

IMAGES OF REALITY

ABBILDER DER WIRKLICHKEIT

SCHOTT uses modeling and simulation to further develop its processes and products in a strategic manner – by experimenting on the computer.

Modellierung und Simulation ermöglichen es SCHOTT, Prozesse und Produkte immer gezielter weiterzuentwickeln – mit Experimenten am Computer.

THILO HORVATITSCH

Make everything as simple as possible, but not simpler!" The model of a glass melting tank for calculating the density of bubbles could also be based on this maxim from Albert Einstein. The 3-D image on a screen shows a bright spectrum of colors inside the tank. Reddish colors mean there are still a lot of bubbles in the glass melt. The bluer the areas, the fewer bubbles it contains. Pretty

Mache deine Modelle so einfach wie möglich, aber nicht einfacher!" Auf Grundlage dieses Mottos von Albert Einstein könnte auch die modellierte Glasschmelzwanne zur Berechnung der Blasendichte entstanden sein. Die 3D-Darstellung auf dem Bildschirm zeigt ein buntes Farbspektrum in der Wanne. Rötliche Farben bedeuten: Hier sind noch viele Blasen in der Glasschmelze.

simple, right? Dr. Christoph Berndhäuser, SCHOTT developer and expert on simulation, grins for a moment before noting: “This model and its capabilities that we created in-house for evaluating glass quality is really the product of expertise developed over 20 years.”

Today SCHOTT performs mathematical simulations and builds models to optimize and develop nearly all of its technological processes and products – in both its Business Units and in research. And for good reason; simulation often saves the company from having to perform costly trials and allows for tests to be performed on a model to gain insights into a specific system or make forecasts. But that’s not all; the latest computing procedures in combination with increased computer capabilities enable extensive parameter variations that could hardly have been efficiently accomplished using conventional testing. This provides technology companies with a decisive lead in the race to meet higher demands for quality and keep up with ever shorter innovation cycles. This is why SCHOTT relies on simulation and modeling along the entire process chain for manufacturing glass; from melting, fining and hot forming to annealing, ceramization, 3-D shaping and even product certification. Important interrelationships are also identified using actual production data, thanks to the further development and automation of data analysis instruments. And the company already has its

Real laboratory experiments using the melting crucible make an important contribution to developing simulation models. The parameters and values that are obtained are then transferred over to the actual dimensions of the melting tank.

Einen wichtigen Beitrag für die Entwicklung der Simulationsmodelle leisten reale Laborversuche im Schmelztiigel. Die dadurch ermittelten Parameter und Werte werden in der Simulation auf die reale Wannendimension übertragen.

Je blauer die Areale, desto weniger Blasen sind enthalten. Ganz einfach, oder? SCHOTT Entwickler und Simulationsexperte Dr. Christoph Berndhäuser schmunzelt: „In diesem selbst entwickelten Glasqualitätsmodell und seinen Möglichkeiten stecken gut 20 Jahre Kompetenzaufbau.“

Heute nutzt der Technologiekonzern SCHOTT die mathematische Simulation und Modellbildung bei der Optimierung und Entwicklung nahezu aller technologischen Prozesse und Produkte – in den Geschäftseinheiten wie auch in der Forschung. Mit gutem Grund: Die Simulation erspart oft das aufwendige Ausprobieren und erlaubt Experimente an einem Modell, um Erkenntnisse über ein reales System zu gewinnen oder Vorhersagen zu treffen. Nicht nur das: Neueste Rechenverfahren in Kombination mit ständig wachsenden Computerleistungen ermöglichen die Durchführung umfangreicher Parameterstudien, die mit herkömmlichen Versuchen kaum effizient zu gewinnen wären. Dies verschafft Technologieunternehmen im Rennen um steigende Qualitätsansprüche und immer kürzere Innovationszyklen einen entscheidenden Vorsprung. SCHOTT setzt darum Simulation und Modellierung entlang der gesamten Prozesskette der Glasproduktion ein: vom Schmelzen, Läutern und Heißformen über Kühlung, Keramisierung und 3D-Formung bis zur Produktqualifizierung. Durch die Weiterentwicklung und Automatisierung von Datenanalyse-Instrumenten werden außerdem wichtige Zusammenhänge aus den realen Produktionsdaten ermittelt. Auch für die Simulation von morgen nimmt das Unternehmen spannende Themen ins Visier – etwa die Materialmodellierung von Gläsern, Glaskeramiken und Kunststoffen (siehe S. 32). Ein wichtiges Schlüsselthema für die



Photo Foto : SCHOTT/A. Sell

sights set on exciting topics for future simulations, including material modeling of glasses, glass-ceramics and plastics (see below).

