g. the development of new collective properties when going from small molecules to large clusters or the cluster aggregation on surfaces leading to the appearance of fractally shaped morphologies.¹ The fractal morphologies, being emerged in dynamical systems on the nanoscale, remain characteristic for many systems, including biological ones, at practically all larger scales, and are present in practically all living systems.

The project „Structure and dynamics of Meso-Bio-Nano systems“ was carried out under the supervision of Prof. Dr. Andrey V. Solov'yov at the Frankfurt Institute for Advanced Studies. The project was devoted to investigation of structure formation and dynamics of animate and inanimate matter at the micro- and nanometer scales. There are many examples of complex many-body systems of micro- and nanometer scale size exhibiting

unique features, properties and functions. These systems may have very different natures and origins, e.g., atomic and molecular clusters and nanoparticles,^{2,3} nanostructures,⁴ biomolecules,⁵ and mesoscopic systems.^{6,7} A detailed understanding of the structure and dynamics of these systems on the nanometer scale is a difficult and fundamental task, the solution of which is necessary in numerous applications of nano- and biotechnology, material science^{8,9} and medicine.¹⁰ Although mesoscopic, nano- and biomolecular systems differ in their nature and origin, a number of fundamental problems are common to all of them. Seeking answers to the fundamental questions is at the core of a field entitled Meso-Bio-Nano (MBN) Science which is a new interdisciplinary field that lies at the intersection of physics, chemistry, and biology.

The MBN Science bundles up several traditional disciplines such as theoretical atomic and molecular physics, condensed matter physics, solid state physics, quantum physics, and chemistry, classical, quantum, and statistical mechanics, physical kinetics, molecular biology, biochemistry, and biophysics. A detailed theoretical description and complete understanding of MBN systems and phenomena with their involvement can only be achieved by utilizing a wide range of theoretical approaches and methods known from all these disciplines combined with advanced computational techniques and with the use of powerful computers.

Funding source

FP7 Project “Crystalline Undulator: Theory and Experiment (CUTE)”, COST Action MP1002 “Nanoscale Insights into Ion-Beam Cancer Therapy (Nano-IBCT)”, FP7 Project “Theoretical analysis, design and virtual testing of biocompatibility and mechanical properties of titanium-based nanomaterials (ViNaTi)”

References

1. I.A. Solov'yov, N. Solov'yov, A. Kebaili, N. Masson, and C. Brechignac (March 2014), Thermally induced morphological transition of silver fractals, *Physica Status Solidi B*, 251 (3): 609-622.
2. A.V. Yakubovich, G. Sushko, S. Schramm, and A.V. Solov'yov (July 2013), Kinetics of liquid-solid phase transition in large nickel clusters, *Physical Review B*, 88 (3): 035438-(1-9).
3. A.V. Verkhovtsev, A.V. Korol, and A.V. Solov'yov (October 2013), Quantum and classical features of the photoionization spectrum of C₆₀, *Physical Review A*, 88 (4): 043201-(1-8).
4. P. Moskovkin, M. Panshenskov, S. Lucas, and A.V. Solov'yov (July 2014), Simulation of nanowire fragmentation by means of kinetic Monte Carlo approach: 2D case, *Physica Status Solidi B*, 251 (7): 1456-1462.
5. S.N. Volkov, E.V. Paramonova, A.V. Yakubovich, and A.V. Solov'yov (January 2012), Micromechanics of base pair unzipping in DNA duplex, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 24 (3): 035104-(1-6).
6. G.B. Sushko, V.G. Bezchastnov, I.A. Solov'yov, A.V. Korol, W. Greiner, and A.V. Solov'yov (November 2013), Simulation of ultra-relativistic electrons and positrons channeling in crystals with MBN Explorer, *Journal of Computational Physics*, 252: 404-418.
7. G.B. Sushko, A.V. Korol, W. Greiner, and A.V. Solov'yov (June 2013), Sub-GeV electron and positron channeling in straight, bent and periodically bent silicon crystals, *Journal of Physics: Conference Series*, 438: 012018-(1-11).
8. A.V. Yakubovich, A.V. Verkhovtsev, M. Hanauske, and A.V. Solov'yov (August 2013), Computer simulation of diffusion process at interfaces of nickel and titanium crystals, *Computational Materials Science*, 76: 60-64.
9. A.V. Verkhovtsev, G.B. Sushko, A.V. Yakubovich, and A.V. Solov'yov (October 2013), Benchmarking of classical force fields by ab initio calculations of atomic clusters: Ti and Ni-Ti case, *Computational and Theoretical Chemistry*, 1021: 101-108.
10. E. Surdutovich, A.V. Yakubovich, and A.V. Solov'yov (February 2013), Biodamage via shock waves initiated by irradiation with ions, *Scientific Reports*, 3: 1289-(1-6).

