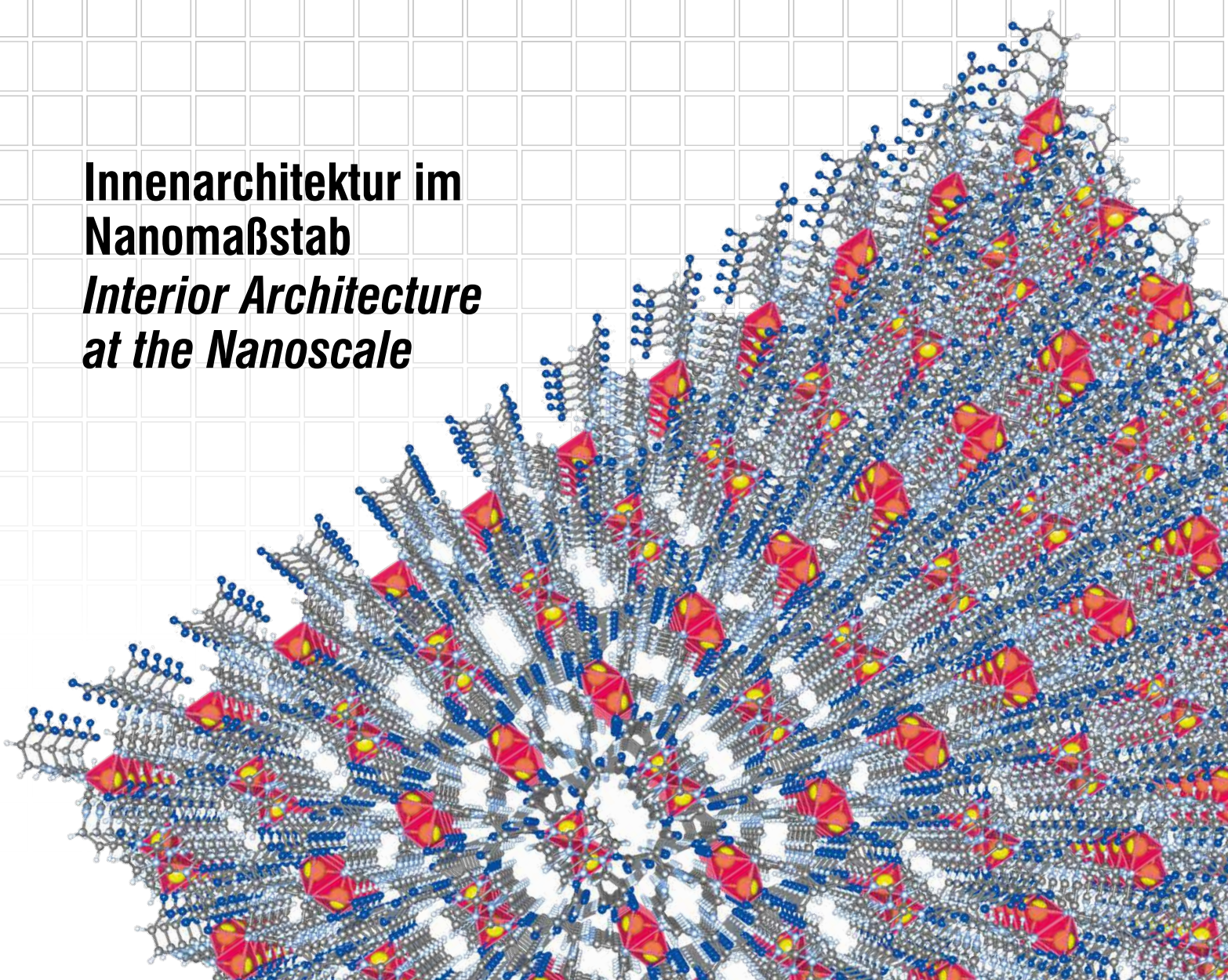


TU GR *research*

Innenarchitektur im Nanomaßstab *Interior Architecture at the Nanoscale*



Christian Doppler Labor für Design von Hochleistungslegierungen durch thermomechanisches Processing ■ „Liebling, ich habe das Labor geschrumpft“ ■ Effiziente Dimensionsreduktion durch dynamische funktionale Hauptkomponenten ■ Die Abgasgesetzgebung Euro 6d für Dieselmotoren ■ Innovative Wärmepumpensysteme zur hocheffizienten Bereitstellung von Wärme

Christian Doppler Laboratory for Design of High-performance Alloys by Thermomechanical Processing ■ “Honey, I shrank the lab” ■ Efficient Dimension Reduction using Dynamic Functional Principal Components ■ Emission Standard Euro 6d for Diesel Engines ■ Innovative Heat Pumping Systems for High-Efficiency Heat Supply

Inhalt/Contents

3 Vorwort / Preface

On the Top

4 Innenarchitektur im Nanomaßstab *Interior Architecture at the Nanoscale*



© C. Slugove – ICTM – TU Graz

Fields of Expertise

WISSENSCHAFTERINNEN UND WISSENSCHAFTLER PRÄSENTIEREN AUSGEWÄHLTE PROJEKTE UND FORSCHUNGSBEREICHE IM RAHMEN DER FÜNF FIELDS OF EXPERTISE (FoE)

SCIENTISTS PRESENT SELECTED PROJECTS AND RESEARCH AREAS IN THE FRAMEWORK OF THE FIVE FIELDS OF EXPERTISE (FoE)

10 Advanced Materials Science Peter Hadley

11 Christian Doppler Labor für Design von Hochleistungslegierungen durch thermomechanisches Processing *Christian Doppler Laboratory for Design of High-Performance Alloys by Thermomechanical Processing* Cecilia Poletti, Friedrich Krumphals

14 Human & Biotechnology Bernd Nidetzky

15 „Liebling, ich habe das Labor geschrumpft“ *“Honey, I shrank the lab”* Torsten Mayr

18 Information, Communication & Computing Kay Uwe Römer

19 Effiziente Dimensionsreduktion durch dynamische funktionale Hauptkomponenten *Efficient Dimension Reduction using Dynamic Functional Principal Components* Siegfried Hörmann

22 Mobility & Production Franz Haas

23 Die Abgasgesetzgebung Euro 6d für Dieselmotoren *Emission Standard Euro 6d for Diesel Engines* Eberhard Schutting

26 Sustainable Systems Urs Leonhard Hirschberg

27 Innovative Wärmepumpensysteme zur hocheffizienten Bereitstellung von Wärme *Innovative Heat Pumping Systems for High-Efficiency Heat Supply* René Rieberer

Life

FORSCHUNG UND TECHNIK IM ALLTÄGLICHEN – WIE FORSCHUNGSERGEBNISSE AUF UNSER LEBEN WIRKEN UND ES VERBESSERN KÖNNEN

RESEARCH AND TECHNOLOGY IN EVERYDAY LIFE: HOW RESULTS OF RESEARCH AFFECT OUR LIVES AND CAN IMPROVE THEM

30 Eine Umleitung für die Handfunktion *Rerouting the Function of the Hand*

Cooperations

GEMEINSAM FORSCHEN UND ENTWICKELN – WIE SPEZIALISIERTE INTERDISZIPLINÄRE ZUSAMMENARBEIT IN ERFOLG UND WEITERENTWICKLUNG RESULTIERT

CONDUCTING RESEARCH AND DEVELOPMENT TOGETHER: HOW INTERDISCIPLINARY COOPERATION BETWEEN EXPERTS LEADS TO SUCCESS AND FURTHER DEVELOPMENT

33 Zusammenspiel von Mensch und Maschine in komplexen Produktionssystemen *Human and Machine Interaction in Complex Production Systems*

Internationalisation

EXZELLENT FÖRDERTE RESEARCH STREBT NACH LEBENDIGEM AUSTAUSCH IN GLOBALEN NETZWERKEN – WIE DIE TU GRAZ DEN INTERNATIONALEN FORSCHUNGSDIALOG LEBT

EXCELLENT RESEARCH ASPIRES TO A LIVELY EXCHANGE IN THE GLOBAL NETWORK: GRAZ UNIVERSITY OF TECHNOLOGY AND INTERNATIONAL RESEARCH DIALOGUE

36 Hochauflösende Temperaturmessung für Smart Production *High-Resolution Temperature measurement for Smart Production*



Horst Bischof
Vizerektor für Forschung
Vice Rector for Research

**Liebe Kolleginnen und Kollegen, sehr geehrte Forschungspartnerinnen und -partner
und an unserer Forschung Interessierte!**

Dear colleagues, research partners and those interested in our research,

Die TU Graz ist gerade in einer intensiven Phase: Nach der Besetzung und Konstituierung des neuen Universitätsrates und der Formulierung des Entwicklungsplans sind wir bereits mitten in der Erstellung und den Verhandlungen der Leistungsvereinbarungen mit dem Ministerium. Da die Bundesregierung deutlich mehr Geld für die Universitäten zur Verfügung stellt und wir bei allen Berechnungen über die zukünftige Verteilung des Hochschulbudgets gut abschneiden, gehen wir davon aus, dass es diesmal doch ein Plus an Geld (auch nach Inflation und Struktureffekten) geben wird. Dieses Plus ermöglicht es uns, Freiräume zu schaffen, die wir dringend brauchen, um neue Initiativen zu setzen. Auch im Bereich der Forschung wollen wir die nächsten Schritte setzen. Neben dem Weiterführen der erfolgreichen Formate, wie zum Beispiel der Anschubfinanzierung und der Leadprojekte, wollen wir (sofern es uns die Leistungsvereinbarungsverhandlungen erlauben) neue Initiativen rund um Forschungsinfrastruktur und Forschungspersonal starten. Modelle, die wir gerade entwickeln:

Matching Grants für Forschungsinfrastruktur: Dringend benötigte Investitionen in die Forschungsinfrastruktur (leider sind diese Töpfe in den letzten Jahren entweder nicht vorhanden oder stark unterdotiert), die von mehreren Instituten/Fakultäten gebraucht werden, sollen durch Co-Finanzierung unterstützt werden.

Laufbahnstellen für FoE: Der Erfolg unserer FoE-Professuren hat gezeigt, dass es wichtig ist, junge Kolleginnen und Kollegen (High Potentials) von außen an die TU Graz zu holen. Da befristete Professuren ein etwas schwerfälliges Instrument sind, haben wir uns entschieden, je FoE eine Laufbahnstelle einzurichten. Diese soll möglichst breit ausgeschrieben werden und jene Bewerberinnen und Bewerber mit dem größten Potenzial zum Zug kommen lassen.

Lassen Sie uns hoffen, dass wir möglichst viele der Initiativen umsetzen können und so die bereits sehr erfolgreiche Forschung der TU Graz weiter beflügeln können.

Der Sommer und die Ferien stehen vor der Tür, genau rechtzeitig erscheint dieses TU Graz *research*, denn jetzt sollte auch ein wenig Zeit sein, sich den interessanten Artikeln dieser Ausgabe zu widmen. In diesem Sinne wünsche ich bei der Lektüre dieses TU Graz *research* viel Freude und Ihnen und Ihren Familien einen erholsamen Sommer.

TU Graz is currently going through a very intensive phase. After the new University Council was installed and constituted, and the development plan drafted, we are now in the middle of establishing and negotiating the Performance Agreement with the ministry. After the federal government has made significantly more funds available to the universities – and all things considered, we will come off quite well with respect to the future allocation of the university budget – we assume that this time there will be a surplus of funds (even after inflation and structural effects). This surplus will allow us to create more headway that we urgently need to launch new initiatives. We also want to implement the next steps in the field of research. In addition to continuing our successful measures, such as start-up funding and lead projects, and so on, we would like to launch new initiatives for research infrastructure and research personnel (provided the negotiations of the performance agreement allow for this). Models we are currently developing:


Matching grants for research infrastructure: Urgently required investments in research infrastructure (unfortunately these funds were either not available in the last few years or were extremely under-resourced) which are needed by a number of institutes and faculties should be supported through co-financing.

Tenure track positions for FoE: The success of our FoE professorships has shown that it is important to bring young colleagues (high potentials) from outside to TU Graz. Because fixed-term professorships are rather cumbersome instruments, we have decided to set up a tenure track position for each FoE. They should be advertised as widely as possible and attract those applicants with the greatest potential.

Let us hope that we can implement as many of the initiatives as possible and continue to spur on TU Graz's already successful research.

The summer and the summer vacation are just around the corner. This issue of TU Graz research has come out at the right moment since only now is there enough time to devote to the interesting articles in it. In this spirit I hope you enjoy reading this issue, and I wish you and your families a relaxing and pleasant summer.

Horst Bischof



Innenarchitektur im Nanomaßstab *Interior Architecture at the Nanoscale*

So winzig mikroporöse Kristalle sind, so enorm ist ihr Potenzial. Um dieses zu erkunden und auszuschöpfen, wurde an der TU Graz das interdisziplinäre Leadprojekt „Porous Materials@Work“ ins Leben gerufen. Durch die Verbindung von Grundlagenforschung und Anwendungswissen sollen poröse Materialien für völlig neue Einsatzbereiche etwa in der Sensorik, der Mikroelektronik, der Energiespeicherung oder der Medikamentenproduktion entstehen.

Wir leben in und mit Hohlräumen. Sind doch Zimmer nichts anderes als die Hohlräume von Gebäuden. Und auch diese selbst bestehen aus Materialien voller Hohlräume. Poröses Material umgibt uns praktisch immer und überall – in der Natur genauso wie in der Technik. Selbst die Karosserie unserer Autos wird immer poröser, um Gewicht und damit Treibstoff zu sparen. Hohlräume sind unglaublich wirkmächtig, denn sie prägen und verändern den Charakter von Stoffen. Macht man ein Material wie Glas durch Einbringen von Luft porös, kann dieses zum Waschmittel mutieren und den Schmutz in seinen Hohlräumen fangen. „In Hinblick auf die chemische Zusam-

Although microporous crystals are tiny, their potential is enormous. To exploit this, TU Graz has initiated the interdisciplinary lead project Porous Materials@Work. It will combine scientific knowledge and technological expertise to realize porous materials for novel applications in the areas of sensors, microelectronics, energy storage, and production of pharmaceuticals.

Our life occurs in voids; for example, rooms in buildings are nothing but voids and these rooms and the furniture in them consist of materials full of voids. Porous materials are omnipresent – both in nature and in technology. Even the bodies of our cars become increasingly porous – in this case to reduce weight and to save fuel. Voids are extremely powerful, determining and changing the character of substances. Making a material porous by inflating it with air can change it into a detergent, trapping dirt in its voids. “The chemical composition of a material does not change by making it porous. Its modified architecture, however, completely changes its properties and, thus, its fields of application,” attests Christian Slugovc from the Institute for Chem-



© C. Slugovc – ICTM – TU Graz

Abbildung 1:
Wenn Kristalle bereits im Reaktionsgefäß kristallisieren, bricht meist Freude im Labor aus.

Figure 1:
When crystals start to grow in the reaction vessel, joy breaks out in the lab.

mensetzung ändert sich durch die Schaffung von Hohlräumen zwar nichts, durch die veränderte Architektur des Materials verwandeln sich jedoch die Eigenschaften und damit auch die Einsatzbereiche“, erklärt Christian Slugovc vom Institut für Chemische Technologie von Materialien die enorme Bedeutung von Hohlräumen. Manche Anwendungen funktionieren überhaupt nur über die Porosität eines Stoffes. Wie etwa der Auto-Katalysator, der aus einem mit Katalysatorstoffen befüllten hochporösen Keramikkörper besteht.

Winzige Poren, riesige Speicher

An der TU Graz beschäftigt sich ein multidisziplinäres Konsortium von 14 Forscherinnen und Forschern aus den Bereichen Materialwissenschaften, Chemie, Physik, Elektrotechnik und Biotechnologie mit einer speziellen Form der Porosität, nämlich mit Poren im Nanomaßstab. Eine wichtige Rolle spielen dabei mikroporöse Kristalle, in denen Metallionen durch organische Brücken verbunden sind – man spricht hier von sogenannten Metal-organic frameworks (MOFs). Diese verfügen wegen ihrer hohen Porosität über extrem große „innere Oberflächen“ und bergen deshalb beachtliche Potenziale in sich. So besitzen ein paar Kubikzentimeter dieser metallorganischen Gerüste in etwa die Oberfläche eines Fußballfeldes. In den unzähligen winzigen Poren kann sich alles Mögliche einnisten – Schadstoffe ebenso wie Medikamente.