A key topic in the coming years will be to continuously improve advanced models for evaluating the quality of glass by collecting even more know-how in the areas of refining chemistry for melting tanks and the thermodynamics of glass. “Our customers expect us to be able to accurately assess the quality for our production processes and products. For materials such as our glasses and glass-

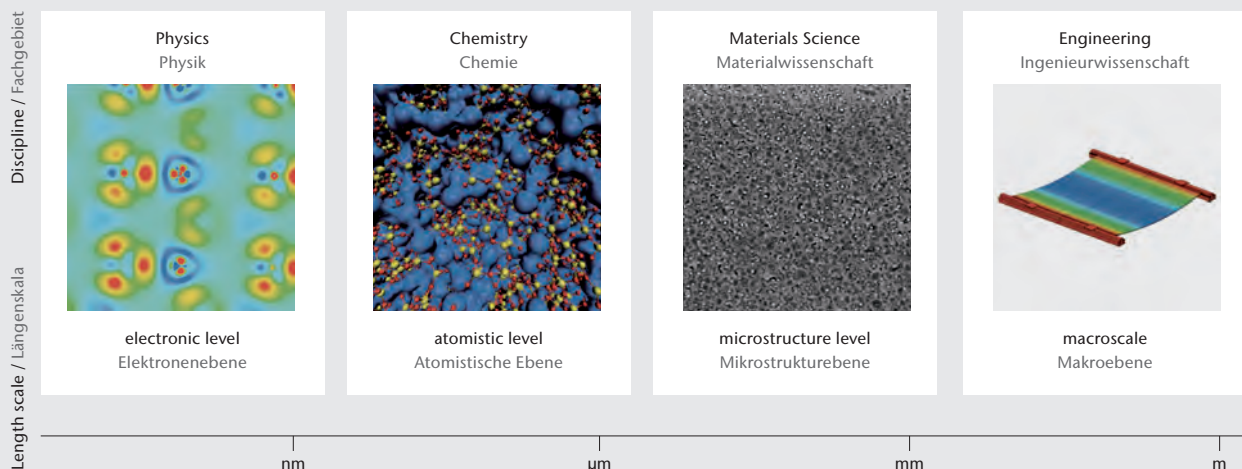
nächsten Jahre ist die kontinuierliche Verbesserung fortgeschrittener Glasqualitätsmodelle durch Kompetenzausbau in der Läuterchemie von Schmelzwannen und der Thermodynamik von Gläsern. „Unsere Kunden erwarten eine stimmige Qualitätsbewertung für unsere Produktionsprozesse und Produkte. Für Materialien wie unsere Gläser oder Glaskeramiken heißt das zum Beispiel: Bestimmung der Anzahl, Größe und Zusammensetzung darin noch enthaltener Blasen pro Kilogramm“, erläutert Dr. Berndhäuser – und

Multiscale modeling: looking into the heart of glass Multiskalen-Modellierung: Dem Glas ins Herz schauen

