

Physik-Apps ergänzen Experimente

Wie Apps den Einsatz von Simulationen in Hochschulen und Unternehmen verändern

Rachel Keatley, Thomas Forrister und Phillip Oberdorfer

Obwohl Modellierungswerkzeuge heute sehr viel benutzerfreundlicher sind als die ersten Computersimulationen, besteht der Anwenderkreis immer noch aus wenigen Spezialisten. Erst die Einführung von Simulations-Apps ermöglicht auch Nicht-Experten die Nutzung. Die stärkere Verbreitung kommt Hochschulen zugute, die so virtuelle Experimente durchführen können, aber auch Unternehmen, in denen Produktspezialisten virtuell arbeiten können.

Die durchschnittliche menschliche Aufmerksamkeitsspanne ist kürzer als die eines Goldfischs. Diese zum Nachdenken anregende Erkenntnis machte 2015 Schlagzeilen – doch Skepsis war angebracht. Die Behauptung ist fehlerhaft, weil die menschliche Aufmerksamkeitsspanne viel zu komplex ist, um sie auf eine Zeitspanne zu reduzieren [1].

Heute gibt es mehr digitale Inhalte als je zuvor, und die Art und Weise, wie Menschen sich konzentrieren, verändert sich. Um ein Publikum zu gewinnen, zu unterhalten und zu begeistern, gilt es, eine fesselnde Geschichte zu erzählen. Lehrkräfte an Hochschulen sollten diese Fähigkeit verinnerlichen, da sie ihre Studierenden oft 90 Minuten bei Laune halten müssen. Als die Hochschulen aufgrund der raschen Ausbreitung von COVID-19 im März 2020 schließen mussten, fanden viele Lehrveranstaltungen online statt. Am New Jersey Institute of Technology (NJIT) hat Roman Voronov, außerordentlicher Professor für Chemie- und Biomedizintechnik, 15 benutzer-



Anwender können über COMSOL Server™ auf Applikationen zugreifen und diese über einen Webbrowser oder Client ausführen.

freundliche Simulations-Apps entwickelt, um grundlegende technische Konzepte und Laborurse virtuell und ansprechend zu vermitteln – unabhängig davon, wo sich die Studierenden gerade befinden.

Simulation nicht nur im Hörsaal

Roman Voronov leitet Kurse zu Transportphänomenen, Wärme- und Stoffübertragung sowie Techniken zur Prozesssimulation. Hierbei hat er seine Studierenden mit der Software COMSOL Multiphysics® vertraut gemacht, die es den Studierenden erlaubt, direkt zu sehen, was passiert.

Darüber hinaus hält Voronov es für wichtig, Studierende mit fortschrittlichen Berechnungswerkzeugen vertraut zu machen. Dies verschafft ihnen einen einzigartigen Vorteil im Berufsleben. Nachdem er die positiven Auswirkungen der Simulationstechnologie in seinen Veranstaltungen gesehen hatte, wollte Voronov diese Werkzeuge Lernenden und Lehrenden auf der ganzen Welt zugänglicher machen.

Eine Bibliothek mit Apps

Im Laufe des Jahres 2020 arbeiteten Voronov und seine Studierenden an einer Bibliothek mit mehreren eigenständig ausführbaren Simu-

lations-Apps. Sie erstellen diese einfach zu bedienenden Apps mit dem Application Builder, einem Werkzeug in COMSOL Multiphysics® für intuitive Benutzeroberflächen aus Modellen, bei denen der App-Designer über die verfügbaren Ein- und Ausgaben entscheidet. Jede App wurde mit dem COMSOL Compiler™ Bereitstellungs-Tool zu einer eigenständig ausführbaren Datei kompiliert, sodass keine zusätzlichen Softwarelizenzen nötig waren. Die gemeinnützige Organisation Computer Aids for Chemical Engineering (CACHE) hat das einjährige Projekt finanziert.

Ursprünglich plante Voronov die Entwicklung von Apps als visuelle Hilfsmittel bei der Präsentation grundlegender technischer Konzepte. Als die COVID-19-Pandemie ausbrach, entstand der Bedarf nach Apps, welche die bis dahin im Labor durchgeführten Experimente modellierten. Solche Apps sollten die Präsenzarbeit im Labor ergänzen oder sogar vollständig ersetzen.