Thermal Transport Properties in Magnetic Tunnel Junctions

M. Czerner, C. Franz, M. Bachmann, C. Heiliger
I. Physikalisches Institut, JLU Gießen

Funding source

DFG SPP 1538
„SpinCaT“, DFG grant
HE 5922/1-1

The new research field of spin caloritronics is the combination of two research fields: magnetism (spintronics) and thermoelectrics. In the field of spintronics, magnetic tunnel junctions (MTJs) are already used in applications such as read heads in hard disks and storage elements in magnetic random access memories. The tunneling magneto resistance effect (TMR) is exploited in both applications. A MTJ consists of a barrier sandwiched between two ferromagnetic layers, a free layer, and a fixed layer (Fig. 1).⁸

Our research group predicted theoretically¹ that the Seebeck effect (the creation of an electric field by a temperature gradient in a material) changes with a change of the magnetic orientation of the ferromagnetic leads relative to each other, similar to the tunneling magneto resistance effect (TMR). Our prediction to this tunneling

magneto-Seebeck (TMS) effect was confirmed experimentally.² Furthermore we investigated the role of the interface termination³ and of the ferromagnetic lead material⁵ on the TMS and the angular dependence of the TMS,⁷ which were confirmed experimentally.^{2,7,9} While the TMS is the influence of the spin-dependent transport properties (TMR) on the thermoelectric properties (Seebeck), one can also consider the reversed case. In this way the thermoelectric effect influences the spintronic properties. This effect is called thermal spin-transfer torque (TSTT), where the idea is that the free layer can be switched just by applying a temperature gradient without any bias voltage.

We showed with our calculations that the TSTT in MgO-based MTJs is much smaller than the bias driven ones and therefore large temperature gradients are needed.⁸ For this reason very thin barriers (3 monolayers) are required to achieve thermal switching. We showed that one can optimize the TSTT by tuning the material decomposition of the ferromagnetic leads.⁴ For all calculations we used our own code by means of a full-relativistic Korringa-Kohn-Rostoker Greensfunction method (KKR) which can handle non-collinear magnetism. Additionally the code is extended to describe alloys and can calculate several transport properties such as transmission, spin-transfer-torque and magneto-Seebeck. The required vertex corrections for the calculation of the transport properties for alloys are implemented as well.⁶

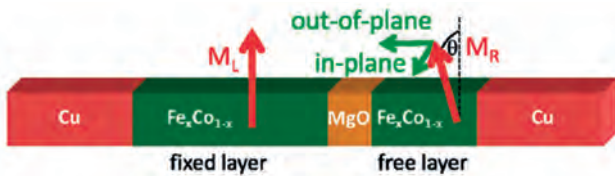


Fig. 1: Sketch of the MTJ. The barrier (3 monolayers MgO) is sandwiched by two ferromagnetic layers (Fe_xCo_{1-x}) and connected to semi-infinite Cu leads, which are in the bcc-Fe structure. One ferromagnetic layer is the fixed layer (10 monolayers), whereas the other is the free layer (5 monolayers). The relative angle between the two magnetizations M_L and M_R of the two layers is given by θ . The torque acting on the magnetization of the free layer can be decomposed into an in-plane and out-of-plane component.