Im mit 1,5 Millionen Euro geförderten fachübergreifenden Großprojekt wollen sich die Forscherinnen und Forscher aber nicht nur auf MOFs konzentrieren, sondern beispielsweise auch nanoporöse Metalle oder das Porennetzwerk von Papier untersuchen. „Uns geht es vor allem darum, die Eigenschaften der Poren gezielt zu gestalten – also ihre Größe, ihre Verteilung oder ihr Verhältnis zum dichten Material“, betont Paolo Falcaro, der >

istry and Technology of Materials, stressing the enormous relevance of voids. Many applications rely entirely on the porosity of a material. This applies, for example, to catalytic converters, which are mostly based on highly porous ceramics filled with catalysts.

Tiny pores, huge reservoir

At TU Graz, a multidisciplinary consortium consisting of 14 scientists from the areas of materials science, chemistry, physics, electrical engineering and biotechnology is concerned with a special type of porosity relying on pore sizes in the nanometer range. An important role in this context is played by microporous crystals, in which metal ions are connected by organic linkers (so-called metal-organic frameworks or MOFs). Due to their high porosity they make up a huge internal surface area providing them with an enormous potential for a variety of applications. A few cubic centimeters of these metal-organic scaffolds, for example, contain the surface area of a soccer field. The tiny pores can accommodate a variety of substances ranging from dirt to medicines. Using funding to the amount of 1.5m euros from the interdisciplinary large-scale project, the scientists don't want to focus solely >



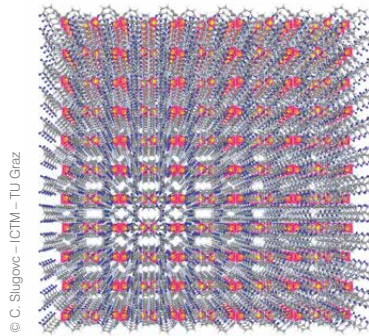
© C. Slugovc – ICTM – TU Graz

Abbildung 2:
Kristalle von GUT-2. Die Namensgebung von Metal-organic frameworks basiert meist auf dem Akronym der Institution, an der diese erstmals hergestellt worden sind (Graz University of Technology eignet sich da ja besonders) und einer fortlaufenden Nummer.

Figure 2:
Crystals of GUT-2. For the choice of the name of a metal-organic framework, in many cases the acronym of the research institution is chosen followed by a consecutive number.

Abbildung 3:
Darstellung des molekularen
Aufbaus von GUT-2.

Figure 3:
*Depiction of the molecular
structure of GUT-2.*



gemeinsam mit Christian Slugovc und Egbert Zojer vom Institut für Festkörperphysik das Projekt leitet. „Denn die Eigenschaften der Porosität beeinflussen die Qualität eines Materials ganz entscheidend.“ Kann man also das Wachstum von MOFs kontrollieren, lassen sich Materialien für die unterschiedlichsten Anwendungsbereiche „designen“. „Ein und dasselbe Material kann durch eine unterschiedliche Anordnung und Ausrichtung der Kristalle ganz verschiedene Eigenschaften bekommen“, so der Professor für Bio-based Materials Technology an der TU Graz.

Gebündelte TU Graz-Expertise

Seit Jahren beschäftigt sich eine Reihe von Forscherinnen und Forschern an der TU Graz mit verschiedenen Aspekten von porösen Materialien, weil diese in vielen Bereichen für unterschiedlichste Anwendungen gebraucht werden. Diese verstreute Expertise soll im Leadprojekt nun gebündelt werden. Mit Paolo Falcaro, der seit zwei Jahren an der Fakultät für Technische Chemie, Verfahrenstechnik und Biotechnologie forscht und lehrt, konnte zudem ein international anerkannter Experte und wissenschaftlicher Vorreiter im Bereich der porösen Materialien an die TU Graz geholt werden. Für seine Forschung an mikroporösen Materialien erhielt er kürzlich einen mit rund zwei Millionen Euro dotierten Consolidator Grant des European Research Council (ERC).

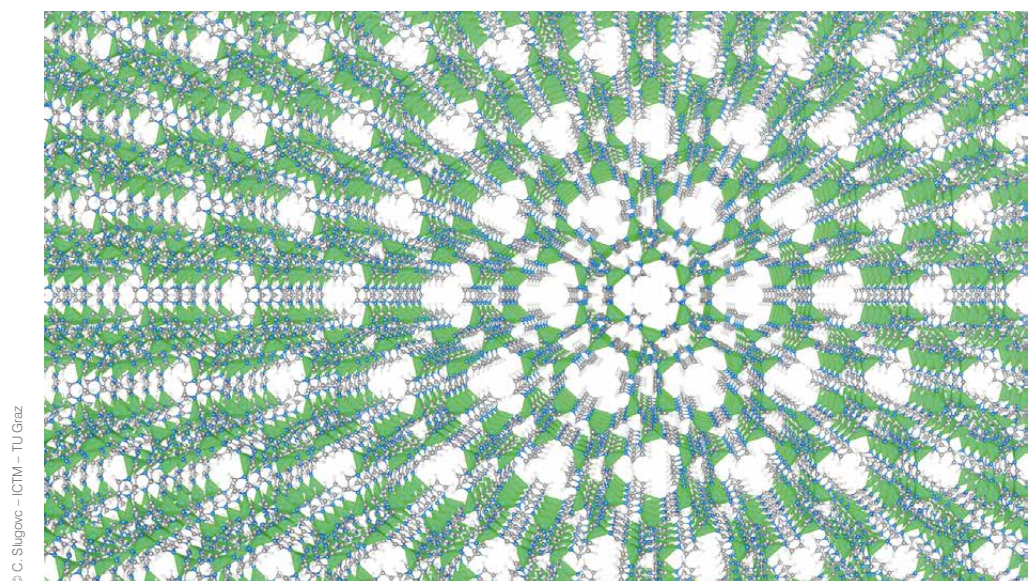
on MOFs, but also other important porous materials, such as nanoporous metals and paper. “Our goal is to control the properties of the pores in a precise manner, manipulating their size, distribution and also the ratio between pores and dense material,” stresses Paolo Falcaro who, together with Christian Slugovc and Egbert Zojer of the Institute of Solid State Physics, leads the Porous Materials@Work project. “These characteristics of porosity have a decisive impact on the quality of a material.” As soon as one can control the growth of MOFs, materials for a variety of applications can be “designed”. “Depending on the arrangement and texture of the crystals the same material can exhibit different properties,” stresses the Professor for Biobased Materials Technology at TU Graz.

Focused TU Graz expertise

For years, a number of scientists at TU Graz have been concerned with a variety of aspects of porous materials, as they are needed in many areas for numerous applications. A goal of the lead project is to focus this scattered expertise. Moreover, by hiring Paolo Falcaro at the Faculty of Technical Chemistry, Chemical and Process Engineering, Biotechnology two years ago, an internationally established expert and scientific pioneer in the area of porous materials, TU Graz has significantly strengthened its knowledge base and reputation in this seminal field. For his research on microporous materials, he has recently been awarded approx. 2m euros of funding through a Consolidator Grant from the European Research Council (ERC). So far, apart from TU Graz there is no other institution in Austria that explicitly focuses its research on porous materials. Even worldwide, there are only few centers concentrating on this crucial interdisciplinary topic. The ambitious goal of the TU Graz scientists is to “eventually become one of the top three research centers for porous materials”, as Paolo Falcaro has

Abbildung 4:
Darstellung des molekularen Aufbaus
von ZIF-8. ZIF-8 wird in einigen
Teilprojekten eingesetzt.

Figure 4:
*Depiction of the molecular structure
of ZIF-8, a workhorse in some
of the subprojects.*



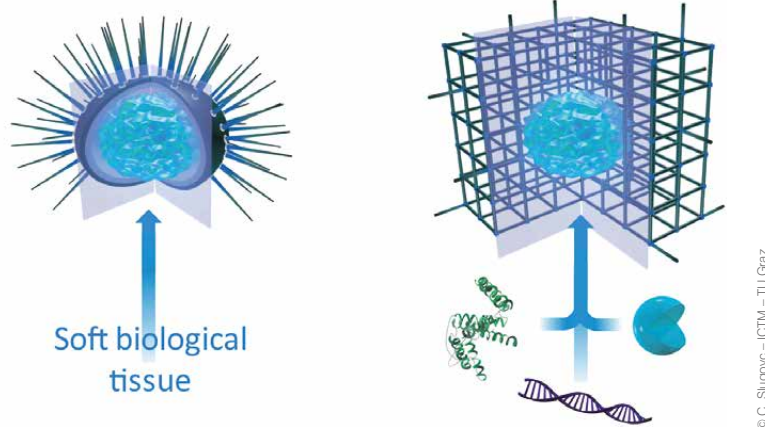


Abbildung 5:
Biomimetischer Zugang zur Einkapselung von Proteinen, Enzymen oder DNA in Metal-organic frameworks.

Figure 5:
Biomimetic approach towards the encapsulation of proteins, enzymes or DNA in metal-organic frameworks.

Bislang gibt es in Österreich neben der TU Graz keine einzige Einrichtung, die explizit an porösen Materialien forscht. Insgesamt existieren weltweit nur wenige Zentren, die sich dieser für so viele Bereiche wichtigen Querschnittsmaterie widmen. Ambitioniertes Ziel der Grazer Projektgruppe: „Wir wollen mittelfristig eines der drei besten Forschungszentren für poröse Materialien werden“, erklärt Paolo Falcaro selbstbewusst. Immerhin müsse man an der TU Graz nicht erst bei null beginnen. Vielmehr gehe es darum, das vorhandene Know-how zusammenzubringen und durch die Verknüpfung unterschiedlicher Sichtweisen zu neuen Erkenntnissen und einem umfassenden Verständnis von porösen Materialien zu gelangen. „Interdisziplinarität ist ein zentraler Schlüssel zum Erfolg“, so Falcaro. „Deshalb arbeiten an diesem Projekt jetzt schon Forschende aus vier Fakultäten mit.“ Die Grazer Expertise im Feld der porösen Materialien geht aber weit über die hier zusammengefassten Arbeitsgruppen hinaus: „Unser erklärtes Ziel ist deshalb, weitere Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler ins Boot zu holen und so den Grundstein für eine nachhaltige Entwicklung zu legen“, betont der Festkörperphysiker Egbert Zojer. „Neue Grundlagenkenntnisse werden es uns letztlich erlauben, poröse Materialien so weit zu optimieren, dass verbesserte und völlig neue Anwendungen möglich werden“, ist der Wissenschaftler überzeugt. „An der TU Graz sind wir jedenfalls bestens gerüstet, in dieses unerforschte Terrain vorzudringen.“

Gut geschützte Medikamente

Die konsequente Verbindung von Grundlagenforschung und Anwendungswissen wird unter anderem im Bereich der nachhaltigen Energietechnik für Innovationen sorgen, beispielsweise bei der Herstellung von Photovoltaikanlagen oder bei der Energiespeicherung. Auch in der Medizin bzw. Medizintechnik oder der Pharmazie dürfte sich durch die Grazer Forschungsaktivitäten künftig einiges bewegen. So müssen heute etwa viele Medikamente bei tiefen Temperaturen >

stated. A big advantage in this context is that at TU Graz it is not necessary to start from scratch, rather the focus has to be on joining existing know-how and combining different views to generate new insights and a comprehensive understanding of porous materials. “Interdisciplinarity will be the key to success,” states Paolo Falcaro. “Therefore, even at this stage the project comprises scientists from four faculties.” The expertise on porous materials at TU Graz, however, reaches out far beyond the people already involved in the lead project: “For this reason it is one of our key goals to attract an even greater pool of scientists in this way laying the foundation for a sustainable development,” stresses solid-state physicist Egbert Zojer, one of the co-initiators of the project. The scientists are unanimously convinced that “fundamental discoveries will allow us to optimize porous materials to a degree that will make possible not only improved but also entirely new applications. At TU Graz we are definitely ready to enter into yet unexplored terrain.”

Well-protected drugs

The intensive link between basic research and experience in applications will trigger innovations, for example, in the area of environmental engineering and the fabrication of photovoltaic cells or >

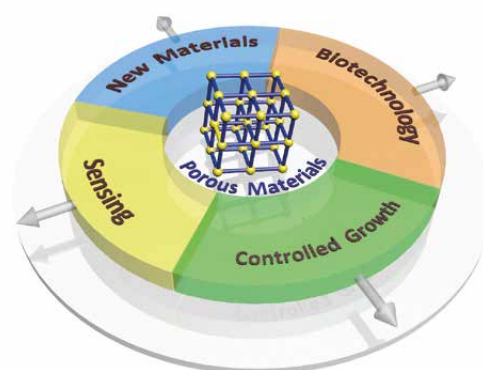
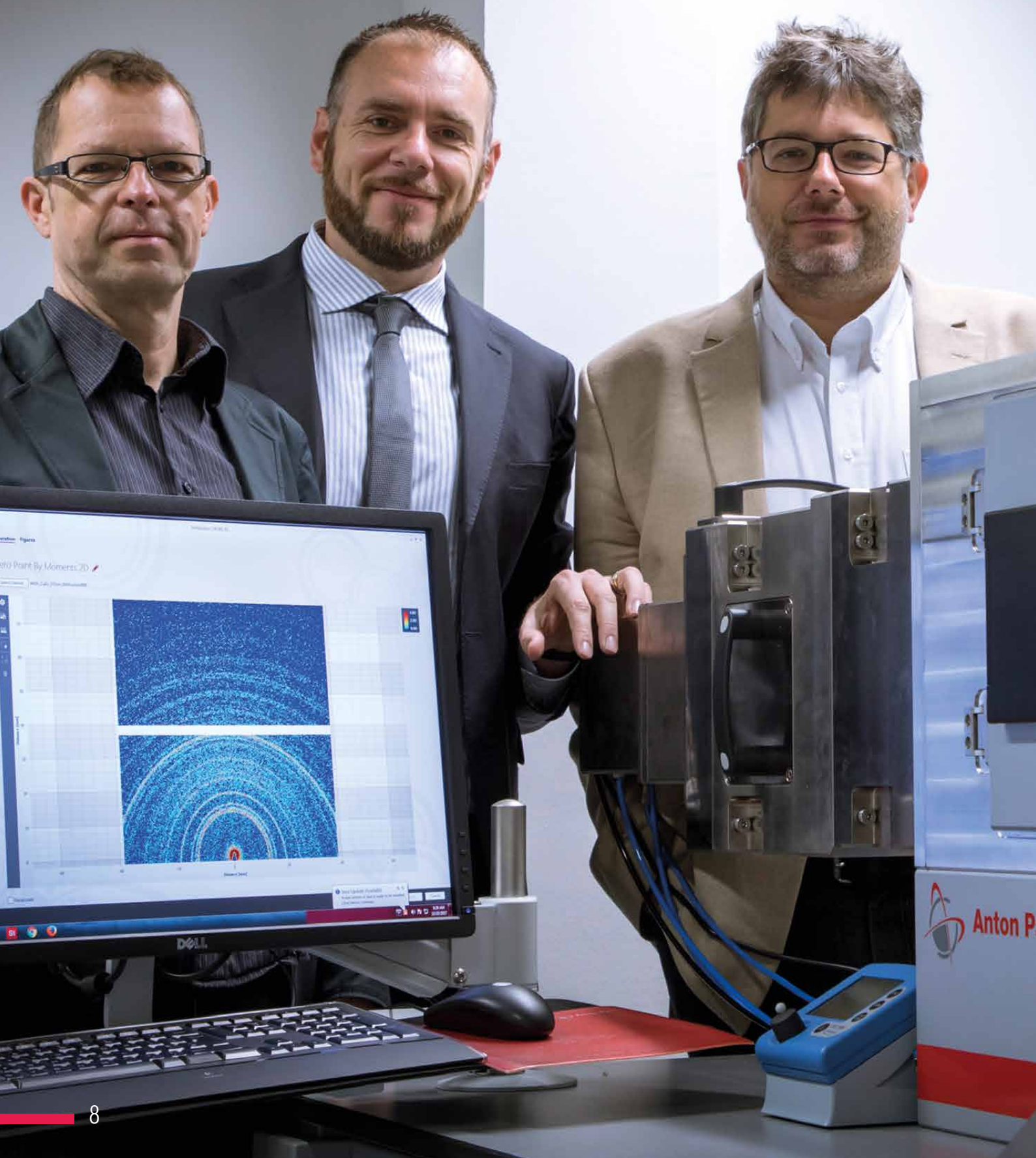



Abbildung 6:
Forschungsfelder des Lead-Projekts „Porous Materials@Work“.