Drei Apps im Fokus

Im Rahmen des CACHE-Projekts haben Roman Voronov und seine Studierenden 15 Simulations-Apps entwickelt (Abb. 1) [2]. Einige sind für spezielle ingenieurwissenschaftliche Kurse und Praktika am NJIT gedacht, können aber auch helfen, grundlegende verfahrenstechnische Prozesse zu studieren.¹⁾ Für Voronov ergänzt die Simulationstechnologie die Laborpraktika: „Im Labor können die Studierenden nach Anleitung experimentieren. Aber die physikalischen Prozesse, die im Experiment ablaufen, verstehen sie besser durch Simulation.“

Die App Orifice Flowmeter erlaubt es, kompressible Fluide in

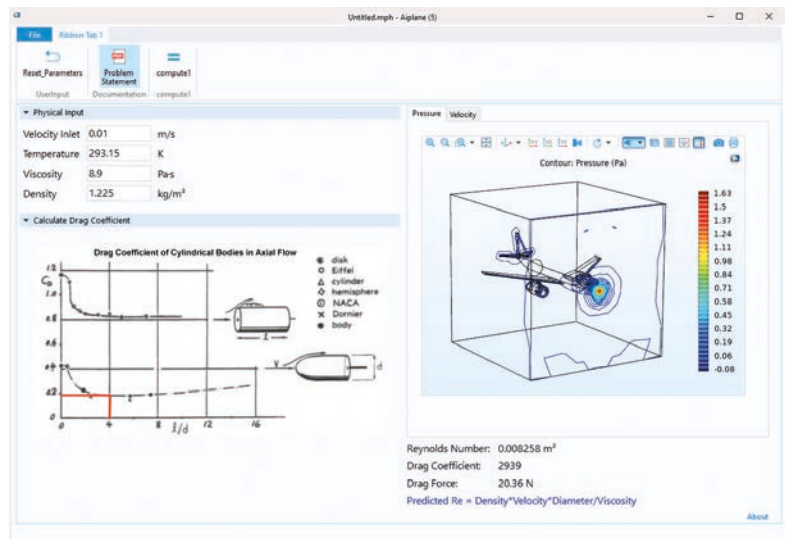


Abb. 1 Diese Simulations-App berechnet den Luftwiderstand eines Flugzeugs. Studierende können die Ergebnisse mit Luftwiderstandsbeiwerten aus der Literatur vergleichen.

Rohren zu simulieren. Sie unterstützt im Praktikum ein Experiment zur Strömung von Fluiden. Dabei gilt es, den Druckabfall an mehreren Stellen in Rohren unterschiedlicher Länge zu messen. Die App ist dem Experiment nachempfunden und erlaubt es den Lernenden, die Geometrie der Rohre und die Eigenschaften der Fluide zu verändern und die Auswirkung auf die Ergebnisse direkt zu sehen. Die App verfügt über eine 3D-Darstellung der Geschwindigkeit und des Drucks und visualisiert somit die auftretenden physikalischen Phänomene.

Mit der App Impeller Reactor können Studierende die Reaktion zwischen zwei Spezies in einem nicht katalytischen Batch-Reaktor mit einem rotierenden scheibenförmigen Impeller simulieren (Abb. 2). Die App vermittelt einen Einblick, wie sich veränderte Abmessungen des Impellers auswirken auf die molare Konzentration, den Mol- und Massenanteil sowie die Massenkonzentrationen in einem Chargenreaktor. Batch-Reaktoren kommen bei der Entwicklung vieler Produkte in der Feinchemie, der pharmazeutischen Industrie und der Lebensmittelindustrie