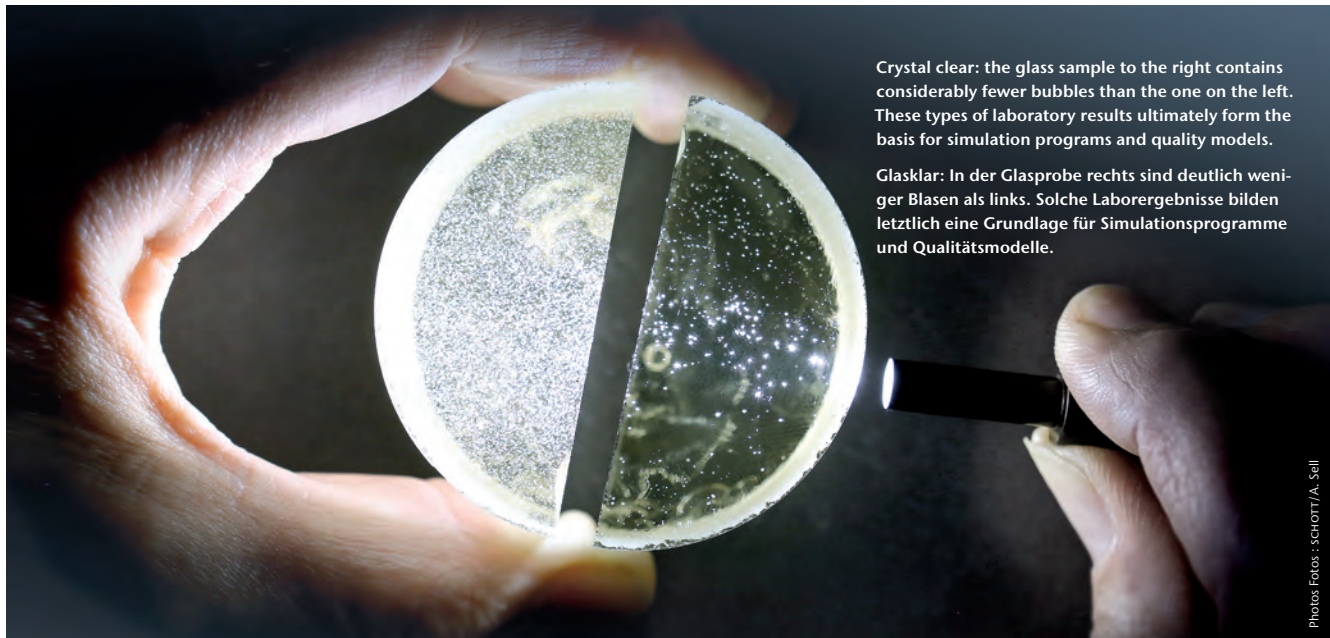
How can certain mechanical or chemical properties of glass be selectively improved? The goal here is to look even more deeply “into the heart of glass,” just as our company founder Otto Schott once did. Multiscale modeling offers promising approaches for accomplishing this. The starting point is to realize that the many different processes during which material properties form take place on broad spatial and temporal scales. Values such as temperature or stresses can be modeled in the meter to millimeter region on the macroscale. Microstructural, atomistic or even electron-based modeling extends all the way to below the nanometer level, however. These calculations still reach their limits. It is research’s goal to gradually step down to the various levels in order to ultimately tie them into a consistent multiscale model and thus be able to describe and predict material characteristics in a more comprehensive manner. SCHOTT is already on the way to achieving this goal, working on topological models that link together the different glass structures, such as chain, plane and scaffold-shaped structures with specific glass properties.

Wie lassen sich bestimmte mechanische oder chemische Glaseigenschaften gezielt verbessern? Dazu gilt es dem Glas noch tiefer „ins Herz zu schauen“, wie es Firmengründer Otto Schott schon tat. Die Multiskalen-Modellierung bietet dazu vielversprechende Ansätze. Ausgangspunkt ist, dass sich die zahlreichen Prozesse, bei denen sich Materialeigenschaften ausbilden bzw. zeigen, auf weit gespannten Raum- und Zeit-Skalen abspielen. Auf der Makroskala im Meter- bis Millimeterbereich lassen sich Größen wie Temperatur oder Spannungen modellieren. Mikrostrukturelle, atomistische oder schließlich elektronenbasierte Modellierungen reichen jedoch bis unter die Nanometer-Ebene. Entsprechende Berechnungen stoßen derzeit noch an Grenzen. Die Forschung will jedoch stufenweise auf die verschiedenen Ebenen hinabsteigen, um diese letztlich zu einem durchgängigen Multiskalen-Modell zu verknüpfen und so Materialeigenschaften umfassend beschreiben und vorherzusagen zu können. Auf diesem Weg beschäftigt sich SCHOTT schon heute zum Beispiel mit topologischen Modellen, die unterschiedliche Glasstrukturen wie etwa ketten-, flächen- oder gerüstartige Gebilde mit bestimmten Glaseigenschaften verknüpfen.