Figure 6:
Research areas of the lead-project Porous Materials@Work.





gelagert werden, was zum einen hohe Lagerkosten verursacht, zum anderen den Transport sehr kompliziert macht. Hat man aber ein entsprechend behandeltes poröses „Verpackungsmaterial“ zur Verfügung, lassen sich diese Probleme vermeiden. „Wir versuchen, Enzyme, Proteine oder auch DNA in den Poren der MOFs einzukapseln und sie so gegen Temperaturschwankungen zu immunisieren“, erklärt Paolo Falcaro. „Die kristalline Struktur rund um den „Gast“ in der Pore schützt diesen sozusagen wie ein robuster Mantel.“

Strenge Ordnung

Während in der Natur die innere Architektur poröser Materialien meist etwas chaotisch ausfällt, bemüht man sich in der Forschung um rigide Ordnung in Hinblick auf Größe, Ausrichtung und Anordnung der Poren. „In der Praxis bringt die Porosität mitunter gar nichts, wenn die Poren sehr ungeordnet sind“, begründet Christian Slugovc das ausgeprägte Ordnungsstreben der Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler. „Am besten erfüllen die Poren ihre Aufgaben, wenn sie wie Soldat/innen ausgerichtet sind.“ Wie geordnet oder ungeordnet sie sich entwickeln, lässt sich über die Art des Kristallwachstums beeinflussen. „Durch Paolo Falcaro haben wir diesbezüglich einen großen Know-how-Vorsprung gegenüber anderen Forschungszentren“, freut sich der Chemiker. So beabsichtigt man etwa, ein Material zu entwickeln, in dem die Poren exakt übereinander angeordnet sind. Auf diese Weise könnte man nicht nur elektrische Leitfähigkeit erreichen, sondern auch – wenn man die Poren mit Elektrolyt füllt – eine Ionenleitung. Diese Materialeigenschaften sind in vielen Einsatzbereichen gefragt, etwa bei Batterien, in organischen Leuchtdioden oder Solarzellen. „Mit der gezielten Kristallherstellung hat man einen völlig neuen Zugang zur Entwicklung solcher Materialien“, erläutert Christian Slugovc. Ein großer Vorteil des interdisziplinären Konsortiums sei es auch, dass man Ideen aus der Grundlagenforschung in unterschiedlichsten Anwendungen testen und mögliche neue Einsatzfelder entdecken kann. Es dürfte also noch ziemlich spannend werden auf dieser Entdeckungsreise in die winzigen Hohlräume der Materie.

Text: Doris Griesser ■

the realization of energy storage applications. Also in the areas of medical and pharmaceutical engineering, the envisioned research activities will have a profound impact. For example, many drugs currently need to be stored at low temperatures, which increases costs and complicates their transport. These problems can be avoided, provided that a porous “packing material” becomes available. “We are working on the encapsulation of enzymes, proteins and DNA in the pores of MOFs to make them insensitive to temperature variations,” Paolo Falcaro explains. “The crystalline structure around the “guest” in the pore protects it like a tough coat.”

Strict order

In nature the internal architecture of porous materials is often quite chaotic. In contrast, in artificial materials the quest is usually for strict order regarding size, orientation and arrangement of the pores. “In many technical applications porosity only creates real benefits when pores are not strongly disordered,” explains Christian Slugovc, as a motivation for the scientists’ search for perfect order. “Typically, pores fulfill their tasks best, when they are strictly aligned like soldiers.” The degree of order can be controlled by crystal growth. “With Paolo Falcaro we have a clear competitive edge in this context,” the chemist states enthusiastically. Another goal of the research in Porous Materials@Work is the realization of material with a perfect horizontal arrangement of the pores to bring about high electrical conductivities. Combined with ionic conductivity achieved by filling the pores with an electrolyte, such materials will be highly attractive for many applications, including batteries, light-emitting devices and solar cells. “The controlled fabrication of crystals will boost our possibilities for developing such materials,” Christian Slugovc explains. A further advantage of the interdisciplinary consortium is also that it will allow ideas developed in basic research to be tested and transferred to a broad field of applications. There will be many exciting possibilities ahead on this voyage of discovery into the smallest voids of matter.

Text: Doris Griesser ■

Abbildung 7:
Das Leitungsteam des Leadprojekts:
Christian Slugovc, Paolo Falcaro
und Egbert Zojer.

Figure 7:
Heading the lead project:
Christian Slugovc, Paolo Falcaro
and Egbert Zojer.



ADVANCED MATERIALS SCIENCE

Fields of Expertise TU Graz

Die Berechnung von Materialeigenschaften kann sehr computerintensiv sein. Als Beispiel soll die Austrittsarbeit eines Materials betrachtet werden. Die Austrittsarbeit ist die Energie, die benötigt wird, um ein Elektron von einer Oberfläche zu extrahieren. Diese Austrittsarbeit kann modifiziert werden, indem organische Moleküle auf die Oberfläche gesetzt werden. Wenn man 100 Moleküle auf eine Oberfläche setzen würde und jedes Molekül fünf stabile Orientierungen besitzt, erhält man $5^{100} = 7 \times 10^{69}$ mögliche Anordnungen, die jeweils unterschiedliche Austrittsarbeiten ergeben. Die Berechnung aller dieser Möglichkeiten bzw. Austrittsarbeiten ist nicht möglich, da die hierzu benötigten Computerressourcen nicht vorliegen.



© Lunghammer – TU Graz

Peter Hadley, Leitungsteam FoE
„Advanced Materials Science“
Peter Hadley, executive team FoE
Advanced Materials Science

Oliver Hofmann vom Institut für Festkörperphysik und sein Team widmen sich der Lösung solcher Probleme, wie der Berechnung der minimalen Austrittsarbeit durch maschinelles Lernen. Sie trainieren einen Computer, um die relevantesten Konfigurationen zu erkennen und diese dann zu berechnen. Hofmann wurden gemeinsam mit Kolleg/innen der Carnegie Mellon University, der Duke University, des Argonne National Laboratory, der Universität Potsdam, der TU München und der Aalto University insgesamt 160 Millionen Computerstunden auf einem IBM Blue Gene/Q Supercomputer am Argonne National Laboratory zuerkannt.

Dieses Projekt ist Teil des Programms „Innovative and Novel Computational Impact on Theory and Experiment (INCITE)“ an der Argonne Leadership Computing Facility (ALCF). Ziel des Projekts ist die Optimierung der Ladungsübertragung in Solarzellen. Es werden nicht nur die optimalen Materialien bestimmt, sondern es wird ein Produktionsprozess definiert, der die besten Materialien für diese Anwendung schafft. Eine detaillierte Projektbeschreibung kann in einem Artikel auf „Planet Research“ nachgelesen werden: www.tugraz.at/go/planet-research

Calculating properties of materials can be computationally intensive. Consider the calculation of the work function of a material. The work function is the amount of energy needed to extract an electron from a surface. The work function can be modified by putting organic molecules on the surface. If you put 100 molecules on a surface and each molecule has 5 stable orientations, there are $5^{100} = 7 \times 10^{69}$ arrangements each of which will give a different value for the work function. A brute force approach where you try out all possibilities will fail because the required computer facilities are not available.

Oliver Hofmann of the Institute of Solid State Physics and his team attack problems such as finding the minimum work function using machine learning. They train a computer to recognize the most relevant configurations and then calculate those. Together with colleagues from Carnegie Mellon University, Duke University, Argonne National Laboratory, the University of Potsdam, TU Munich, and Aalto University, Hofmann was granted a total of 160 million hours of computing time on the IBM Blue Gene/Q supercomputer at Argonne National Laboratory in 2018. This project is part of the program Innovative and Novel Computational Impact on Theory and Experiment (INCITE) at the Argonne Leadership Computing Facility (ALCF).

The goal of the project is to optimize charge transfer in solar cells. They not only find the optimal materials, but they also predict a fabrication process that will produce the best material for this application. This project is described in more detail in the Planet Research article: www.tugraz.at/go/planet-research-en



Christian Doppler Labor für Design von Hochleistungslegierungen durch thermomechanisches Processing

Christian Doppler Laboratory for Design of High-Performance Alloys by Thermomechanical Processing

Cecilia Poletti, Friedrich Krumphals

Die Motivation hinter dem CD-Labor liegt in der Komplexität der simultan auftretenden physikalischen Phänomene, die während des industriellen Herstellprozesses durch plastische Verformung und hohe Temperatur sowie in der Anwendung während thermomechanischer Belastungen auftreten. Unsere Hauptziele sind die Erklärung und Modellierung der Mikrostrukturentwicklung von Nichteisenmetallen während thermomechanischer Verarbeitungsprozesse, um eine hohe Leistung während des Betriebs zu erreichen.

Wir wenden eine Kombination von mehreren Methoden an, um unser Ziel zu erreichen: physikalische, phänomenologische und thermodynamische Modellierung, Finite-Elemente-Simulationen und experimentelle Untersuchungen. Die Ziele und die Methodik sind in den folgenden Abschnitten zusammengefasst.

Vereinheitlichung

Vereinheitlichung von Warmverarbeitungs-, Versetzungskriech- und Relaxationsphänomenen in einem einfachen physikalischen Modell, das für verschiedene Materialien verallgemeinert werden kann, ohne Genauigkeit und Vorhersagepotenzial zu verlieren. Allgemein haben Wissenschaftler/innen die Entwicklung von a) der Kriechdehnung während des Einsatzes bei hohen Temperaturen und Lasten, b) der Fließspannungen während der Warm- bzw. Kaltbearbeitung und c) der inneren Spannungen während der Wärmebehandlung getrennt modelliert. Die in der Literatur entwickelten Modelle waren phänomenologisch und physikalisch. Ein Ansatz für die Modellierung technischer Werkstoffe besteht in der Entwicklung der mathematischen und physikalischen Beschreibung der Mikrostruktur, stetiger konstitutiver Gleichungen und Ratengleichungen basierend auf internen Variablen.

Die Hauptaufgaben zur Entwicklung des vereinheitlichten Modells sind: eine eindeutige >

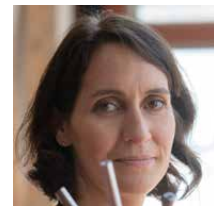
The motivation behind the CD-Laboratory is given by the complexity of simultaneously physical phenomena taking place during industrial processes that involve plastic deformation and heat, as well as during service under thermomechanical loads. Our main objectives are to explain and model the microstructure evolution of non-ferrous materials during thermomechanical processing routes to obtain high performance during service.

We apply a combination of methodologies to achieve our objective: physical, phenomenological and thermodynamic modelling, finite element simulations, and experimental testing. The goals and methodology are summarized in the following paragraphs.

Unification

Unification of hot working, dislocation creep and relaxation phenomena in one simple physical based model can be generalized for different materials without losing accuracy and prediction potential. In general, scientists have modelled separately the development of a) the creep strain during service at high temperatures and loads, b) the flow stresses during hot/cold working, and c) the internal stresses during relaxation treatments. The models developed in the literature have been phenomenological and physical. One approach for the physical materials modelling consists of developing the mathematical and physical description of the microstructure, consistent constitutive equations, and the internal variable rate equations.

The main tasks to develop the unified model are to find one unique description of the microstructure (such as in Fig. 1), to use the same internal variables, and to generate interchangeable constitutive equations. Further, the models can describe the microstructure evolution and the plastic response of the alloy along the processing chain, as well as in service. The internal variables to describe the microstructure include phases (deformable and >



© Lünghammer – TU Graz

Cecilia Poletti leitet das Christian Doppler Labor für Design von Hochleistungslegierungen durch thermomechanisches Processing.

Cecilia Poletti is head of the Christian Doppler Laboratory for Design of High-Performance Alloys by Thermomechanical Processing.



© Lünghammer – TU Graz

Friedrich Krumphals ist stellvertretender Leiter des Christian Doppler Labors für Design von Hochleistungslegierungen durch thermomechanisches Processing.

Friedrich Krumphals is deputy head of the Christian Doppler Laboratory for Design of High-Performance Alloys by Thermomechanical Processing.



Abbildung 1:
Das CD-Labor besteht aus drei
Modulen: Nickelbasislegierungen,
Titanlegierungen und
Aluminiumlegierungen.

Figure 1:
*The CD lab consists of 3 modules:
nickel-based alloys, titanium alloys
and aluminium alloys.*



Beschreibung der Mikrostruktur (wie in Abb.2) zu finden, die gleichen internen Variablen zu verwenden und untereinander austauschbare konstitutive Gleichungen zu formulieren. Ferner können die Modelle die Mikrostrukturentwicklung und das Umformverhalten der Legierung entlang der Verarbeitungskette sowie im Betrieb beschreiben. Die internen Variablen zur Beschreibung der Mikrostruktur beinhalten Phasen (verformbar und nicht verformbar), verschiedene Arten von Versetzungsdichten, Misorientierungen, Anteile von Grenzflächen usw. und deren zeitabhängige Entwicklung kann sowohl dynamische als auch statische Phänomene beschreiben.

Design

Design von Experimenten mit traditionellen und modernsten Technologien. In unserem CD-Labor sind Laborversuche erforderlich, um das Materialverhalten unter thermischen und mechanischen Belastungen zu verstehen und zu beschreiben sowie numerische Zusammenhänge und Daten zu erhalten. Die Entwicklung von Fließspannungen, Kriechdehnungen und Mikrostrukturmerkmalen wird durch Laborversuche dargestellt, die entweder dazu dienen, physikalische Phänomene zu isolieren oder industrielle Prozesse zu simulieren. Wir können auf eine Vielzahl an Infrastruktur und Gerätschaften auf der ganzen Welt zurückgreifen, um unsere Ziele zu erreichen.

In-situ-Experimente sind die Highlights dieses Labors. Da die Entwicklung mikrostruktureller Merkmale verstanden und quantifiziert werden muss, verwenden wir Methoden wie Dilatometrie, Differenzialkalorimetrie, Röntgenbeugung mit Synchro-

non-deformable), different type of dislocation densities, misorientations, fraction of boundaries, etc., and their evolution rates describe dynamic as well as static phenomena.

Design

Design of experiments using traditional and cutting-edge technologies. In our CD lab the experiments are essential to understand and describe the behaviour of the material under thermal and mechanical loads, as well as to obtain numerical correlations and data. The evolution of flow stresses, creep strains and microstructural features are generated from experiments designed either to isolate physical phenomena, or to simulate industrial processes. We use a good amount of equipment located all over the world to achieve our objectives.

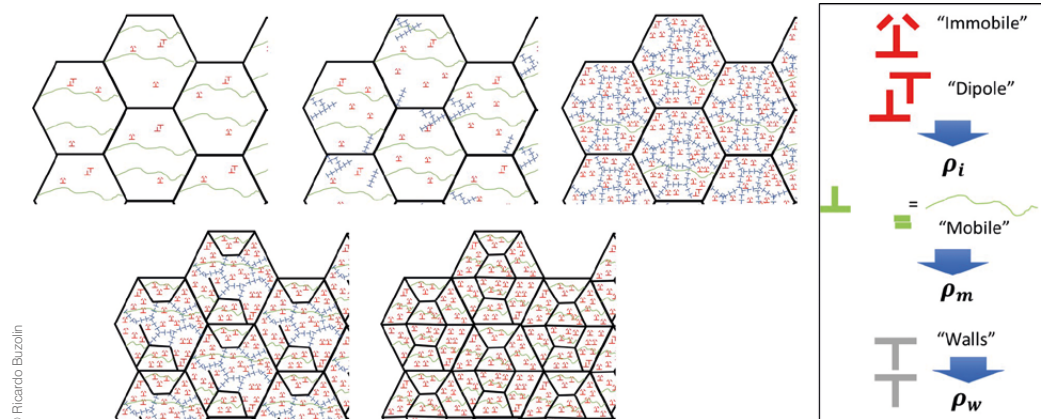
In situ experiments are the highlights of this laboratory. Since the evolution of microstructural features must be understood and quantified, we use methods such as dilatometry, differential calorimetry, X-ray diffraction with synchrotron sources, and microscopes with deformation/hot stages. These methods reduce the number of tests and allow the characterization of microstructural features in a way that is not possible when using post-mortem samples, because the cooling can cause allotropic phase transformations, formation of defects and/or precipitates, among other modifications.