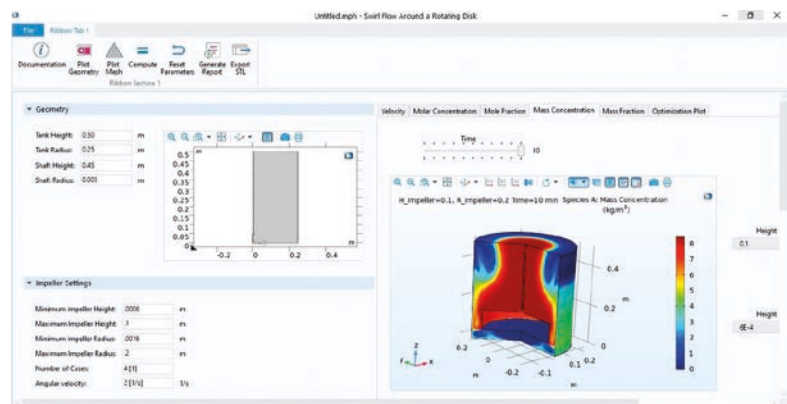


Abb. 2 Die Impeller Reactor App generiert eine CAD-Datei für einen 3D-gedruckten Impeller. Damit lassen sich die Simulationsergebnisse im Labor überprüfen.

1) Alle Apps finden sich auf der Website des NJIT [3]. Die Ausführung der Apps erfordert eine kostenfreie Installation von COMSOL Runtime™ auf dem Betriebssystem des App-Benutzers.

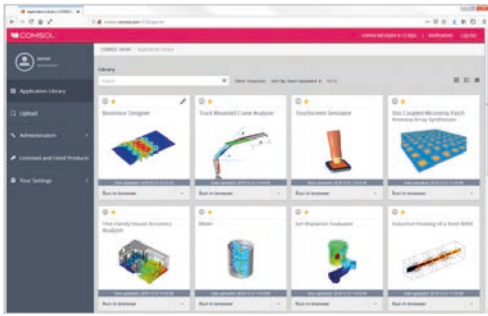


Abb. 3 COMSOL Server™ verwaltet Apps und ihre Nutzung.

zum Einsatz. Darüber hinaus umfasst die App die Modellierung des Rührwerks mit einem parametrischen Sweep. Ziel ist es, die optimale Form und Größe des Impellers zu bestimmen. Auf Grundlage der Simulationsergebnisse können die Studierenden eine CAD-Datei für einen 3D-gedruckten Impeller erstellen, das Bauteil ausdrucken und herausfinden, wie es sich in der Realität verhält.

Die App Flow Around Car modelliert Luft, die an einem Auto vorbeiströmt. Das Verständnis dafür, wie fluide Objekte umströmen, ist beispielsweise für die Auslegung von Festbetten, Filteranlagen und Wärmetauschern wichtig. Mit der App lassen sich die Luftverteilung auf einem Auto in Form des Drucks und der Luftstrom über das Fahrzeug in Form von Geschwindigkeitsplots darstellen. Viele von Roman Voronovs Studierenden haben Simulationen in ihren späteren Berufen eingesetzt – und sogar Preise gewonnen. So entwickelte Vasilios Halkias, ein Absolvent des NJIT aus dem Jahr 2020, beispielsweise eine App, die ihm den NAFEMS Student Award 2020 einbrachte [4]. Seine App simuliert Stofftransport, Wärmetransport und Reaktionskinetik in einem Rohrströmungsreaktor.

Demokratisierung durch Apps

Die Ausweitung der Multiphysik-Simulation ermöglicht es Unternehmen, qualitativ hochwertigere

Produkte schneller und kostengünstiger auf den Markt zu bringen, als wenn sie iterativ entwickeln. Das Erstellen und Verbreiten von Simulations-Apps hilft Spezialisten, auch Nicht-Experten in den Prozess einzubeziehen, ihn zu entmystifizieren und Barrieren innerhalb einer Organisation abzubauen. So entsteht mehr Raum für Zusammenarbeit, Ergebnisvorhersage, Innovation und Optimierung.

Bei Veryst Engineering, AltaSim Technologies und GLL Bio-Med Analytics tragen Apps dazu bei, die Design-Workflows ihrer Kunden effizienter zu gestalten. Apps ermöglichen es auch ohne einen Simulationsspezialisten, Parameter zu testen und wiederholte Analysen durchzuführen. So lassen sich auch ohne technischen Hintergrund schnelle und fundierte Entscheidungen treffen.

Um einen Überblick über den Workflow vom Modell zur App zu erhalten, erstellt ein Simulationsexperte zunächst ein Modell in COMSOL Multiphysics®. Anschließend verwandelt der Application Builder in COMSOL Multiphysics® das Modell in eine App. Apps lassen sich in Minutenschnelle mittels Drag-and-Drop-Funktionalität erstellen. Das Ergebnis ist eine spezielle Schnittstelle mit eingeschränkten Ein- und Ausgaben, die sich auf die relevanten Parameter konzentrieren.