References

1. M. Czerner, M. Bachmann, and C. Heiliger (2011), Spin caloritronics in magnetic tunnel junctions: Ab initio studies, Phys. Rev. B 83, 132405.
2. M. Walter, J. Walowski, V. Zbarsky, M. Münzenberg, M. Schäfers, D. Ebke, G. Reiss, A. Thomas, P. Peretzki, M. Seibt, J. S. Moodera, M. Czerner, M. Bachmann, and C. Heiliger (2011), Seebeck Effect in Magnetic Tunnel Junctions, Nature Materials 10, 742.
3. M. Czerner and C. Heiliger (2012), Influence of interface termination on the magneto-Seebeck effect in MgO based tunnel junctions, J. Appl. Phys. 111, 07C511.
4. J.C. Leutenantsmeyer, M. Walter, V. Zbarsky, M. Münzenberg, R. Gareev, K. Rott, A. Thomas, G. Reiss, P. Peretzki, H. Schuhmann, M. Seibt, M. Czerner, and C. Heiliger (2013), Parameter space for thermal spin-transfer torque, SPIN 3, 1350002.
5. C. Heiliger, C. Franz, and M. Czerner (2013), Ab initio studies of the tunneling magneto-Seebeck effect: Influence of magnetic material, Phys. Rev. B 87, 224412.
6. C. Franz, M. Czerner, and C. Heiliger (2013), Implementation of non-equilibrium vertex corrections in KKR: transport through disordered layers, J. Phys.: Condens. Matter 25, 425301.
7. C. Heiliger, M. Czerner, N. Liebing, S. Serrano-Guisan, K. Rott, G. Reiss, and H.W. Schumacher (2013), Unusual angular dependence of tunneling magneto-Seebeck effect, arXiv:1311.2750v1.
8. C. Heiliger, C. Franz, and M. Czerner (2014), Thermal spin-transfer torque in magnetic tunnel junctions, J. Appl. Phys. 115, 172614.
9. A. Boehnke, M. Milnikel, M. Walter, V. Zbarsky, C. Franz, M. Czerner, K. Rott, A. Thomas, C. Heiliger, M. Münzenberg, and G. Reiss (2014), On/off switching of bit readout in bias-enhanced tunnel magneto-Seebeck effect, arXiv:1405.1064.

Das Element Silizium ist auf der Erde das zweithäufigste Element und daher für die Menschheit nahezu unbegrenzt verfügbar. Silizium ist außerdem ungiftig und umweltfreundlich. Diese Eigenschaften sind neben den physikalischen Eigenschaften der Grund, warum Silizium vielseitige Anwendung in der Industrie findet. Die beiden größten Anwendungen von Silizium gibt es in der Halbleiterindustrie, etwa für Computerchips („Silicon Valley“) oder Photovoltaik.

Ein weiteres Gebiet, in dem Silizium eingesetzt werden könnte, ist die Thermoelektrik. In der Thermoelektrik beschäftigt man sich mit dem Bau von thermoelektrischen Generatoren, welche aus Wärme elektrische Energie gewinnen können. Eingesetzt werden thermoelektrische Generatoren unter anderem in Satelliten oder in Kraftfahrzeugen, wo sie als Energiequelle dienen oder den Treibstoffverbrauch senken können.

Heutzutage werden für thermoelektrische Generatoren hauptsächlich giftige und umweltschädliche Materialien verwendet. Silizium könnte diese Materialien ersetzen, wenn man die thermische Leitfähigkeit von Silizium reduziert.¹

Ein möglicher Ansatz zur Senkung der thermischen Leitfähigkeit ist die Verwendung von nanostrukturierten Silizium-Isotopen-Vielfachschichten. Diese Vielfachschichten bestehen aus aufeinanderfolgenden Schichten aus verschiedenen Silizium-Isotopen. Die Leitfähigkeit wird reduziert durch eine erhöhte Streuung von Gitterschwingungen an den Grenzen dieser Schichten.

In diesem Forschungsprojekt wird die Streuung von Gitterschwingungen an diesen Grenzflächen berechnet und quantitativ der Effekt auf die thermische Leitfähigkeit untersucht. Zur Berechnung der Streuung von Gitterschwingungen wurde ein atomares Modell entwickelt, welches auf sogenannten Greensche Funktionen basiert. Es wurden unterschiedliche Schichtanordnungen untersucht: eine periodische Anordnung, in welcher alle Schichten gleich dick sind, sowie mehrere zufällig Anordnungen, in welchen die Schichtdicken zufällig verteilt sind. Es zeigt sich, dass die periodische Anordnung ein vollkommen anderes Verhalten der thermischen Leitfähigkeit zeigt, als die zufälligen Anordnungen. Erhöht man die Anzahl der Schichten in der zufälligen Anordnung, so sinkt die thermische Leitfähigkeit wie erwartet. Bei der periodischen Anordnung hingegen stellt sich nach wenigen Schichten einen Sättigungseffekt ein, was bedeutet, dass eine Erhöhung der Schichtanzahl keinen weiteren Effekt auf die thermische Leitfähigkeit hat. Weiterhin wurde untersucht, wie stabil das Verhalten der periodischen Anordnung gegen kleine Störungen ist. Es konnte gezeigt werden, dass selbst kleinste Änderungen an der periodischen Anordnung das periodische Verhalten zerstören. Die Ergebnisse dieses Forschungsprojektes sind nicht nur wichtig für thermoelektrische Materialien, sondern auch generell wichtig für das Verständnis von thermischer Leitfähigkeit von nanostrukturierten Materialien.