Monitoring

Monitoring the temporal and dimensional multiscale phenomena. In the first case, the models must be able to describe fast phenomena such as dynamic recovery and recrystallization together with slow

Abbildung 2:
Mikrostrukturentwicklung während
der plastischen Verformung von
einphasigen Werkstoffen mit hoher
Stapelfehlerenergie: a) unverform-
tes Material, b) Bildung von
Versetzungen (immobile und Dipole)
und Versetzungen, die eine Zellwand
ausbilden, c) fortgeschrittene
dynamische Erholung und Bildung
von Substrukturen, d) Umwandlung
von Kleinwinkelkorngrenzen in
Großwinkelkorngrenzen,
e) vollständig rekristallisiertes Gefü-
ge durch kontinuierliche dynami-
sche Rekristallisation (Ricardo
Buzolin, Zwischenbericht, Modul 2).

Figure 2:
*Microstructural evolution during
plastic deformation of high-stacking
fault-energy single-phased
materials: a) undeformed material,
b) formation of interior dislocations
(immobile and dipoles) and wall
dislocations, c) advanced dynamic
recovery and formation of
substructure, d) transformation of
low-angle grain boundary into
high-angle grain boundary, and e)
fully recrystallized microstructure
by continuous dynamic recrystal-
lization (Ricardo Buzolin interme-
diate report, Module 2).*





tronquellen und Mikroskope mit Verformungs- und Temperaturstufen. Diese Verfahren reduzieren die Anzahl der Tests und ermöglichen die Charakterisierung von mikrostrukturellen Merkmalen in einer Weise, die bei Verwendung von nachträglich entnommenen Proben nicht möglich ist, da die Abkühlung neben anderen Modifikationen allotrope Phasenumwandlungen, die Bildung von Defekten bzw. Ausscheidungen verursachen kann.

Darstellung

Darstellung der zeitlichen und dimensionsgerechten Multiskalenphänomene. Im ersten Fall müssen die Modelle in der Lage sein, schnelle Phänomene wie dynamische Erholung und Rekristallisation zusammen mit langsamen Phänomenen wie Kornwachstum oder Kriechen zu beschreiben, ohne die Genauigkeit zu verlieren. Betrachtet man sowohl die Probenabmessungen als auch die Größenordnung der hergestellten Komponenten, ist es wichtig, die Streuung der mikrostrukturellen Eigenschaften zu bestimmen.

Wir erwarten Jahre interessanter Arbeit und sind zuversichtlich, neues Wissen über das Verhalten von Legierungen unter thermomechanischen Prozessen zu gewinnen.

Das Christian Doppler Labor für Design von Hochleistungslegierungen durch thermomechanisches Processing ist seit dem 1. Mai 2017 am Institut für Werkstoffkunde, Fügetechnik und Umformtechnik tätig. Die Arbeitsgruppe besteht aus Cecilia Poletti (Leitung), Friedrich Krumphals (Postdoc), Ricardo Buzolin, Kasyap Pradeep und René Wang (Doktoranden), Leander Herbitschek (Techniker) und Manuela Prader (Sekretärin). Die Unternehmenspartner sind die voestalpine BÖHLER Aerospace GmbH & Co. KG und die Nematik Linz GmbH. Das CD-Labor besteht aus drei Modulen: Nickelbasislegierungen, Titanlegierungen und Aluminiumlegierungen ■

phenomena such as grain growth or creep, without losing accuracy. When dealing with the geometry of samples as well as finished products, it is essential to determine the distribution of microstructural characteristics.

We expect years of interesting work and are confident about gaining new knowledge on the behaviour of alloys under thermomechanical treatments.

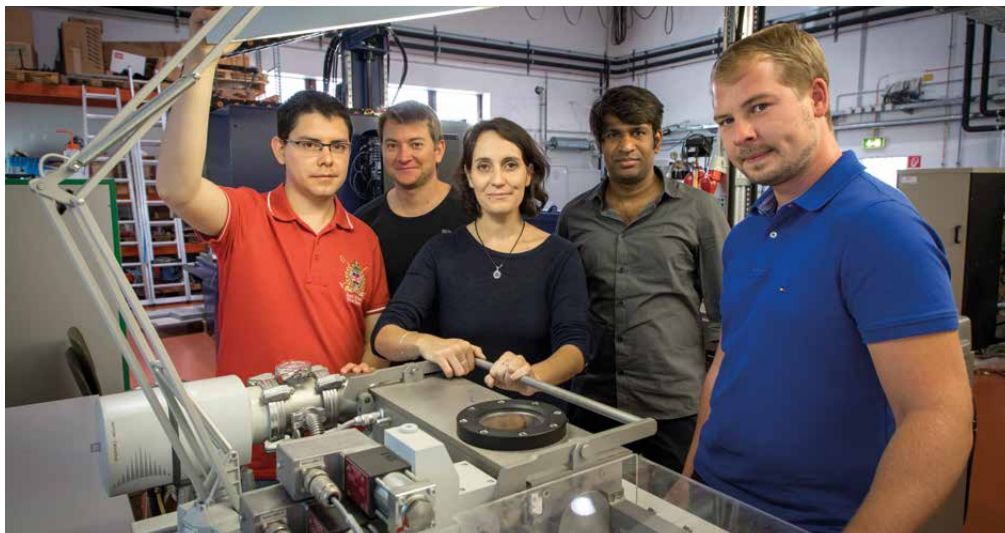


© Lunghammer – TU Graz

Abbildung 3:
Wie fest und thermisch beständig ein Produkt langfristig ist, hängt von thermomechanischen Verfahren während der Herstellung ab.

Figure 3:
The strength and thermal stability of a product depends on the thermomechanical treatments during production.

The Christian Doppler Laboratory for Design of High-Performance Alloys by Thermomechanical Processing was launched on 1st May 2017 at the Institute of Materials Science, Joining and Forming. The working group is composed of Cecilia Poletti (leadership), Friedrich Krumphals (post doc), Ricardo Buzolin, Kasyap Pradeep and René Wang (PhD candidates), Leander Herbitschek (technician) and Manuela Prader (secretary). The company partners are voestalpine BÖHLER Aerospace GmbH & Co KG, and Nematik Linz GmbH. The CD lab consists of 3 modules: Nickel-based alloys, Titanium alloys and Aluminium alloys. ■



© Lunghammer – TU Graz

Abbildung 4:
Cecilia Poletti und das wissenschaftliche Team.

Figure 4:
Cecilia Poletti and the scientific team.



HUMAN & BIOTECHNOLOGY

Fields of Expertise TU Graz

Die aktuelle Ausgabe des TU Graz research stellt für unser FoE „Human & Biotechnology“ zwei EU-Projekte in den Vordergrund: MoreGrasp und EuroMBR. Beide Projekte haben sich auch durch Beiträge auf unserer Homepage der Öffentlichkeit präsentiert. Die Artikel im TU Graz research bieten nun Gelegenheit, auf die Erfolge der abgeschlossenen Projekte zurückzublicken und mögliche Entwicklungen für die Zukunft aufzuzeigen. Erfreulicherweise wurden in der jüngeren Vergangenheit neue EU-Projekte im FoE „Human & Biotechnology“ bewilligt, über die an dieser Stelle sicher noch genauer berichtet werden wird. Neue Projekte betreffen die Horizon 2020-Programmlinien der „innovation actions“ und der „Marie Skłodowska-Curie actions“.

Eine Zusammenfassung der im FoE „Human & Biotechnology“ aktuell erfassten Projekte zeigt, dass EU-Projekte einen signifikanten Beitrag von 16 Prozent zur Gesamtzahl der Projekte von 67 leisten. Dies ist im Lichte der doch relativ niedrigen Bewilligungsquoten bei Anträgen für EU-Projekte bemerkenswert und soll an dieser Stelle positiv hervorgehoben werden. Wichtigste Förderinstitution für die aktuellen Projekte des FoE ist mit Abstand der Wissenschaftsfonds FWF mit einem Anteil von 48 Prozent. Ein Rückblick auf die in unserem FoE eingereichten und bewilligten Anschubfinanzierungen lässt einen ähnlichen Trend erkennen. Der überwiegende Anteil der Anträge betraf geplante FWF-Projekte. Industriennahe Projekte gefördert seitens der Österreichischen Forschungsförderungsgesellschaft FFG haben auf den ersten Blick einen vergleichsweise eher geringen Anteil von 15 Prozent. Forscher/innen-Gruppen aus unserem FoE sind jedoch sehr stark in laufende Kompetenzzentren, vor allem in das COMET K2-Zentrum acib, involviert. Projekte in den Kompetenzzentren werden in Kooperation mit der Industrie durchgeführt. Die aktuelle interne Statistik erfasst diese Projekte nicht.

Wir möchten in diesem Zusammenhang auf die aktuell laufende Ausschreibung für eine neue Runde der Anschubfinanzierung hinweisen. Interessierte Antragsteller/innen können diese Gelegenheit gerne nutzen. Wir regen an, zu berücksichtigen, dass eine beantragte Förderung aus dem Topf der Anschubfinanzierung gut begründet sein muss.

This issue of TU Graz research places emphasis on two EU projects from our FoE Human & Biotechnology: MoreGrasp and EuroMBR. Both projects have also been presented to the public on our homepage. The feature articles in TU Graz research provide opportunity to reflect on the successes of the now completed projects and to consider potential impact on future development. Fortunately new EU projects have recently been granted in the FoE Human & Biotechnology and there will surely be reports on these projects here. The new projects concern the programme lines innovation actions and the Marie Skłodowska-Curie actions.

The summary of the current projects in the FoE Human & Biotechnology shows that EU projects have a significant share of 16% in the total number of projects carried out, which is 67. This is remarkable considering the relatively low success rates of applications for EU projects and is therefore emphasized here as very positive. The most important funding institution by far is the Austrian Science Fund (FWF) with a share of 48%. A similar trend is recognized upon review of the past applications to the Initial Funding Programme submitted and granted within our FoE. The vast majority of applications concerned FWF projects in planning. Industry-related projects funded by the Austrian Research Promotion Agency (FFG) have at first glance a comparably low share of the total number of projects, amounting to only 15%. However, research groups in our FoE are strongly engaged in current research centers, in particular the COMET K2-Center acib. Projects within these research centers are carried out in collaboration with industry. The internal statistics referred to here does not register these projects.

We take this opportunity to draw attention to the current call for a new round of the Initial Funding Programme. Interested applicants should consider this opportunity. We suggest considering that good justification is needed for the funding requested from the Initial Funding Programme.

© Lunghammer – TU Graz



Bernd Nidetzky, Leitungsteam FoE „Human & Biotechnology“
Bernd Nidetzky, executive team FoE Human & Biotechnology



„Liebling, ich habe das Labor geschrumpft“ “Honey, I shrank the lab”

Torsten Mayr

Online-Analytik im geschrumpften Biotechnologie-Labor: Mikrobioreaktoren mit integrierten Sensoren ermöglichen verbesserte und gut kontrollierbare Reaktionsbedingungen und werden in der Biokatalyse, Prozessoptimierung und Zellkultivierung eingesetzt.

Mikrobioreaktoren sind verkleinerte Bioreaktoren mit Strukturen im Mikrometermaßstab. Sie sind ein Spezialgebiet der Mikrofluidik oder Lab-on-chip-Technologie und bestehen aus Kanälen und Kammern in Größen von 10 μm bis 3 mm und einer Tiefe von 10 bis 800 μm . Sie sind aus Glas, Silicium oder Polymermaterial gefertigt. Im Vergleich zu herkömmlichen Bioreaktoren zeichnen sich Mikrobioreaktoren aufgrund ihres kleinen Volumens durch einen schnelleren Wärmetransport, eine verbesserte Reaktionskontrolle, ein geringeres Sicherheitsrisiko, einen geringeren Material- und Energieeinsatz sowie eine höhere Produktausbeute aus und erlauben Experimente unter gut kontrollierbaren Versuchsbedingungen. Sie ermöglichen die Herstellung von kleinen Substanzmengen, können aber auch kontinuierlich betrieben werden. Mikrobioreaktoren haben das Potenzial, in zukünftigen industriellen Bioprozessen, der Prozessoptimierung, der Herstellung von personalisierter Medizin und Forschung und Entwicklung vermehrt zum Einsatz zu kommen.

Verkleinerter Maßstab

Mikrobioreaktoren gibt es in verschiedenen Designs, die von einfachen Kammern zu meanderförmigen Kanälen bis hin zu Kanälen mit gepackten Mikro-Partikeln reichen. Spezielle Strukturen können eingebracht werden, um eine gute Durchmischung zu ermöglichen.

Mikrobioreaktoren können für verschiedene Anwendungsbereiche eingesetzt werden. Für biokatalytische Anwendungen werden z. B. Enzyme auf die Oberfläche der Kanäle immobilisiert. Dies ermöglicht eine Wiederverwendung oder >

Online analysis in the miniature biotechnology lab: microbioreactors with integrated sensors enable improved and well-controlled reaction conditions to be produced and are increasingly used in biocatalysis, process optimisation, diagnosis and cell culturing.

Microbioreactors are miniaturised bioreactors with structures on the micrometre scale. They are a special field of microfluidics or lab-on-chip technology and consist of chambers and channels in sizes from 10 μm to 3 mm and depths from 10 to 800 μm . They are made of glass, silicone or polymeric materials. Compared with conventional bioreactors, and thanks to their small volume and shorter transport distances, microbioreactors are characterised by faster heat transport, improved reaction control, reduced safety risk, fewer material and energy requirements, and greater product yield. They allow the production of small amounts in batch, but also continuous production. Microbioreactors allow us to perform experiments in controllable test conditions and have the potential for use in all chemical and biochemical applications, e.g. industrial processing, process optimisation, preparation of personalized medicine and in laboratories for research and development.

Small scale

Microbioreactors are made in customized designs, ranging from simple chambers to meander-like structures or chambers packed with particles, so-called packed bed reactors. Special structures can be implemented to achieve a good mixing of the reactants. Microbioreactors are applied in various application fields, e.g. enzymes are immobilised on the surface of the channel walls to perform fast biocatalytic transformations at the micro scale. This enables the re-use or recovery of expensive enzymes or continuous processing in the flow. Microbioreactors are also employed for the investigation and optimisation of diverse process parameters. Researchers in process engineering aim to >



© Lurghammer – TU Graz

Torsten Mayr forscht und lehrt am Institut für Analytische Chemie und Lebensmittelchemie und beschäftigt sich mit seiner Arbeitsgruppe mit der Integration und Anwendung von optochemischen Sensoren in Mikrobioreaktoren.

Torsten Mayr and his team from the Institute of Analytical Chemistry and Food Chemistry focuses on the integration and application of optical chemical sensors in microbioreactors.



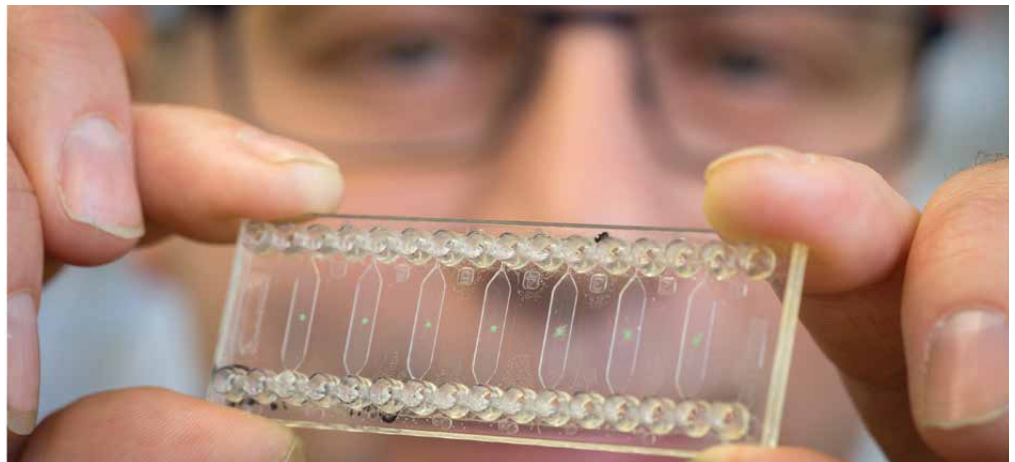
Abbildung 1:
Mikrofluidischer Chip mit integrier-
tem optischen Sensor (grüne Punkte)
für Sauerstoff, pH-Wert und Glucose.