Multiscale modeling of technical materials
Multiskalen-Modell technischer Materialien



Source: Quelle: SCHOTT/Transquar



Crystal clear: the glass sample to the right contains considerably fewer bubbles than the one on the left. These types of laboratory results ultimately form the basis for simulation programs and quality models.

Glasklar: In der Glasprobe rechts sind deutlich weniger Blasen als links. Solche Laborergebnisse bilden letztlich eine Grundlage für Simulationsprogramme und Qualitätsmodelle.

Photos Fotos: SCHOTT/A. Sell

ceramics, this means determining the number, size, and composition of the bubbles per kilogram that they still contain,” Dr. Berndhäuser explains and points to his colorful quality model on the screen. To forecast the quality in real tanks, the temperature distributions and flow pattern inside the tank are calculated using special CFD (Computational Fluid Dynamics) programs and are then assessed for the number of bubbles based on quality models developed in-house by the company. Laboratory trials inside a melting crucible make an important contribution to developing these models. They show the bubble size distribution depending on the refining agent used, its concentration, temperature and hold time for every type of glass analyzed. These parameters and values flow into the quality model and are transferred over to the actual size of the tank in the simulation.

So-called tracers are now being used to describe how bubbles behave inside a tank. 100,000 of these simulated markers pass through the various modeled flow pattern and temperature zones on different paths, depending on the furnace design and setup. Statistics then provide information on the size and distribution of the bubbles during and at the end of the melting and refining process. “The next level of simulation will also include the bubbles’ reactions to the refining process because the physical and chemical conditions change during the process, depending on the bubble load,” Dr. Berndhäuser explains.

These types of questions and insights also mark the starting point for optimized approaches to constructing and setting melting tanks, especially switching over to more environmentally-friendly refining chemicals that don’t contain heavy metals. Research at SCHOTT is currently conducting an in-depth project on this topic. One thing is already clear: advances in the area of simulations definitely will not make it any easier to realize Einstein’s maxim on simplicity.

eric.urruti@us.schott.com

deutet auf sein buntes Qualitätsmodell auf dem Bildschirm. Für die Qualitätsprognose an realen Wannen werden die in der Wanne herrschenden Temperaturverteilungen und Strömungsformen mit speziellen CFD (Computational Fluid Dynamics)-Programmen berechnet und anschließend auf Basis der selbst entwickelten Qualitätsmodelle etwa hinsichtlich der Blasenanzahl bewertet. Einen wesentlichen Beitrag für die Entwicklung der Modelle leisten reale Laborversuche im Schmelztiegel: Sie zeigen für jeden untersuchten Glastyp die Blasen(größen)verteilung in Abhängigkeit vom jeweils eingesetzten Läutermittel und dessen Konzentration sowie der Temperatur und Haltezeit. Diese Parameter und Werte fließen in das Qualitätsmodell ein und werden in der Simulation auf die reale Wannendimension übertragen.

Um nun das Verhalten von Blasen in der Wanne zu beschreiben, kommen sogenannte Tracer zum Einsatz. 100.000 dieser simulierten Marker durchlaufen auf verschiedenen Pfaden die modellierten unterschiedlichen Strömungen und Temperaturzonen – je nach Anlagen-Design und -Setup. Eine Statistik dazu gibt dann Auskunft über die Blasengrößen, -verteilung und -last im und am Ende des Schmelz- bzw. Läuterprozesses. „Die nächste Simulationsstufe wird auch die Rückwirkung der Blasen auf den Läuterprozess einbeziehen. Denn je nach Blasenlast verändern sich auch die physikalischen und chemischen Bedingungen im Prozess“, so Dr. Berndhäuser.

Solche Fragen und Erkenntnisse sind zugleich Ausgangspunkt für optimierte Konzepte der Schmelzwannen-Konstruktion und -Einstellung – insbesondere zur Umstellung auf eine umweltverträglichere Läuterchemie ohne Schwermetalle. Die SCHOTT Forschung führt dazu ein umfassendes Entwicklungsprojekt durch. Dabei ist eines schon sicher: Der Fortschritt der Simulation wird es nicht leichter machen, Einsteins Motto der Einfachheit umzusetzen. < eric.urruti@us.schott.com

“Computer simulation will soon become standard” „Simulation wird bald Standard sein“

Prof. Walter Kob, the winner of the 2007 Otto Schott Research Award and an expert in the area of computer simulation for use in material sciences, on the current status and prospects of this future-oriented topic.