Dieses Forschungsprojekt wurde im Rahmen des Schwerpunktprogramms SPP1386 „nanostrukturierte Thermoelektrika“ durchgeführt.

Projektförderung

SPP1386

Literatur

1. A.I. Hochbaum et al. (2008), Nat. Mater. 451 163.

Tuning the Magnetic Interaction Between Small Clusters on Metallic Surfaces by Means of Electric Fields

L. Juarez Reyes, G.M. Pastor

Fachgebiet Theorie niedrigdimensionaler und nanostrukturierter Materialien, Universität Kassel

Funding source
DFG

Small particles of magnetic transition metals open multiple perspectives of technological developments in storage media and spin-electronic devices. For the applications the interactions between the particles play a central role. In this project we investigate how these interactions can be manipulated by means of static external electric fields, which have the remarkable advantage of being very energy efficient.

Electrical control of magnetism at the nanoscale is a research area with a large spectrum of applications, for example, spintronics, data storage, and recording. Important advances have been achieved towards the reversible tuning of magnetism controlled by means of external electric fields (EFs). In this work the substrate-mediated magnetic interactions between Co and Fe impurities deposited at the Cu(111) surface have been theoretically investigated as a function of external surface charging. The modifications of the interactions as a result of the metallic screening and charge rearrangements are determined theoretically by using the Green's-function Korringa-Kohn-Rostoker method. As in the neutral Cu(111) surface, the effective magnetic exchange coupling ΔE between impurities shows Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) oscillations as a function of the interimpurity distance. At large

interimpurity distances, the wavelength of the RKKY oscillation is not significantly affected by the value and polarity of the external surface charge. Still, important changes in the magnitude of ΔE are observed. For short distances, up to fourth nearest neighbors, surface charging offers remarkable possibilities of controlling the sign and strength of the magnetic coupling. A non-monotonous dependence of ΔE , including changes from ferromagnetic to antiferromagnetic coupling, is observed as a function of overlayer charging. These results open new possibilities of manipulating the magnetic interactions in surface nanostructures.

Further investigations have been devoted to the effects of external EFs on the magnetic state and substrate-mediated magnetic coupling between Mn dimers on the Cu(111) surface. The first principles calculations of the Kassel group show that a change in the ground-state magnetic order, from antiferromagnetic (AF) to ferromagnetic (FM), can be induced within an isolated Mn_2 on Cu(111) by applying a moderately strong EF of about 1 V/m. The magnetic exchange coupling between pairs of dimers displays RKKY-like oscillations as a function of the interdimer distance, which depend significantly on the magnetic order within the dimers (FM or AF) and on their relative orientation on the surface. Moreover, it is observed that applying EFs allows modulation of the exchange coupling within and between the clusters as a function of the intercluster distance. At short distances, AF order within the dimers is favoured even in the presence of EFs, while for large distances the EF can induce a FM order. EFs pointing outwards and inwards with respect to the surface favour parallel and antiparallel magnetic alignment between the dimers, respectively. The dependence of the substrate mediated interaction on the magnetic state of Mn_2 can be qualitatively interpreted in terms of the differences in the scattering of spin-polarized surface electrons.

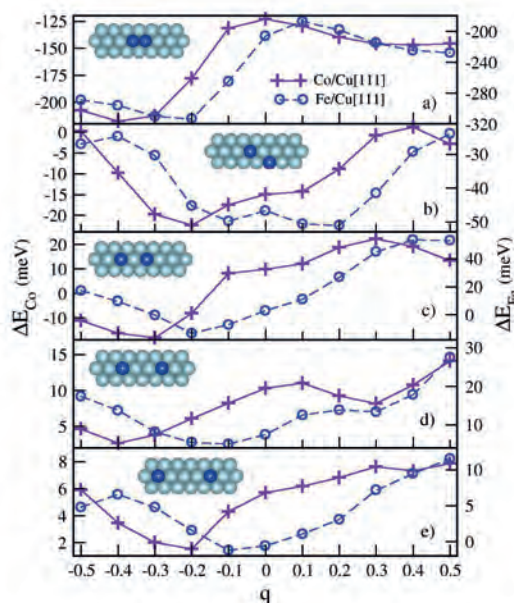


Fig.1: Magnetic exchange interaction energy $\Delta E = E_{FM} - E_{AF}$ of Co and Fe impurities at the Cu(111) surface as a function of the surface charge per atom q for different impurity positions.