Die Sensoren ermöglichen die
kontinuierliche Überwachung der
Zellviabilität und des Metabolismus.

Figure 1:

*Microfluidic chip for cell cultures
with integrated sensors (green spots
for oxygen, pH and glucose).*

*The sensors allow for a continuous
control of cell viability and
metabolism.*



© Lurghammer – TU Graz

Abbildung 2:
Typischer Messaufbau für mikroflui-
dische Reaktoren. Die Reaktions-
lösungen oder Zellmedien werden
mit Spritzenpumpen in den Reaktor
injiziert. Die Reaktionen können mit
integrierten Sensoren online
kontrolliert werden.

Figure 2:

*Typical set-up of microfluidic
reactors. Reagents and fluids are
injected into the reactor using
syringe pumps. The reaction can be
controlled in real-time with the
integrated sensors.*

Regeneration von teuren Enzymen oder ein konti-
nuierliches Betreiben der Reaktoren. Mikrobiore-
aktoren werden auch zur Untersuchung und Opti-
mierung von Prozessen eingesetzt. Hierbei wird
versucht, im Kleinen die besten Reaktions- und
Prozessbedingungen zu ermitteln, um dann Pro-
zesse im großen Maßstab zu optimieren. Die ent-
wickelten miniaturisierten Werkzeuge werden helfen,
Bioprozesse besser zu verstehen und deren Opti-
mierung einfacher zu machen. Für die Kultivierung
von Zellen und Mikroorganismen sind mikrofluidische
Systeme aufgrund der vergleichbaren Größenver-
hältnisse optimal geeignet. Im Vergleich zu statischen
in-vitro Kulturen in Petrischalen oder Schüttelkolben
lassen sich Scherkräfte und Nährstoffversorgung
nachbilden, wie sie unter physiologischen Bedin-
gungen zu finden sind. Zusätzlich können die Zell-
kulturbedingungen durch die automatische Kon-
trolle des Flusses reproduzierbar eingestellt werden.

Beschleunigte Forschung

Mikrobioreaktoren bieten durch ihre kleinen Dimen-
sionen und die genaue Kontrolle der Mikroumgebung

*determine the best process conditions to optimise
large-scale processes. The newly developed tools
will provide a better understanding of processes
and simplify and accelerate their optimisation. Mi-
croboreactors are also used for cell culturing. Mi-
crofluidic systems and cell cultures are a perfect
match because of their comparable sizes. In com-
parison to static culture dishes or shake flasks, they
enable microfluidics nutrient supply under relevant
shear force condition to be carried out as they can
be found under physiological conditions. In addition,
cell culture conditions can be adjusted by auto-
mated fluid handling with a high reproducibility.*

Accelerated research

*Microboreactors offer the possibility to accelerate
research and development in these fields due to
the small sizes and a precise control of the micro
environment. Integrated analytics are essential to
achieve a continuous monitoring and deeper insight
into the processes or biological systems investi-
gated. The key parameters measured in microbio
reactors are oxygen and pH. Optical chemical sen-*



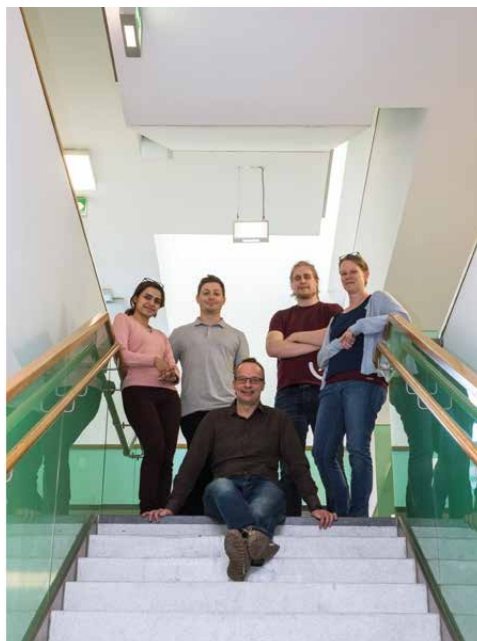
© Lurghammer – TU Graz

die Möglichkeit, Forschung und Entwicklung in diesen Bereichen zu beschleunigen. Hierzu ist eine Überwachung mit integrierten Analysensystemen nötig, um eine kontinuierliche Messung zu ermöglichen. Zu den wichtigsten Parametern, die in Mikrobioreaktoren online gemessen werden können, zählen die Sauerstoffkonzentration und der pH-Wert. Optochemische Sensoren kommen hier zur Anwendung, da sie viele Vorteile gegenüber anderen Messtechniken haben. Sie sind leicht integrierbar, nicht-invasiv und können kontaktlos mit Licht von außerhalb ausgelesen werden.

Jedoch stellen die kleinen Dimensionen im Mikrometerbereich hohe Anforderungen an die Materialchemie und die Messinstrumente. Optochemische Sensoren bestehen aus einem Polymerfilm, in dem ein lumineszierender Farbstoff eingebettet ist. Die Interaktion des Farbstoffs mit dem Analyten ändert die Lumineszenz-Eigenschaften des Farbstoffs und kann als analytische Information genutzt werden. Die Sensoren werden als dünne Filme oder Spots in Größenstrukturen von 100 bis 750 μm in die mikrofluidischen Systeme mittels Inkjet-Techniken integriert und können kontaktlos von außen mit Lichtleitern ausgelesen werden. Alternativ dazu können Sensornanopartikel direkt im Reaktionsmedium dispergiert verwendet werden.

Die integrierten Sensoren ermöglichen sowohl die Detektion der Umsetzung von Substanzen in biokatalytischer Anwendung als auch die Überwachung der Nährstoffversorgung in Zellkulturen. Ein sehr hohes Potenzial liegt in der Messung von Metabolismusraten, mit Sauerstoff-, pH- und Glucose-Sensoren, die auf bestimmte Zellkulturen abgestimmt sind. Die Kombination dieser Sensoren ermöglicht die Messung des Energiehaushalts von Säugerzellen. Diese Messungen können wertvolle Informationen über die Toxizität eines Medikaments oder Wirkstoffes geben. Diese Sensoren sind auch wichtige Werkzeuge für die neue Organ-on-chip-Technologie, bei der versucht wird, komplexe dreidimensionale Gewebekulturen der menschlichen Organe in mikrofluidischen Systemen nachzubilden.

Gemeinsam mit Torsten Mayr bearbeiten an der TU Graz Bernd Nidetzky und Juan Bolivar das Thema Mikrobioreaktoren. ■



© Lughammer – TU Graz

Abbildung 3:
 Mitglieder des Instituts für Analytische Chemie und Lebensmittelchemie und des Instituts für Biotechnologie und Bioprozesstechnik, die sich mit Mikrobioreaktoren beschäftigen.

Figure 3:
 The team of the Institute of Analytical Chemistry and Food Chemistry and the Institute of Biotechnology and Biochemical Engineering working with microbioreactors.

sors are beneficial compared to other analysis techniques. They are easy to integrate, are non-invasive, and can be measured contactlessly from outside the reaction chamber. However, the small-scale demands high-performance sensor materials and measurement systems. Optical chemical sensors are composed of luminescent dyes embedded in a polymer film. The interaction of the analyte (oxygen or hydrogen ions) alter the luminescent properties of the dye which carries the analytical information. The sensors are integrated into the microsystem as thin films or spots in sizes of 100 to 750 μm using ink-jet printing and can be read out contactlessly from outside by optical fibres. Alternatively, analyte sensitive nanoparticles are applied, and these can be directly injected into the fluid without an integration step.

The integrated sensors enable biocatalytic conversions to be measured and the nutrient supply in cell cultures to be monitored. The measurement of metabolism rates with oxygen, pH and glucose sensors tailor-made for cell cultures has a high potential. The combination of these sensors allows exploration of the bioenergetics of mammalian cells to be performed. This measurement can deliver valuable information on the toxicity of drug candidates and nanomaterials. These sensors are also important tools in the emerging organ-on-chip technology, which mimics the functionality of human organs using 3D-tissues co-cultures in microfluidic devices.

Together with Torsten Mayr Bernd Nidetzky and Juan Bolivar work on the topic of microbioreactors at TU Graz. ■



Wir sind es ja mittlerweile fast schon gewohnt, dass Universitäten, Konferenzen, Fachzeitschriften und auch Personen mittels Rankings und Metriken vermessen und bewertet werden. Dass beim Versuch, komplexe Sachverhalte mittels eines skalaren Wertes zu quantifizieren, eine gesunde Skepsis angebracht ist, versteht sich auch schon fast von selbst. Wie groß diese Skepsis sein sollte, verdeutlicht der folgende Fall des „Australian Conference Rankings“ (CORE Ranking) einer Fachtagung in meinem Arbeitsgebiet.

Nach der Herabstufung des Rankings dieser Konferenz, die der subjektiven Wahrnehmung deren Qualität nach Durchsicht des öffentlichen Ranking-Kriterienkatalogs (Akzeptanzraten, Renommee der Organisator/innen, Zusammensetzung des Programmkomitees, Dauer des Begutachtungsprozesses ...) widersprach, habe ich mich an die hinter dem Ranking stehende Organisation gewandt und Einsicht in den zugrundeliegenden Datensatz zur Konferenz und die Begründung des Entscheidungsgremiums erhalten.

Das Verdikt lautete im Wesentlichen: sinkende Zahl der eingereichten Beiträge. Interessant ist dabei, dass der zugrundeliegende Datensatz und die referenzierte Datenquelle gar keine Zahlen zu den Einreichungen der letzten drei Jahre enthielten. Auch verwunderlich ist die Tatsache, dass als einziges Kriterium die Zahl der Einreichungen herangezogen wurde, die noch nicht einmal explizit im Kriterienkatalog genannt ist.

Nach intensiver Kommunikation und Bereitstellung der fehlenden Daten ließ sich die Fehlbewertung in diesem Fall korrigieren, es bleibt aber das sehr ungute Gefühl, dass Realität und Rankings nur bedingt korrelieren. Das ist insbesondere deshalb tragisch, weil diese Rankings verwendet werden, um Wissenschaftler/innen, Fakultäten und ganze Universitäten zu bewerten (wie viele Veröffentlichungen auf „guten“ Konferenzen?) und leistungsorientiert Ressourcen zuzuteilen (z. B. in Großbritannien und China). In Konsequenz werden dann weniger Beiträge bei schlecht gerankten Konferenzen eingereicht (es zahlt sich ja nicht aus ...), sodass falsch ermittelte Rankings quasi zu einer selbsterfüllenden Prophezeiung werden.

Erfreulicherer lesen Sie auf den folgenden Seiten. Olga Saukh berichtet über eine neue Kooperation zwischen der TU Graz und dem Complexity Science Hub in Wien. Siegfried Hörmann stellt sich und insbesondere sein Arbeitsgebiet Statistik vor. Viel Spaß beim Lesen!

We are already used to rankings and metrics that assess universities, conferences, journals, and even persons. It also goes without saying that attempts to quantify such complex systems on a linear scale have to be taken with a grain of salt. The following case about the “Australian Conference Ranking” (CORE Ranking) of a conference in my field of work, hints that a ton of salt would be appropriate.

After the ranking score of that conference had been lowered, which contradicted the perceived quality of the event also after consideration of the published ranking criteria (acceptance rate, reputation of the chairs, composition of the program committee, duration of the review process, etc.), I approached the organization behind the ranking and was given access to the data set for that conference and the assessment of the ranking committee.

The verdict essentially read “declining number of submissions”. Interesting to note is the fact that the data set about the conference and also the referenced source of information did not contain the submission numbers of the past three years. Even more surprising was the fact that only the single criterion “number of submissions” had been considered – which is not even listed in the set of ranking criteria.

After intense communication and providing the missing data, the incorrect ranking could be fixed. However, the very unpleasant feeling remains that rankings and reality do not necessarily correlate. The tragedy behind this is that researchers, faculties, and whole universities are assessed on the basis of these rankings (how many publications in “good” conferences?) and resources are allocated based on this assessment (e.g. in the UK and China). As a result, researchers submit fewer papers to low-ranking conferences (as it doesn’t pay off), such that incorrect rankings are self-fulfilling prophecies.

You’ll find more upbeat information on the following pages. Olga Saukh reports about a new cooperation between TU Graz and Complexity Science Hub in Vienna. Siegfried Hörmann introduces himself and his field of work – statistics. Enjoy reading!

© Lünghammer – TU Graz



Kay Uwe Römer, Leitungsteam FoE
„Information, Communication & Computing“
Kay Uwe Römer, executive team FoE
Information, Communication & Computing



Effiziente Dimensionsreduktion durch dynamische funktionale Hauptkomponenten

Efficient Dimension Reduction using Dynamic Functional Principal Components

Siegfried Hörmann

Durch die enormen technologischen Entwicklungen der letzten Jahrzehnte insbesondere im IT-Bereich werden laufend neue, genauere und größere Datenmengen generiert und gesammelt. In einer derartigen Datenflut wird es allerdings immer schwieriger, die richtigen Schlüsse zu ziehen und relevante Informationen herauszufiltern. In meiner Forschung versuche ich, Lösungsansätze zu Teilen dieser komplexen Problematik zu liefern.

Im Laufe der letzten Jahrzehnte wurde das Sammeln und Speichern von Daten ständig einfacher und preisgünstiger. In unserem alltäglichen Leben, aber auch in der Wissenschaft, gibt es viele Bereiche, wo Daten in hoher Auflösung gesammelt werden. Zum Beispiel können auf modernen Motorenprüfständen pro Sekunde mehrere Beobachtungen erhoben werden, und das für etliche Messgrößen gleichzeitig. Ähnliche Beispiele gibt es in vielen anderen Bereichen, man denke an Schadstoffmessreihen, hochfrequente Finanztransaktionen, funktionelle Magnetresonanztomografie etc. Um aus dieser Datenflut einen Nutzen zu ziehen, braucht es entsprechende statistische Methoden, die gewisse Problemstellungen auf das Wesentliche zu reduzieren vermögen und relevante Information extrahieren können. Die funktionale Datenanalyse (FDA) ist ein aufstrebendes Teilgebiet der Statistik, das sich mit dieser Problematik befasst. Methoden der FDA sind dann anwendbar, wenn jede einzelne Beobachtung eine auf einem Kontinuum definierte Funktion darstellt, zum Beispiel die Grauwerte in einem Schwarz-Weiß-Bild oder die Temperaturverteilung auf der Erdoberfläche, siehe Abbildung 1.

Wachstumskurven und PM10

Zur Illustration geben wir zwei einfache Beispiele: Wir betrachten zum einen Wachstumskurven von zehn Kindern im Alter von 0 bis 18 Jahren und zum anderen tägliche Feinstaubkurven in Graz an zehn aufeinanderfolgenden Wintertagen, siehe Abbildung 2. Jede dieser Kurven enthält eine >

With increasing complexity and the rapidly growing amount of data collected in almost all areas of our life, it becomes more and more difficult to draw meaningful conclusions and to filter relevant information. The field of statistics has seen a big upsurge due to such new challenges. My research is devoted to some of these challenges.

Over the past decades storing and collecting data electronically has steadily become easier and cheaper. As a consequence, for many everyday life processes or scientific experiments nearly continuous data records exist. For example, on some engine test benches hundreds of variables can be collected and it is not uncommon to have for certain parameters of interest several measurement points per second. Similar examples can be given in environmental sciences (pollution levels), geophysics (strength of magnetic fields), medicine (fMRI images) or econometrics (tick-data), to just name a few. To benefit from increasing information, scientists need appropriate statistical tools which can help in finding the most important characteristics in such a big data context. Functional data analysis (FDA) is one of the emerging statistical disciplines which aims to extract relevant information from complex, intrinsically high-dimensional data objects. It is targeted for data samples where each underlying sampling point is a curve or some other process defined on a continuum, such as a grey level image or surface temperatures, etc. (Figure 1.)