Prof. Dr. Walter Kob, Träger des Otto-Schott-Forschungspreises 2007 und eine Koryphäe auf dem Feld der Computersimulation in der Materialwissenschaft, über Status Quo und Perspektiven dieses Zukunftsthemas.

solutions: Professor Kob, where are computer simulations being used successfully today?

Kob: Mainly in the chemical and pharmaceutical industries. These industries started using it over 20 years ago. Simulations have been used there first on the atomic level to learn more about the properties of molecules. They have also been applied to improve metal or polymeric materials for quite some time now. But in the last ten years the glass industry has made increasingly use of this approach.

solutions: How advanced is simulation of glass compared to other materials?

Kob: It is gaining ground fast. However metals have an ordered crystalline structure and can therefore be simulated relatively easily. Also the questions that arise concerning plastics are usually simpler because we understand the local structure of polymers. However, with an amorphous material such as glass, the structure and its changes can be relatively difficult to predict if, for example, even only one of the elements of the formula is exchanged. For this reason, atomistic simulation is more difficult in this case, but also particularly valuable.

solutions: When will it be possible to use modeling to design materials and their properties on the drawing board?

Kob: This is already being done to optimize products in the pharmaceutical and chemicals industries. I am also convinced that in the near future an idea will be tested first by performing computer simulation instead of laboratory trials. The material will not be manufactured in the laboratory until after we have seen that the results are promising. This is already being done and will become standard practice in the glass industry in five to ten years – at least in large companies that have sufficient research resources, like SCHOTT. <



Photo Foto : SCHOTT/A. Sell

Prof. Dr. Walter Kob, Professor of Physics at Montpellier University in France, spoke last November before 50 participants in the international SCHOTT expert panel on “Computer Simulation of Material Structures and Properties.”

Prof. Dr. Walter Kob, Professor für Physik an der französischen Universität Montpellier, sprach im vergangenen November vor über 50 Teilnehmern des internationalen SCHOTT Experten-Panels „Computersimulation von Materialstrukturen und -eigenschaften“.

solutions: Herr Prof. Kob, wo wird Computersimulation heute schon nutzbringend eingesetzt?

Kob: Vor allem in der Chemie- und Pharmaindustrie, die schon vor über 20 Jahren damit begonnen haben. Dort wurde Simulation erstmals auf atomistischer Ebene angewandt, etwa um die Eigenschaften von Molekülen zu erforschen. Sie wird seit längerem auch eingesetzt, um Metalle oder polymerische Materialien zu verbessern. Seit gut zehn Jahren fasst sie aber auch immer stärker in der Glasindustrie Fuß.

solutions: Wie weit ist die Simulation von Glas gegenüber der von anderen Materialien?

Kob: Sie holt immer mehr auf. Dazu ist zu sagen: Metalle haben eine geordnete Kristallstruktur, deshalb ist deren Simulation relativ einfach. Auch bei Kunststoffen sind

die Fragestellungen oft einfacher, da die lokale Struktur der Polymere bekannt ist. Bei einem amorphen Material wie Glas lassen sich aber die Strukturen und deren Veränderungen – etwa beim Austausch nur eines Elements in der Zusammensetzung – relativ schwer voraussagen. Deshalb ist in diesem Fall die atomistische Simulation schwieriger, aber besonders wertvoll.

solutions: Wann werden sich Materialien und ihre Eigenschaften wie am Reißbrett per Modellierung entwerfen lassen?

Kob: In der Pharma- und Chemieindustrie ist das schon der Fall, etwa zur Produktoptimierung. Was aus meiner Sicht bald geschehen wird: In näherer Zukunft wird eine Idee zuerst nicht mehr per Laborversuch getestet sondern per Computersimulation. Erst wenn das Resultat vielversprechend erscheint, wird man das Material im Labor herstellen. Das hat schon angefangen und wird in fünf bis zehn Jahren auch in der Glasindustrie Standard sein – jedenfalls bei großen Firmen mit Forschungsressourcen wie etwa SCHOTT. <