References

- L. Juarez-Reyes, G.M. Pastor, and V.S. Stepanyuk (2012), Phys. Rev. B 86, 235436.
- N.N. Negulyaev, L. Niebergall, L. Juarez Reyes, J. Dorantes-Davila, G.M. Pastor, and V.S. Stepanyuk (2013), Phys. Rev. B 87, 054425.
- L. Juarez-Reyes, V.S. Stepanyuk, and G.M. Pastor (2014), J. Phys.: Condens. Matter 26, 176003.

Funding source
DFG
Forschergruppe
1182

Shear flows occur frequently in everyday life and arise whenever a fluid (gas or liquid) moves over a solid surface or when an object (e.g. boat, car) moves in a surrounding fluid. In both cases, the interaction of the fluid with the surface can create vortices that, finally, result in turbulence. When the fluid additionally rotates, the resulting extra forces can either enhance or weaken the turbulence and, consequently, change the drag force that the fluid exerts on the wall.

Using a spectral simulation method, we studied the turbulent motion and drag of a rotating shear flow in a fundamental model system: the flow between two independently rotating cylinders (Taylor-Couette flow, Fig. 1a). In this system, the rotation state of the fluid is determined by the average of both cylinder rotation rates while keeping the differential rotation of the cylinders constant. Our simulations showed that a turbulent state of maximal drag exists for

counter-rotating cylinders,^{1,2} which is in agreement with earlier experimental observations. The occurrence of this maximum in the drag has been linked to the emergence of a stabilized region near the outer cylinder that switches over time between quiescent and turbulent phases.³

This intermittent turbulence in the outer region disappears when the cylinder radii become very large so that the cylinder walls are almost planar. Our simulations demonstrated that in this limit the flow behavior as well as the influence of rotation on the turbulence become nearly independent of the cylinder radii. In contrast to the results for small cylinders, two rotation states featuring a high drag exist for large cylinder radii. Our simulations revealed that one of these states is characterized by a strong large vortex pair (Fig. 1b). The other high-drag rotation state is related to strong turbulence directly at the walls (Fig. 1c).

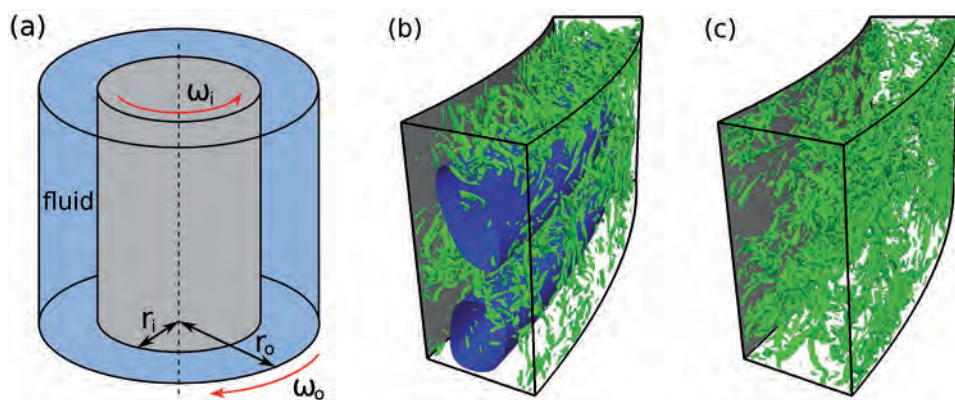


Fig. 1: (a) Taylor-Couette system with transparent outer cylinder and (b,c) snapshots of the flow for shear Reynolds number 20,000 showing only one-fifteenth of the full cylinder circumference for the cylinder radii 9 and 10. The high-drag state for co-rotating cylinders in (b) consists of a large vortex pair (blue tubes) that organizes the small-scale turbulent vortices (green) into horizontal bands between the large vortices. The second high-drag state for counter-rotating cylinders in (c) is caused by turbulent vortices (green) everywhere close to the cylinder walls.

References

1. H.J. Brauckmann and B. Eckhardt (2013), Direct numerical simulations of local and global torque in Taylor-Couette flow up to $Re=30\,000$, *J. Fluid Mech.*, 718: 398–427.
2. S. Merbold, H.J. Brauckmann, and C. Egbers (2013), Torque measurements and numerical determination in differentially rotating wide gap Taylor-Couette flow, *Phys. Rev. E*, 87(2):023014.
3. H.J. Brauckmann and B. Eckhardt (2013), Intermittent boundary layers and torque maxima in Taylor-Couette flow, *Phys. Rev. E*, 87(3):033004.