Growth curves and PM10

To clarify ideas, let us look at two simple FDA examples. In the first, we consider growth curves of 10 children at the age of 0-18 years and in the second, we look at daily PM10 pollution level curves in Graz (Figure 2). In each curve we can check for many abstract features that may have practical or scientific relevance: e.g. the average level, the maximum, a potential trend or the position and number of peaks are important features in an environmental study on PM10 levels. >



© Institut für Statistik

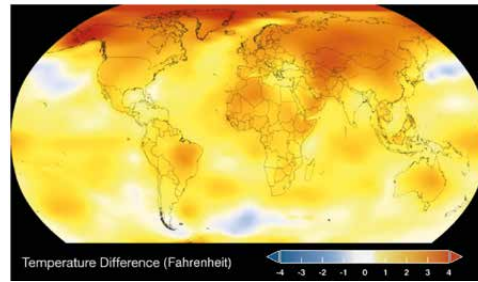
Siegfried Hörmann ist seit Oktober 2017 Professor für Angewandte Statistik am Institut für Statistik der TU Graz. Zuvor war er zwei Jahre in den USA und dann acht Jahre in Belgien wissenschaftlich tätig.

Siegfried Hörmann has been Professor of Applied Statistics at the Institute of Statistics of TU Graz since October 2017. Before this, he held professorships in the USA and Belgium.

Abbildung 1:
Veränderung der globalen
Oberflächentemperatur
gegenüber 1951–1980.

Figure 1:
Change in global surface tempera-
ture relative to 1951–1980.

© <https://climate.nasa.gov>



Reihe von abstrakten Eigenschaften, die je nach Fragestellung relevant sein können: Zum Beispiel sind das Tagesmittel, das Maximum, ein eventueller Tagestrend oder die Zeitpunkte und die Anzahl von Spitzenwerten interessanter Kenngrößen für PM10-Daten. Wenn wir nicht nur am Verlauf eines einzelnen Tages interessiert sind, sondern vielmehr an einer zugrundeliegenden Systematik, bieten sich statistische Methoden an. Anhand von wiederholten Messreihen (Wachstumskurven von Individuum 1, 2, 3 ... und Feinstaubbelastung an den Tagen 1, 2, 3 ...) versuchen wir, typische Muster zu erkennen. Im Idealfall können wir daraus Rückschlüsse auf die Schadstoffquellen ziehen oder Prognosen zum weiteren Wachstumsverlauf eines Kindes liefern. In beiden Beispielen gibt es eine natürliche Variation zwischen den Beobachtungen, die aus der Komplexität der zugrunde liegenden physikalischen und biologischen Prozesse rührt. Genau dann, wenn ein System zu komplex für ein exaktes naturwissenschaftliches Modell ist, helfen Methoden der Statistik und Wahrscheinlichkeitstheorie, um diese Variation zu modellieren.

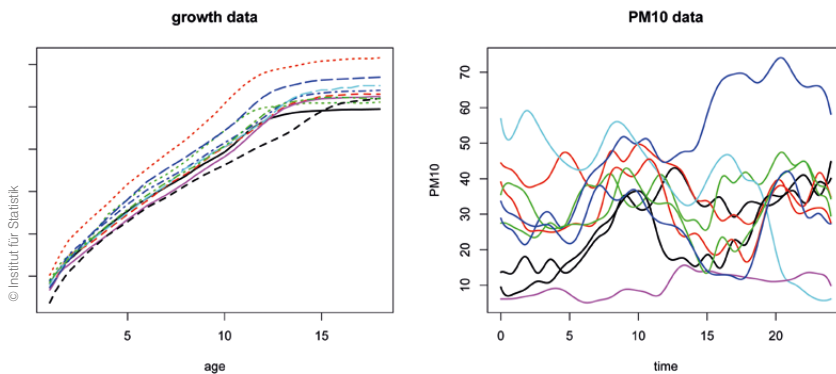


Abbildung 2:
Zehn Wachstumskurven (linke Tafel)
und zehn tägliche PM10-Stufen
(rechte Tafel).

Figure 2:
Ten growth curves (left panel) and
ten diurnal PM10 levels (right panel).

Umgang mit hoher Dimension

Aus mathematischer Sichtweise sind unsere funktionalen Beobachtungen Realisierungen eines stochastischen Prozesses. Da, wie oben angedeutet, die Trajektorien dieser Funktionen viele Eigenschaften besitzen, sind sie aus mathematischer Sicht hochdimensionale (theoretisch gesehen gar unendlichdimensionale) Objekte. Es ist also aus vielerlei Hinsicht wünschenswert, deren Dimension zu reduzieren und für die weitere Analyse nur die wichtigsten Eigenschaften herauszufiltern. Eine fundamentale Rolle spielt in diesem Zusammenhang

Statistics comes into play since we have replicates of the same experiment (measuring growth curves of individuals 1, 2, 3, ... and pollution levels on day one 1, 2, 3, ...). It is usually not particularly interesting if there was a peak PM10 load on a certain day at a certain time, but we may be very interested if peaks arise in a systematic way throughout a period of time. This will allow us to draw better conclusions regarding the polluters or to give better forecasts regarding the growth of a child. In both examples, there is variation and uncertainty between replicates due to very complex physical and biological processes, such as the nutrition regime and genetic endowments in the growth curves example. When a system becomes too complex to model all of its aspects, probabilistic and statistical tools enter the stage.

Tackling high dimension

In mathematical terms the curves that we investigate are realizations of a stochastic process. The fact that these random curves contain many features means that they constitute intrinsically high (in theory infinite) dimensional mathematical objects. From a practical as well as from a theoretical point of view, one is interested to reduce the dimensionality of the problem and to retain for a further analysis only those features in our observations which best describe the curves. A key statistical tool to tackle the dimensionality of functional data is the so-called functional principal component analysis. Functional principal components are orthogonal basis functions and as such we can use them to represent our functional observations as a superposition of these curves. This representation is called Karhunen-Loève (KL) expansion and its theoretical foundations date back to the early 20th century. Back then this approach was numerically unfeasible and hence it was not targeted for statistical applications. By expanding along a small number of basis-functions we obtain a low dimensional representation of the curve. The reader familiar with Fourier series may compare this to the Fourier expansion, where a curve is represented as a superposition of sinusoidal functions. The advantage of functional principal components is that, in some sense, they optimally adapt to the data. In Figure 3 we illustrate the approximation of a PM10 curve with 3 principal components and 5 and 25 Fourier basis functions, respectively.

Incorporating serial correlation

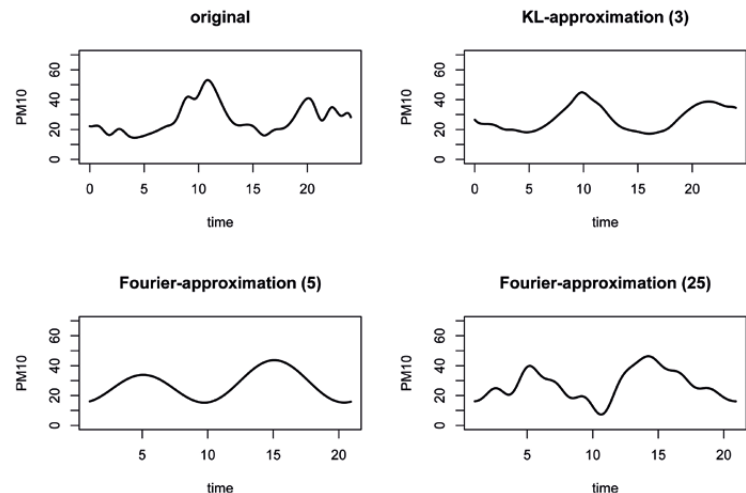
When looking at the PM10 and growth curve data, we observe several fundamental differences. For example, in contrast to PM10 data, the growth curves are monotone and smooth. Another important difference is that the growth data are statistically independent – there is no reason why the growth curve of one child should impact the growth curve of

die *funktionale Hauptkomponentenanalyse*. Hauptkomponenten sind orthogonale Funktionen. Durch Überlagerung dieser Funktionen lässt sich die ursprüngliche Funktion rekonstruieren. Man nennt dieses Verfahren Karhunen-Loève-(KL-)Entwicklung – ein Konzept, dessen theoretische Erforschung bereits Anfang des 20. Jahrhunderts stattfand. Zu diesem Zeitpunkt war eine statistische Anwendung nicht von Interesse, zumal es keine Möglichkeit einer numerischen Implementierung gab. Heute gibt es dazu Softwarepakete und wir können mittels einer KL-Entwicklung die Trajektorien unserer funktionalen Daten in beliebiger Dimension blitzschnell approximieren. Wer mit Fourierreihen vertraut ist, kann diese Methodik mit der Fourier-Entwicklung vergleichen. Hier werden Funktionen als Überlagerung von Sinus- und Cosinusschwingungen dargestellt. Der Vorteil der Hauptkomponenten liegt vor allem darin, dass sich diese in einem gewissen Sinne optimal an die Daten anpassen und damit eine ausgezeichnete Approximation bereits in kleiner Dimension gewähren. In Abbildung 3 illustrieren wir die Approximation eines PM10-Tagesverlaufs mit drei Hauptkomponenten bzw. mit 5 und 25 Fourier-Basen.

Einbindung von serieller Abhängigkeit

Beim Vergleich von PM10- und Wachstumskurven fallen schnell einige offensichtliche Unterschiede auf. Zum Beispiel sind Wachstumskurven, im Gegensatz zu den PM10-Kurven, monoton und sehr glatt. Ein anderer wesentlicher Unterschied ist, dass die Wachstumskurven statistisch unabhängig sind: Der Verlauf des Wachstums eines Kindes hat keinen Einfluss auf den eines anderen Kindes. Für die PM10-Daten gilt dies nicht. Wenig überraschend gibt es starke Korrelationen zwischen den aufeinanderfolgenden Tagen. Im Zusammenhang mit FDA treten solche zeitlichen Abhängigkeiten sehr häufig auf.

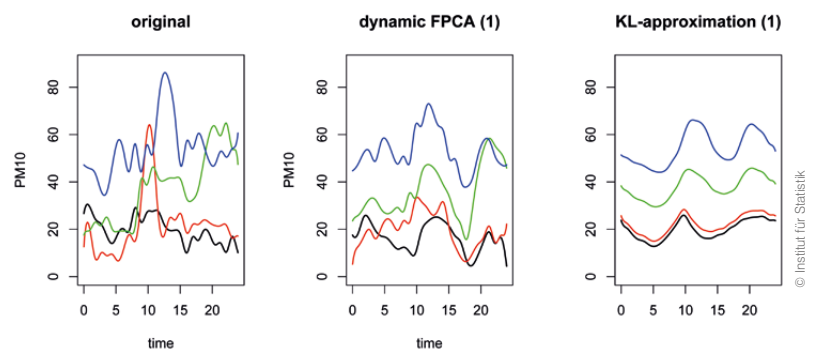
In einem meiner Forschungsprojekte zeige ich mit meinen Kolleg/innen, wie etwaige serielle Abhängigkeit genutzt werden kann, um die Dimension von funktionalen Daten noch effizienter zu reduzieren. Unsere Methode heißt *dynamische Hauptkomponentenanalyse* und basiert auf frequenzanalytischen Methoden. Aus diesem Ansatz ergeben sich nebst verbesserter Interpretation der Daten etliche Anwendungen zur vereinfachten statistischen Inferenz. Zur Illustration vergleichen wir die Approximation von vier PM10-Kurven mit einer einzigen Hauptkomponente sowie mit einer einzigen dynamischen Hauptkomponente, siehe Abbildung 4. ■



© Institut für Statistik

another child. This, however, is no longer true for the PM10 data. Not surprisingly, there is strong correlation between the PM10 loads on consecutive days. This problem is very common in FDA. It is related to the fact that many functional data are sampled sequentially in time (e.g. when data are obtained by segmenting a continuous process into natural units, such as daily data) which then often yields dependences.

In one of my recent research projects I showed with my collaborators that the dependence between functional data can be used in order to obtain much more efficient dimension reduction than with common functional PCA. Our method is called dynamic functional principal component analysis.



© Institut für Statistik

This approach, based on a so-called frequency domain analysis, not only allows for a better interpretation of the data, but is also useful in many problems of statistical inference. For the purposes of illustration, we show a 1-dimensional approximation of four consecutive PM10 curves by means of the usual KL-expansion and dynamic functional PCA (Figure 4) ■

Abbildung 3: PM10-Kurve (oben links) und Approximation mit drei Hauptkomponenten (oben rechts). Die unteren Abbildungen zeigen die Approximation um fünf (links) und 25 (rechts) Fourier-Basisfunktionen.

Figure 3: PM10 curve (upper left) and approximation with 3 principal components (upper right). Lower figures show the approximation by 5 (left) and 25 (right) Fourier basis functions.

Abbildung 4: Vier PM10-Kurven (links) und Approximation durch eine dynamische Hauptkomponente (Mitte) sowie eine normale Hauptkomponente (rechts).

Figure 4: Four PM10 curves (left) and approximation with one dynamic principal component (middle) as well as one ordinary principal component (right).



MOBILITY & PRODUCTION

Fields of Expertise TU Graz

Mobility & Production“ zeichnet sich als Stärkefeld einerseits durch viel Gemeinsames aus, andererseits führt erst der thematische Spannungsbogen zwischen den beiden Teilaspekten zu Erfolgsbeispielen in der Forschung. Diese werden oft nicht zuletzt durch die Anschubfinanzierungen des FoE möglich. Das Gemeinsame zeigt sich an der TU Graz am starken Impuls, den die Mobilitätsforschung auf die Projektaktivitäten von „Smart Production Graz“ ausübt. Zum anderen stellt die Produktion auch den Rahmen des Möglichen und Leistbaren im Bereich der Motoren-, Antriebs- und Fahrzeugentwicklung dar. Neue verbesserte Verfahren, der 3D-Druck im Leichtbau und die Industrie 4.0-Technologie tragen maßgeblich dazu bei, bei gleichbleibenden Produktionskosten die Antriebs-effizienz und Leistungsfähigkeit in der Mobilität auf der Straße, auf der Schiene und in der Luft zu erhöhen.



© Foto Fungler

Franz Haas, Leitungsteam FoE
„Mobility & Production“
Franz Haas executive team FoE
Mobility & Production

Im letztgenannten Bereich wird Sergio Amancio als neuer Professor für Werkstoffe und Technologien in der Luftfahrtforschung am Institut für Werkstoffkunde, Füge-technik und Umformtechnik künftig deutliche Akzente im FoE „Mobility & Production“ setzen.

Die Österreichische Wissenschaftliche Gesellschaft für Produktionstechnik (Ö-WGP), die derzeit von Franz Haas als Vorsitzendem geführt wird, vergibt heuer erstmals den Ö-WGP-Zukunftspreis und es werden auch Dissertationen und Masterarbeiten ausgezeichnet. Mit der Erweiterung des Fab-Lab Graz entsteht ein österreichweit einzigartiges Innovationslabor am Institut für Innovation und Industrie Management. Gleichzeitig wächst mit dem Team der smartfactory@tugraz auch physisch die Grazer Pilotfabrik für agile und datensichere Produktion.

Im Bereich der Mobilitätsforschung werden im FoE unter anderem Themen untersucht, die mittels Elektrifizierung von verbrennungsmotorischen Antrieben einen wesentlichen Beitrag zur Emissionsminderung liefern können.

Im folgenden Artikel werden die Bedeutung und Möglichkeiten des Thermomanagements von Pkw-Dieselmotoren dargestellt.