Um Mitarbeitenden Zugang zu Apps zu ermöglichen, gibt es zwei Methoden: die Kompilierung eigenständiger ausführbarer Dateien oder die Verteilung über ein Application Management Tool. Wie der Name andeutet, dient der COMSOL Compiler™ zur Erstellung kompilierter Apps, die sich ohne COMSOL®-Softwarelizenz auf verschiedenen Betriebssystemen ausführen lassen. COMSOL Server™ ist die Wahl für diejenigen, die Apps für ihre Organisation hochladen und verwalten wollen und

deren Nutzer Simulationen über Webbrowser oder Client ausführen (Abb. 3).

Apps als Kundenlösungen

Consultants setzen Simulations-Apps bei ihren Kunden unterschiedlich ein. GLL zum Beispiel hat von seinen Kunden positive Rückmeldungen erhalten, dass die Applikationen es auch Personen ohne Physikkenntnisse ermöglichen, Analysen durchzuführen.

Manchmal erkennt ein Kunde die Möglichkeiten der Apps erst bei oder nach der Arbeit mit dem eigens entwickelten Modell. Veryst hat die Erfahrung gemacht, dass Kunden schnell realisieren, wie nützlich das Modell für sie ist, es intern nutzen wollen und dann sehen, wie eine App dabei helfen kann.

Bei AltaSim kommen die Applikationen ins Spiel, nachdem die Bedürfnisse der Kunden klar sind. „Wir gehen mit unseren Kunden auf Entdeckungsreise, um zu verstehen, wonach sie genau suchen“, sagt Kyle Koppenhoefer. „Wenn wir einige Schlüsselparameter finden, schlagen wir in der Regel eine App vor.“

Apps für Kundenanwendungen

Selbst komplexeste Modelle lassen sich in einfach zu bedienende Apps übersetzen. Die Kunden von Veryst nutzen ihre Apps, um Designvarianten zu simulieren und parametrische Studien und Sensitivitätsanalysen durchzuführen. Sie müssen sich nicht um Simulationseinstellungen kümmern, sondern können sich darauf konzentrieren, ihr Produkt zu verbessern. Einige Kunden nutzen Applikationen, um Modellergebnisse zu verschiedenen Zeitpunkten dreidimensional zu visualisieren. Modelle zu drehen oder Schnittebenen zu erstellen, hilft dabei, die Modellvorhersagen besser zu verstehen.

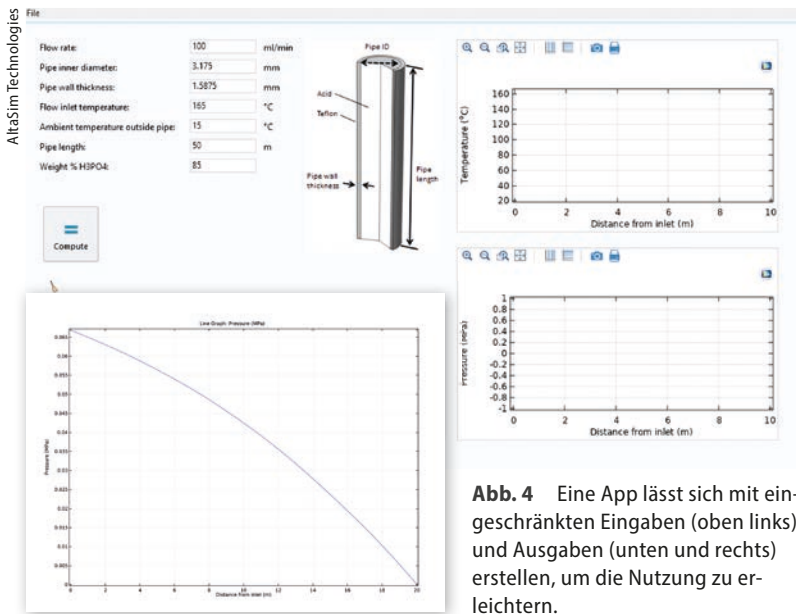


Abb. 4 Eine App lässt sich mit eingeschränkten Eingaben (oben links) und Ausgaben (unten und rechts) erstellen, um die Nutzung zu erleichtern.