Turbulenzübergang in der Kanalströmung

S. Zammert, B. Eckhardt

AG Komplexe Systeme, Philipps-Universität Marburg

Projektförderung
DFG
Forschergruppe
1182

Viele Strömungen zeigen Turbulenz, obwohl ihr laminares Profil stabil ist. Zum Beispiel die Kanalströmung, deren parabolisches laminares Profil für Reynoldszahlen kleiner als 5772 stabil ist.¹ Dennoch findet sich in Experimenten und numerische Simulationen bereits bei deutlich niedrigeren Reynoldszahlen turbulentes Verhalten. Voraussetzung dafür ist, eine genügend kräftige Störung der Strömung. Dieses Verhalten ist mit dem Auftreten von neuen exakten kohärenten Strukturen verbunden ist. Da diese Strukturen im Allgemeinen instabil sind, können Sie nur mithilfe besonderer Techniken in numerischen Simulationen gefunden und untersucht werden. In der Dynamik turbulenter Strömungen spielen sie eine Rolle, weil die Zeitentwicklung als eine zufällige Bewegung zwischen verschiedenen instabilen exakten Lösungen beschrieben werden kann.

Ziel ist die Aufklärung der Wege zur Turbulenz in der Kanalströmung. Zu diesem Zweck studieren wir exakte Lösungen der Navier-Stokes-Gleichungen. Für unsere direkten numerischen Simulationen nutzen wir channelflow (url: www.channelflow.org), welches mittels openMP parallelisiert wurde. Bei der Suche nach exakten Lösungen wird die Methode des Edge-Trackings² verwendet, die es erlaubt, eine Trajektorie auf der Grenze zwischen laminarer und turbulenter Bewegung zu verfolgen. In der Regel konvergiert diese Bahn dann gegen eine exakte kohärente Struktur.

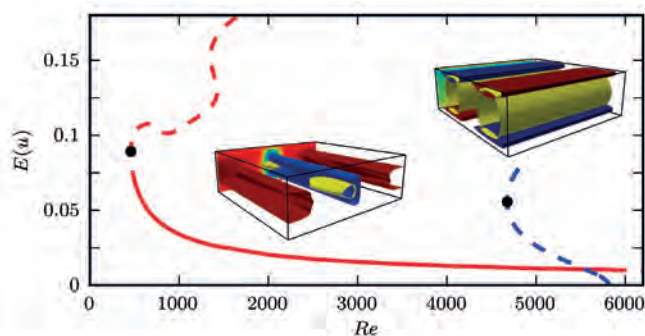


Abb. 1:
Bifurkationsdiagramm der beiden laufenden Wellen (Abszisse: Reynoldszahl; Ordinate: Energie des Strömungsfelds). Bei einer genau instabilen Richtung, wird eine durchgezogene Linie verwendet, bei mehreren instabilen Richtungen ist sie gestrichelt. Visualisierungen der beiden laufenden Wellen: Rote und blaue Flächen sind Isoflächen der Geschwindigkeitskomponente in Strömungsrichtung (nach Abzug des laminaren Profils). Rot steht für positive und blau für negative Geschwindigkeiten. Die gelben Flächen sind Isoflächen eines Wirbelkriteriums und deuten die Lage von Wirbeln an.

Wir konnten diverse laufende Wellen und periodische Bahnen identifizieren. Darunter sind zwei laufende Wellen, die beide in der Laminar-Turbulenter-Grenze liegen und Edge-States des Systems sind.² Eine dieser laufenden Wellen ist zweidimensional, zweigt vom laminaren Profil ab und existiert für $Re > 4685$. Die zweite laufende Welle ist dreidimensional und entsteht durch eine Sattel-Knoten-Bifurkation bei $Re = 460$ (in beiden Fällen hängen Reynoldszahlen von der Länge des simulierten Volumens ab; die angegebenen Werte beziehen sich auf eine Länge von 2π).