***M**obility & Production“ as a Field of Expertise is characterised, on the one hand, through the many things it has in common. On the other hand, however, it is exactly this thematic arc of suspense between both sub-aspects that leads to examples of success in our research. These examples are often made possible not least through the start-up funding of the FoE. What both sub-aspects have in common at TU Graz is demonstrated in the strong stimulus which mobility research exercises on the project activities of Smart Production Graz. On top of this, production delineates the framework of the possible and affordable in the field of engine, drive and vehicle development. New improved methods, 3D printing in lightweight construction and Industry 4.0 technology contribute substantially to raising drive efficiency and power in mobility on road, rail and in the air, with production costs remaining consistent.*

In the latter field, as the new professor of innovative materials and production technologies in aerospace at the Institute of Materials Science, Joining and Forming, Sergio Amancio will be making his mark in the FoE Mobility & Production.

The Austrian Scientific Society for Production Technology (Ö-WGP), whose current president is Franz Haas, will confer the Ö-WGP future awards for the first time this year, and doctoral theses and master's theses will also be honoured. The expansion of the Fab Lab Graz is resulting in an Austria-wide unique innovation laboratory at the Institute of Innovation and Industrial Management. At the same time, smartfactory@tugraz – the pilot factory for agile production and data-security – is physically expanding along with the team.

In the field of mobility research, topics are sought out in the FoE which can make an essential contribution to the reduction of emissions by means of electrification of combustion engine drive systems.

Our lead article outlines the importance and potential of the thermal management of passenger-car diesel engines.



Die Abgasgesetzgebung Euro 6d für Dieselmotoren

Emission Standard Euro 6d for Diesel Engines

Eberhard Schutting

Neue Fahrzeugtypen müssen im sogenannten Typprüfverfahren unter anderem die Einhaltung der geltenden Emissionsgrenzwerte nachweisen. Die bisherigen Verfahren wurden dafür kritisiert, dass sie die reale Betriebsweise von Fahrzeugen nur ungenügend wiedergeben – und das nicht erst seit dem „Dieselskandal“.

Aus diesem Grund wurde Ende 2017 von der Gesetzgeberin (der Europäischen Union) eine neue, zusätzliche Testprozedur eingeführt, bei der die Emissionen im realen Straßenverkehr gemessen werden. Diese Prozedur ist gemeinhin unter dem Kürzel RDE (Real Driving Emissions) bekannt. Durch die regelmäßige Verschärfung der Grenzwerte (2020 kommt mit Euro 6d die nächste) besteht nach wie vor großer Forschungsbedarf.

Am Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik wird im Rahmen des internationalen Forschungsprojekts ECO-PowerDrive 2 an Strategien zur Einhaltung dieser RDE-Gesetzgebung für Pkw-Dieselmotoren geforscht. Dafür werden sowohl experimentelle Untersuchungen am Motorprüfstand (siehe Abbildung 1) als auch umfangreiche Simulationen durchgeführt.

Die RDE-Gesetzgebung erfordert die Einhaltung der Grenzwerte unter einer großen Bandbreite an Bedingungen: Stadt- und Autobahnfahrt, defensive und aggressive Fahrweise, Sommer und Winter. Das bringt für die Abgasnachbehandlung außerordentliche Herausforderungen mit sich. Eines der größten Probleme ist es dabei, die nötige Betriebstemperatur der Katalysatoren zu erreichen und zu halten.

Das Temperaturproblem

Die Katalysatoren der Abgasnachbehandlung benötigen eine bestimmte Temperatur, um gut zu funktionieren. Dabei ist vor allem die untere Temperaturgrenze von etwa 200 °C problematisch. Die – aufgrund des hohen Wirkungsgrades – niedrigen Abgastemperaturen von Dieselmotoren führen nämlich oft >

New types of vehicles have to prove their conformity to emission standards in the so-called type approval test. Previous procedures were criticized for insufficiently reflecting the real-world driving pattern of vehicles – already before the “dieselgate” scandal.

Thus, end of 2017, the regulatory authorities (the EC) introduced a new test procedure that includes the measurement of emissions during real-world driving, commonly known as RDE legislation (Real Driving Emissions). Continued tightening of emission limits will keep this legislation a major research target (Euro 6d comes into force in January 2020).

At the Institute of Internal Combustion Engines and Thermodynamics, researchers are investigating strategies to fulfill the RDE legislation with passenger car diesel engines. The extensive experiments and simulations are covered by the international research project “ECO Powerdrive 2”.

The RDE legislation demands the compliance with emission limits under widely varying conditions: urban and highway driving, summer and winter, aggressive and defensive driving. This is an enormous challenge for the exhaust gas after-treatment system. One of the biggest problems is to achieve and maintain the operating temperature of the catalysts.

The Temperature Issue

The exhaust after-treatment catalysts need a certain temperature window to work properly. In Diesel engines, it is the lower threshold of ≈ 200 °C that poses a problem. Diesel engines have a comparably low exhaust-gas temperature, making it difficult to reach this temperature fast, or, sometimes, at all.

The farther away a catalyst is mounted from the engine, the slower it becomes warm. A typical catalyst arrangement for the current legislation is shown in Figure 2. The conversion of carbon monoxides (CO), hydrocarbons (HC) and >



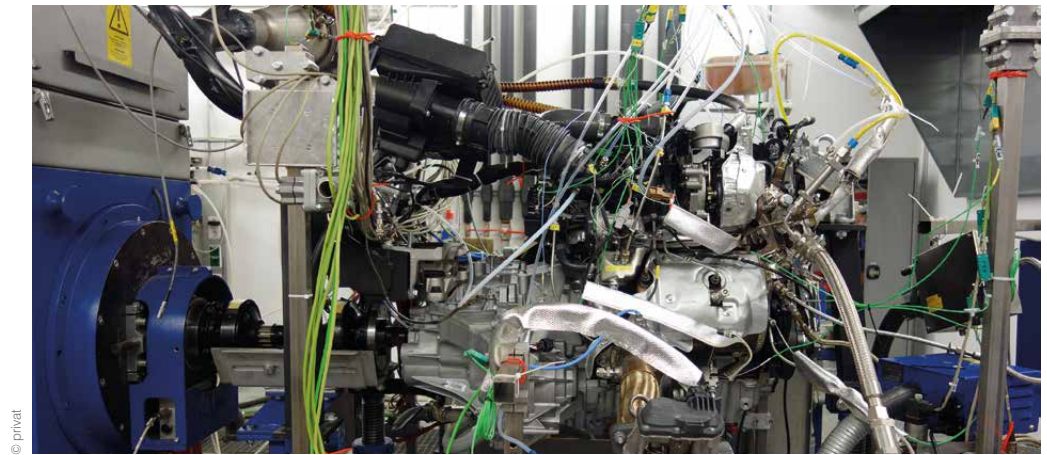
© privat

Eberhard Schutting ist Teamleiter im Forschungsbereich Antriebssysteme des Instituts für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik.

Eberhard Schutting is Team Leader in the research area Powertrain Systems at the Institute of Internal Combustion Engines and Thermodynamics.

Abbildung 1:
Der Versuchsmotor
auf dem Prüfstand.

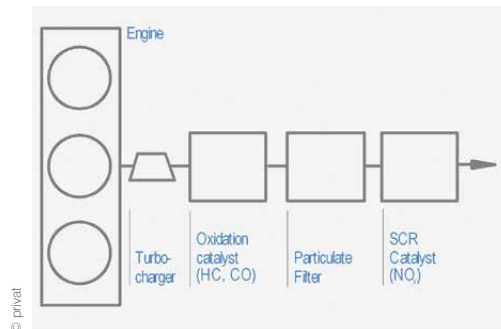
Figure 1:
Engine test bed
for experimental
investigations.



dazu, dass diese Temperatur gar nicht oder zu langsam erreicht wird. Je weiter weg ein Katalysator vom Motor angeordnet ist, umso langsamer erwärmt er sich. Eine typische Anordnung für die aktuelle Gesetzgebung ist in Abbildung 2 schematisch dargestellt.

Abbildung 2:
Typische Architektur einer
Abgasanlage für die
aktuelle Gesetzgebung.

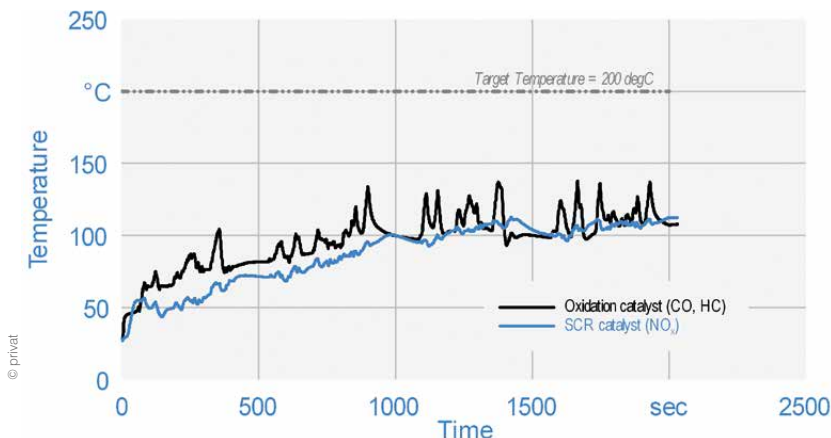
Figure 2:
Typical arrangement of
catalysts for current
legislation.



Für die Konvertierung von Kohlenmonoxid (CO), Kohlenwasserstoffen (HC) und Stickoxiden (NO_x) sind insgesamt zwei Katalysatoren nötig, dazu kommt noch der Partikelfilter. Bei einem sehr langsamen Stadtzyklus kann es beispielsweise vorkommen, dass sich die benötigte Temperatur auch nach einer halben Stunde Fahrt bei Weitem nicht einstellt – siehe Abbildung 3.

Abbildung 3:
Temperatur der Abgas-
nachbehandlung bei städ-
tischem Stop-and-go-Verkehr.

Figure 3:
Insufficient catalyst
temperature during slow
city urban cycle.



nitric oxides (NO_x) requires two catalysts. A particulate filter completes the system. It can happen that the threshold temperature is never reached, for example in a very slow urban driving cycle, see figure 3.

It is not difficult to heat up an exhaust system in a very short time, but it is a challenge to do it as efficiently as possible. The team of the ECO Powerdrive 2 investigates various solutions to this problem, two of which are outlined below.

Solutions

The application of an electric heater is an obvious and surprisingly efficient method. It will heat up the catalyst after, or even before, the engine is started using electrical energy from the battery. It works more or less like a seat heater but with twenty times more power. The so called "catalyst light-off" can in this case be reached after only 100 seconds. Without heating, it would take 11 minutes to reach the temperature of 200 °C (using the example of the more distantly mounted SCR catalyst). See figure 4.

However, the engine itself has to generate the electrical energy required for heating using the alternator. This increases the fuel consumption, but this method is still more efficient than others. With increasing fuel consumption, the emissions also increase, which is problematic only inasmuch as the catalysts are not yet warm enough. So, when using electrical heating, careful consideration has to be given to energy management to avoid a solution that backfires.

In terms of light-off, it is advantageous to place a catalyst as near as possible to the engine, as the hot exhaust gases are the major heat source for warm-up. Placing the catalyst immediately behind the engine would be an extreme solution because normally the turbocharger is positioned here. The solution is therefore called the pre-turbine catalyst.

Figure 5 shows that a pre-turbine-catalyst reaches the light-off temperature after 30 seconds, while it

verschiedenste Maßnahmen und Strategien untersucht. Zwei davon sollen hier vorgestellt werden.

Lösungen

Eine naheliegende und überraschend effiziente Methode ist die Verwendung eines elektrischen Heizers. Dieser erwärmt den Katalysator sofort nach dem Start oder auch schon davor mit Strom aus der Batterie. Das funktioniert im Prinzip wie eine Sitzheizung, nur mit der zwanzigfachen Leistung. Damit kann der sogenannte „Katalysator Light-off“ hier bereits nach etwa 100 Sekunden erreicht werden. Ganz ohne Heizmaßnahme würde es über elf Minuten dauern, bis die Temperatur von 200 °C erreicht ist (hier am Beispiel des weiter entfernten Stickoxidkatalysators, siehe Abbildung 4).

Die für das Heizen benötigte elektrische Energie muss vom Motor selbst erzeugt werden, und zwar mithilfe des Generators („Lichtmaschine“). Das erhöht natürlich den Kraftstoffverbrauch, aber es konnte gezeigt werden, dass diese Methode im Vergleich zu anderen dennoch günstiger ist. Leider steigen mit dem erhöhten Kraftstoffverbrauch auch die Schadstoffemissionen, was wiederum ein Problem ist, wenn das Abgassystem noch nicht warm ist. Bei einem elektrischen Heizer gilt es also vor allem, ein intelligentes Energiemanagement zu entwickeln, sodass in Summe ein Vorteil bei den Emissionen erzielt werden kann.

Da Katalysatoren hauptsächlich von den heißen Motorabgasen erwärmt werden, ist es vorteilhaft, sie so nahe wie möglich am Motor zu verbauen. Ein besonders radikaler Ansatz ist es, den Katalysator als erstes Bauteil nach dem Motor zu verbauen. Das ist deshalb radikal, weil der erste Bauteil normalerweise der Turbolader ist. Man spricht dann vom sogenannten „pre-turbine catalyst“.

In Abbildung 5 kann man erkennen, dass der pre-turbine catalyst bereits nach etwa dreißig Sekunden seine Betriebstemperatur erreicht hat, während der standardmäßig angeordnete Kat erst nach über 100 Sekunden warm ist (hier am Beispiel des motornahen Oxidationskatalysators). Der Vorteil dieser Methode ist, dass nicht mehr Kraftstoff verbraucht wird. Der Nachteil ist, dass der Katalysator in Leerlaufphasen auch schnell wieder auskühlt. Ein weiterer Nachteil ist, dass dem Turbolader Energie weggenommen wird, was das sogenannte Turboloch deutlich verlängert.

Beide Technologien haben das Potenzial eines zukünftigen Serieneinsatzes, greifen aber auch sehr stark in das Gesamtsystem des Fahrzeugs ein, wodurch sie schwierig zu erforschen und zu entwickeln sind. ■

takes more than 100 seconds for a standard catalyst to meet the threshold for the first time (using the example of the closed coupled oxidation catalyst).

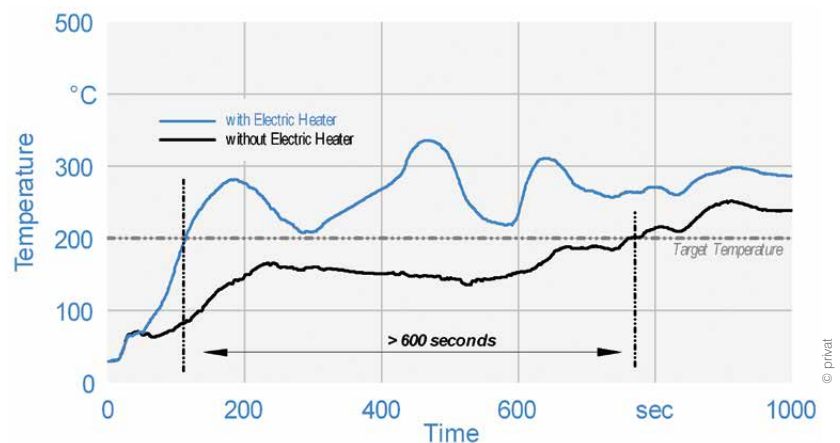


Abbildung 4:
Schnelleres Erwärmen des Katalysators durch einen elektrischen Heizer.

Figure 4:
Faster catalyst light off by electrical heating.

The advantage of this method is that it requires no extra fuel energy. The disadvantage is that the catalyst also cools down easily during idle engine operation. Another drawback is that the catalyst consumes thermal energy that is otherwise used by the turbocharger. This increases the so called turbo-lag.

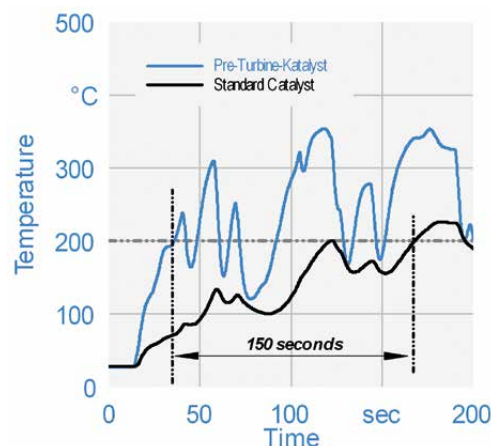


Abbildung 5:
Schnelleres Erwärmen eines Katalysators vor dem Abgasturbolader.