Apps ermöglichen es den Simulationsexperten eines Unternehmens, sich auf anspruchsvollere Modellierungsprojekte zu konzentrieren, indem sie die Apps an andere Teams verteilen. Die Applikationen vermitteln den Ingenieuren vor Ort ein besseres Verständnis für die Funktionsweise ihrer Designs, sodass sie besser in der Lage sind, Designentscheidungen zu treffen.

AltaSim unterstützt die Kunden beim Reduzieren von Rework-Maßnahmen. Beispielsweise erschweren Schwankungen bei Faktoren wie

Temperatur und Durchflussmenge eine genaue Vorhersage des realen Verhaltens eines Geräts, sodass Designs ständig überarbeitet werden müssen. Diesen Prozess reduzieren Applikationen erheblich, da Ingenieure verschiedener Fachrichtungen mit ihnen beliebig viele Tests durchführen können, was zu einer Produktivitäts- und Umsatzsteigerung führt (**Abb. 4**).

Viele Kunden von GLL sind Startups aus der Medizintechnik, die oft eigene Experimente durchführen. GLL simuliert diese Experimente, um die Genauigkeit der Modellierung zu demonstrieren. Aus den validierten Modellen entstehen Apps, die Simulationsergebnisse in Echtzeit visualisieren, um Simulationsingenieure, App-Anwender und andere Teammitglieder wie Ärzte auf den gleichen Stand zu bringen.

GLL entwickelte eine App für medizinische Geräte (**Abb. 5**), die sowohl thermische als auch nicht-thermische Tumorablation simuliert. Die Applikation hilft dabei, Geräte zu entwickeln, die Krebszellen entfernen; sie visualisiert Ablationszonen und importiert sogar MRT- und CT-Scans für bestimmte Anatomien. Die Benutzerober-

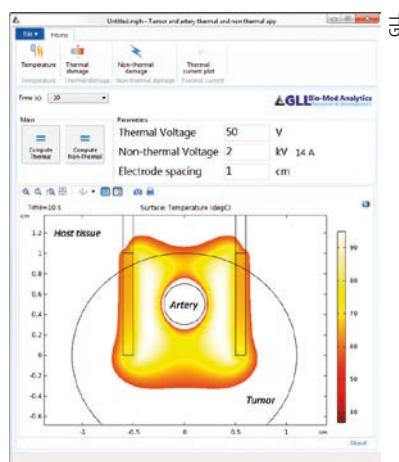


Abb. 5 Zwei Simulationen in einer App, die thermische und nicht-thermische Tumorablationen berechnet.

fläche enthält ein Menü für eine leichte Auswahl der Analyse. Da beispielsweise die Temperatur und die thermischen nekrotischen Zonen zeitlich variieren, lässt sich ein Zeitpunkt angeben, um die durch das Wärme- oder Temperaturprofil verursachten Schäden anzuzeigen. Die App erlaubt die Eingabe der thermischen und nicht-thermischen Spannung sowie des Elektrodenabstands. Der simulierte Strom wird über den experimentellen Strom aufgetragen, sodass die Simulation leicht validierbar ist.

Innovation fördern

Der Application Builder macht es einfach, eine Simulations-App in wenigen Minuten zu erstellen; COMSOL Server und COMSOL Compiler helfen bei der Verbreitung. Durch die Demokratisierung der Simulation können Spezialisten, Forschende, Ingenieure und Kunden gemeinsam und innovativ entwickeln.

- [1] S. Maybin, Busting the attention span myth, BBC News, 2017. bbc.com/news/health-38896790
- [2] Development of Computational-Based Tools and Modules for Chemical Engineering Education, cache.org/computational-tools-development
- [3] COMSOL Apps, web.njit.edu/~rvoronov/comsol-apps
- [4] R. Tara, Unable to Take Lab Course to Graduate, Student Turns to Simulation, engineering.com (2020), bit.ly/3jUhgqC

Kontakt

Dr. Phillip Oberdorfer, Manager Technical Marketing, Comsol Multiphysics GmbH, Robert-Gernhardt-Platz 1, 37073 Göttingen