Die beiden exakten Lösungen können mit den unterschiedlichen Wegen zur Turbulenz, die in der Kanalströmung und auch in Grenzschichten existieren, in Verbindung gebracht werden. Die erste laufende Welle ist von Bedeutung für den Tollmien-Schlichting-Übergang, während die zweite in Verbindung mit dem Bypass-Übergang zur Turbulenz steht. Das Bifurkationsdiagramm der beiden laufenden Wellen und Visualisierungen der Strömungsfelder sind in Abb. 1 dargestellt. Die Identifikation der relevanten kohärenten Strukturen lässt uns, die verschiedenen Wege zur Turbulenz in der Kanalströmung beschreiben und vorhersagen, welcher Weg dominieren wird.³

Darüber hinaus gelang es, räumlich lokalisierte periodische Bahnen zu identifizieren.^{4,5} Derartige exakte Lösungen sind von besonderer Bedeutung, da Turbulenz bei niedrigen Reynoldszahlen räumlich sehr inhomogen ist, und häufig auch räumlich lokalisiert auftritt. Lokalisierte Strukturen tragen zu einer Erklärung und Beschreibung dieser räumlichen Inhomogenität der Turbulenz bei.

Literatur

1. S. Orszag (1971), Accurate solution of the Orr-Sommerfeld stability equation, *Journal of Fluid Mechanics*, 50: 690-703.
2. J. Skufca, J. Yorke, and B. Eckhardt (2006), Edge of Chaos in a Parallel Shear Flow, *Physical Review Letters*, 96, 174101.
3. S. Zammert and B. Eckhardt (in Vorbereitung), Exact coherent structures for by-pass and TS-transition to turbulence in plane Poiseuille flow.
4. S. Zammert and B. Eckhardt (2014), Periodically bursting edge states in plane Poiseuille flow, *Fluid Dynamics Research*, 46, 041419
5. S. Zammert and B. Eckhardt (2014), Streamwise and doubly-localised periodic orbits in plane Poiseuille flow, *Journal of Fluid Mechanics*, 761: 348-359.

Projektförderung
BMBF

Kernkollaps-Supernovaexplosionen sind relevant für viele astrophysikalische Phänomene wie z. B. die Synthese schwerer Elemente oder die Entstehung von Neutronensternen und schwarzen Löchern. Trotzdem ist der Mechanismus, der den Stern in der Endphase seines Daseins zur Explosion zwingt, bis heute nicht geklärt, auch wenn man die wichtigsten Beiträge zu kennen glaubt. Zu diesem Zweck wird in dieser Arbeit nukleare Pastastrukturen untersucht, die sowohl in solchen Supernovaexplosionen, wie auch in Neutronensternen auftreten können. Diese Strukturen wurde der Name „Pasta“ gegeben, weil die Materie oberhalb von zehn Prozent der nuklearen Sättigungsdichte zylindrische (Spaghetti) und auch plattenartige (Lasagne) Strukturen ausbildet, statt nahezu kugelförmige Kerne, aus denen Materie auf der Erde besteht. Diese beeinflussen die Neutrinostreuung, wobei die Neutrinos die wesentliche Rolle bei der Explosion einnehmen.

In dieser Arbeit wird die zeitabhängige wie auch die statische Hartree-Fock Näherung verwendet, um die Kernmaterie zu beschreiben. Die Wechselwirkung zwischen den Nukleonen wird hier über ein mittleres Feld vermittelt. Es wird also ein Selbstkonsistenzproblem gelöst ohne weitere Annahmen von Symmetrien aber mit periodischen Randbedingungen. Zur Analyse der Strukturen wird das mathematische Konzept der Minkowskifunktionale verwendet. Dies sind Werkzeuge der Integralgeometrie, die außer der Topologie auch die Größe, Oberfläche, Krümmung und sogar Deformationen der Struktur beschreiben können.

Die Rechnungen zeigen eine Vielzahl von verschiedenen, exotischen Formen (s. Abb. 1), die alle eindeutig mit den Minkowskifunktionalen klassifiziert werden können.¹ Außer den gut bekannten Spaghetti- und Lasagnephase wurden auch netzartige, zusammenhängende Zylinder in zwei und drei Dimensionen gefunden. Darüber hinaus konnten Aussagen über das Vorkommen der verschiedenen Formen in Abhängigkeit des Protonenanteils gemacht werden.² Es konnte außerdem gezeigt werden, dass eine exotische Struktur, das Gyroid (s. Abb. 2), das auch schon in Polymerrechnungen und in den Flügeln von Schmetterlingen gefunden wurde, spontan aus einer zufälligen Anfangsverteilung gebildet wird.³ Diese Struktur ist besonders interessant, da sie, wie auch der dreifach zusammenhängende Zylinder, eine dreifach periodische Minimalfläche begrenzt, die eine schraubenförmige Symmetrie aufweist und deshalb eine bestimmte Händigkeit hat. Es tritt, wie auch die Lasagnephase, bei ungefähr halber nuklearer Sättigungsdichte auf. Die Bindungsenergien dieser beiden Strukturen liegen sehr nahe, wobei die Bindungsenergie der plattenartigen Struktur leicht höher zu sein scheint. Das legt nahe, dass das Gyroid ein metastabiler Zustand ist.

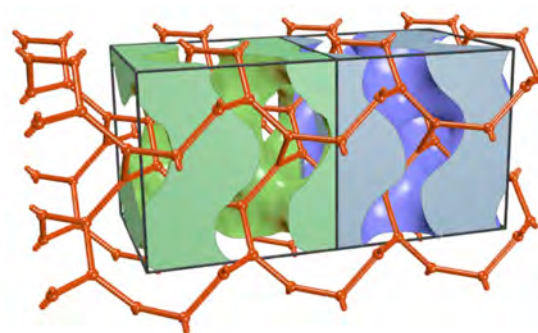
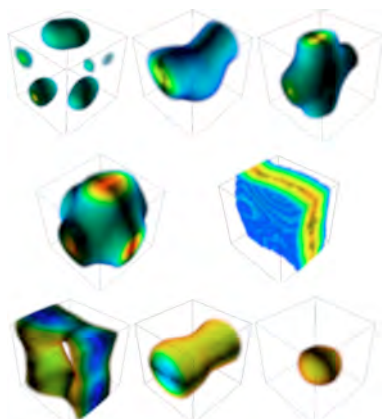
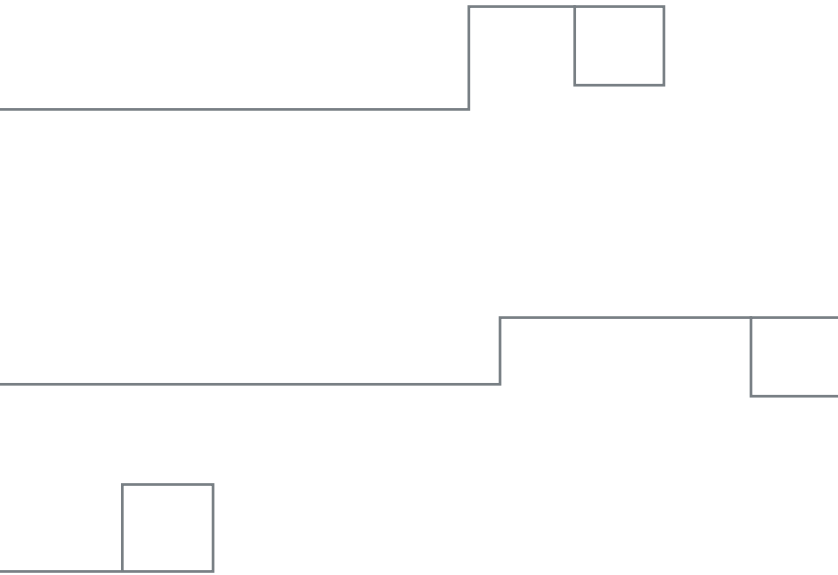


Abb. 2:
Pasta Gyroid und nodale Approximation des perfekten Gyroids im Vergleich mit Gyroid-Netzwerk.

Abb. 1:
Verschiede periodische Pastastrukturen geordnet nach der mittleren Dichte (von oben nach unten). Untere Strukturen zeigen Löcher anstatt Kernmaterie.

Literatur

1. B. Schuetrumpf, M.A. Klatt, K. Iida, J.A. Maruhn, K. Mecke, and P.G. Reinhard (2013), Phys. Rev. C 87, 055805.
2. B. Schuetrumpf, K. Iida, J.A. Maruhn, and P.G. Reinhard (2014), Phys. Rev. C 90, 055802.
3. B. Schuetrumpf, M.A. Klatt, K. Iida, G.E. Schröder-Turk, J.A. Maruhn, K. Mecke, and P.G. Reinhard (2015), PRC, arXiv:1404.4760.



**Hessisches Kompetenzzentrum
für Hochleistungsrechnen**

Mornewegstraße 30
64293 Darmstadt

Tel.: +49 6151 16-76038
Fax: +49 6151 16-72335
E-Mail: office@hpc-hessen.de
URL: <http://www.hpc-hessen.de>