Figure 5:
Faster light off of a pre-turbine catalyst.

Both technologies are promising and may be found in future series production vehicles. However, their strong interaction with the entire powertrain system makes research and development a difficult task. ■



SUSTAINABLE SYSTEMS

Fields of Expertise TU Graz

Nachhaltigkeit ist nicht nur ein Forschungsthema, es interessiert auch eine breitere Öffentlichkeit. Das Field of Expertise „Sustainable Systems“ trägt zum öffentlichen Diskurs über Nachhaltigkeit bei, zum Beispiel mit der im Sommersemester 2018 laufenden Vortragsreihe „Mit 17 die Welt retten – die 17 Sustainable Development Goals zwischen Utopie und Realität“. In dieser von allen vier Grazer Universitäten gemeinsam organisierten Reihe kommen Expertinnen und Experten zu Wort, die die 17 von der UNO definierten Ziele für eine nachhaltige Entwicklung einem breiten Publikum verständlich vorstellen und mit ihm diskutieren. Die Vortragsreihe ist öffentlich. Sie kann an allen Grazer Universitäten als Fach belegt werden und wird von Studierenden unterschiedlichster Fachrichtungen, aber erfreulicherweise auch von vielen Gästen besucht.

Ein weiteres Beispiel: der *Buildings and Energy Day*. Am 14. Juni begrüßt Rektor Kainz eine illustre Runde von Expertinnen und Experten zum Thema Gebäude und Energie in der Aula der TU Graz. Den Keynote-Vortrag hält Werner Sobek, Ehrendoktor und ehemaliges Forschungsbeiratsmitglied der TU Graz und einer der international bekanntesten Pioniere auf dem Gebiet des nachhaltigen Bauens. Sowohl mit seiner Forschung an der Universität Stuttgart als auch mit seinem Ingenieurbüro hat er seit vielen Jahren immer wieder neue Wege aufgezeigt, wie man das Bauen anders denken und damit überzeugende, nachhaltige Architektur entwickeln kann.

Gebäude sind für mindestens 40 Prozent des weltweiten Energiebedarfs verantwortlich. Angesichts der globalen Erwärmung, der Verknappung von Energieressourcen, der damit direkt oder indirekt zusammenhängenden globalen Instabilitäten und eines exponentiellen Bevölkerungswachstums wird klar, dass Bauen und Architektur in der Diskussion über die nachhaltige Entwicklung unserer Gesellschaft eine wesentliche Rolle spielen.

Neben Werner Sobek werden am *Buildings and Energy Day* Thomas Fleckl vom Austrian Institute of Technology (AIT), Werner Prutsch von der Stadt Graz, Brian Cody vom Institut für Gebäude und Energie und Roger Riewe vom Institut für Architekturtechnologie über den gegenwärtigen Stand in Forschung und Praxis diskutieren.

Die Veranstaltung wird begleitet von einer Poster-Ausstellung, auf der laufende Projekte aus dem FoE „Sustainable Systems“ präsentiert werden, die sich im weiteren Sinn mit dem Thema auseinandersetzen.

Sustainability is not only a research goal, but also a topic of great interest for the broader public. The Field of Expertise Sustainable Systems contributes to the public debate about sustainability, for example by co-organising the lecture series “Saving the world with 17 – the 17 sustainable development goals (SDG) between utopia and reality”. In this lecture series, jointly organized by all four universities in Graz for the summer semester 2018, experts are invited to present and discuss the 17 SDGs as defined by the United Nations. The lectures are public. Students of all four Graz universities can take them as a seminar and the audience includes students from many different fields of study and many guests.

Another example is the “Buildings and Energy Day”. On June 14th 2018 Rector Kainz will welcome an illustrious round of experts for buildings and energy in the Great Hall of TU Graz. The keynote lecture will be given by Werner Sobek. An honorary doctor of TU Graz and a former member of its Research Council, Sobek is an internationally renowned pioneer in the field of sustainable building. With his research at the University of Stuttgart as well as with his engineering firm he has for many years led the way in re-thinking resource efficiency in construction and has developed many exemplary prototypes for sustainable architecture.

Buildings are responsible for over 40% of energy consumption worldwide. Global warming, decline of existing energy resources, exponential population growth, increasing geopolitical instabilities which are often directly or indirectly linked with the uncertainty of the future energy supply – all of these trends make it very clear that building and architecture play a vital role in the debate about the sustainable development of our society.

In addition to Werner Sobek, Thomas Fleckl from the Austrian Institute of Technology, Werner Prutsch from the City of Graz, Brian Cody from the Institute of Buildings and Energy and Roger Riewe from the Institute of Architecture Technology will be panelists at the Buildings and Energy Day. They will discuss the state of the art and future trends in research and practice.

The event also features an exhibition of posters about ongoing research projects by members of the Field of Expertise Sustainable Systems, which deal with this topic in a broader sense.

© Lunghammer – TU Graz



Urs Leonhard Hirschberg,
Leitungsteam FoE „Sustainable Systems“
Urs Leonhard Hirschberg,
executive team FoE Sustainable Systems



Innovative Wärmepumpensysteme zur hocheffizienten Bereitstellung von Wärme

Innovative Heat Pumping Systems for High-Efficiency Heat Supply

René Rieberer

Am Institut für Wärmetechnik wird seit über 30 Jahren an Wärmepumpen geforscht. Speziell in den vergangenen Jahren gewinnt diese Technologie nicht nur im Gebäudebereich, sondern etwa auch in der Industrie und in Fahrzeugen immer mehr an Aufmerksamkeit. So vielfältig wie die Anwendungsmöglichkeiten von Wärmepumpen ist auch das Spektrum der Forschungsprojekte am Institut für Wärmetechnik.

Besonders zur Beheizung von neuen Wohngebäuden mit niedrigem Wärmebedarf sind Wärmepumpen interessant. Heizsysteme in Neubauten müssen Wärme nur auf moderatem Temperaturniveau bereitstellen (typischerweise maximal 35 °C). Das thermodynamische Grundprinzip erlaubt deshalb auch bei tiefen Außentemperaturen eine effiziente Gebäudebeheizung mit Außenluft als Wärmequelle. Am Institut für Wärmetechnik wurden unter anderem prädiktive Regelungsansätze entwickelt, die es erlauben, das Heizungssystem „vorausschauend“ – unter Einbeziehung von Wetterprognosen, zeitlich veränderlichen Stromtarifen und/oder einer „Eigenstromproduktion“ mittels Photovoltaikanlage etc. – zu betreiben. So kann unter Berücksichtigung des „Ladezustandes“ des Gebäudes oder des Warmwasserspeichers die elektrische Leistungsaufnahme der Wärmepumpe entsprechend verändert werden (vgl. Abbildung 1).

Absorptionswärmepumpen

In den vergangenen Jahrzehnten kaum beachtet, erleben die thermisch angetriebenen Absorptionswärmepumpen eine Renaissance. Sie nutzen zum Antrieb anstelle von Strom Wärme auf hohem Temperaturniveau (rund 80 bis 150 °C). Heute werden sie beispielsweise als Nachfolger der effizienzmäßig ausgereizten Brennwertkessel gehandelt, da gasbefeuerte Absorptionswärmepumpen im Vergleich eine Gasverbrauchsreduktion von 40 Prozent erwarten lassen. Das Institut für Wärmetechnik arbeitet gemeinsam mit einem namhaften >

The Institute of Thermal Engineering has been working on heat pumps for more than 30 years. Recently heat pumps have been gaining in interest not only in the building sector, but also in industry and in the mobility sector. There exists a variety of applications for heat pumps, and the R&D portfolio at the Institute of Thermal Engineering is very broad as well.

Heat pumps are especially well suited in new buildings which have a low heat demand. In most cases, the heating system has to supply the heat only at a moderate temperature level (typically below 35°C). Thus, the thermodynamic principle allows an efficient operation using ambient air as the heat source even at low outside temperatures. During the last years, predictive control algorithms have been developed at the Institute, which allow a consideration of the weather forecast, variable electricity prices and PV on-site production. In this way, the electrical power consumption of the heat pump can be varied accordingly, taking into account the "charge state" of the building or the hot water storage tank (see Figure 1).

Absorption Heat Pumps

Recently, thermally driven absorption heat pumps have experienced a renaissance. Instead of electricity, this heat pump type uses heat at a rather high temperature (around 80 to 150°C) as driving energy. Today, for example, they are regarded as the successors to condensing boilers, which have been exhausted in terms of efficiency, and gas-fired absorption heat pumps are expected to reduce gas consumption by 40%. Together with a well-known boiler manufacturer, the Institute of Thermal Engineering is working on the simulation-based optimization of gas-fired ammonia/water absorption heat pumps (see Figure 2), which are specifically designed as a retrofit option for existing buildings with natural gas infrastructure. >



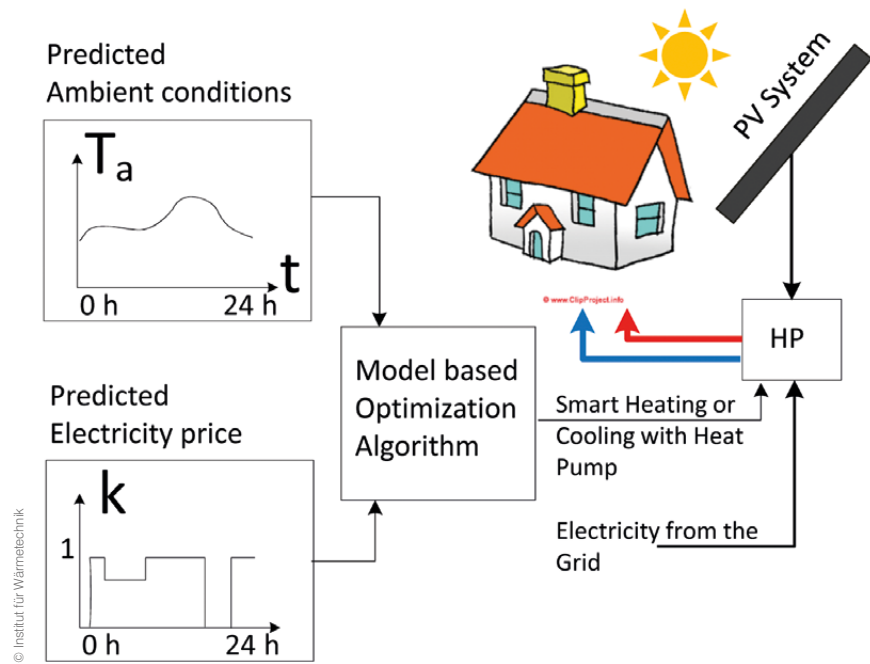
© privat

René Rieberer leitet die Arbeitsgruppe „Heizungs-, Kälte-, Klimatechnik“ am Institut für Wärmetechnik und ist Key Researcher am VIRTUAL VEHICLE Research Center.

René Rieberer is leader of the working group Heating, Refrigeration, Air-conditioning at the Institute of Thermal Engineering and Key Researcher at the VIRTUAL VEHICLE Research Centre.



Abbildung 1:
Modellprädiktive Regelung
von Wärmepumpen.
Figure 1:
Model predictive control
of a heat pump.



© Bosch Thermotechnology GmbH

Abbildung 2:
Gasbetriebene Absorptions-
wärmepumpe.
Figure 2:
Gas-driven absorption heat
pump.

Kesselhersteller an der simulationsbasierten Optimierung von gasbefeuelten Ammoniak/Wasser-Absorptionswärmepumpen (vgl. Abbildung 2), die speziell für Bestandsgebäude mit existierender Gasinfrastruktur als Nachrüstungsmöglichkeit gedacht sind.

Industrielle Anwendung

Ein riesiges Energie- und damit Treibhausgas-Einsparpotenzial schlummert in Industriebetrieben. Vor allem der Einsatz von Wärmepumpen zur Abwärmerückgewinnung oder als Ersatz für Gaskessel gewinnt an Interesse. Eine große Herausforderung liegt aber im geforderten Nutztemperaturniveau, das typischerweise bei 80 °C und höher liegt und mit konventionellen Anlagen nicht erreicht werden kann. In Zusammenarbeit mit dem steirischen Kälteanlagen- und Wärmepumpenhersteller Frigopol arbeitet das Institut für Wärmetechnik im Projekt HotCycle an einer Hochtemperaturwärmepumpe, die mit dem umweltfreundlichen Kältemittel R600 (Butan) betrieben wird und Nutztemperaturen von über 100 °C bereitstellen kann (vgl. Abbildung 3).

E-Fahrzeuge

Elektrisch betriebene Fahrzeuge (Hybrid- bzw. Elektroautos) stellen gewohnte Heizungs- und Klimasysteme vor große Herausforderungen, denn ihnen fehlt eines teilweise bzw. gänzlich: die Motorabwärme, die in konventionellen Fahrzeugen zur Beheizung des Fahrzeuginnenraums genutzt wird. Bei elektrisch betriebenen Fahrzeugen wird daher oft eine elektrische Direktheizung (also eine Widerstandsheizung) verwendet, die die Batterie des Fahrzeugs deutlich belastet und so die Reichweite drastisch reduziert. Eine mögliche Alternative ist es, statt der Direktheizung den Kältekreislauf der Klimaanlage im Umkehrbetrieb als Wärmepumpe zu verwenden und so den Energiebedarf deutlich

Industrial applications

The industry offers a huge potential for saving energy and thus greenhouse gas emissions. Especially the use of heat pumps for waste heat recovery or as a replacement for gas boilers is gaining in interest. However, a major challenge is the required temperature level, which is typically above 80°C, and this cannot be achieved with conventional systems. In cooperation with the Styrian refrigeration and heat pump manufacturer Frigopol, the Institute of Thermal Engineering is working on the project "HotCycle" which deals with a high-temperature heat pump using the environmentally friendly refrigerant R600 (butane) providing heat-sink temperatures above 100°C (see Figure 3).

E-Mobility

In electrical vehicles (hybrid and electric cars) in particular, heating the passenger compartment is challenging because in these vehicles little or even no waste heat from an internal combustion engine is available. That is why electric direct heating (i.e. resistance heating) is often used in electric vehicles, which means a significant load for the vehicle's battery and thus drastically reduces the cruising range. An interesting possibility is to use the refrigerant circuit of the air conditioning system in reverse operation, i.e. as a heat pump, and this significantly reduces the energy consumption compared to electric direct heating. It has been shown that the annual energy consumption for heating and air-conditioning can be reduced by up to 40% with a refrigerant cycle using the environmentally friendly refrigerant R744 (CO₂). Figure 4 shows an electric vehicle equipped with such a system, which was analysed experimentally in the climatic chamber.

Railway application

The energy consumption of auxiliary devices is also



zu reduzieren. Es konnte bereits gezeigt werden, dass der Jahresgesamtennergieverbrauch für Beheizung und Klimatisierung mit einer „reversiblen“ Kälteanlage unter Verwendung des umweltfreundlichen Kältemittels R744 (CO₂) um bis zu 40 Prozent reduziert werden kann. Abbildung 4 zeigt ein E-Fahrzeug, das mit einer R744-Kälteanlage/Wärmepumpe ausgestattet und in der Klimakammer am Institut für Wärmetechnik messtechnisch analysiert wurde.

Schienenfahrzeuge

Auch in Zügen spielt der Energieverbrauch von Nebenaggregaten eine zunehmende Rolle. Bis zu 20 Prozent des gesamten Energieverbrauchs wird für die Beheizung und Klimatisierung aufgewendet. Wie bei E-Autos wird auch in Waggonen vorwiegend mit elektrischen Direktheizsystemen gearbeitet, die künftig durch Kälteanlagen mit Wärmepumpenfunktion ersetzt werden könnten. Das Institut für Wärmetechnik hat im Projekt GreenHVAC4Rail gemeinsam mit dem Kompetenzzentrum VIRTUAL VEHICLE und den Firmenpartnern Liebherr-Transportation Systems, Obrist Engineering und Rupert Fertinger einen R744-Kältekreislauf zum Heizen und Kühlen von Schienenfahrzeugen entwickelt. Das Konzept ist so vielversprechend, dass es im Rahmen des Nachfolgeprojekts eco2jet in einem Railjet-Waggon der ÖBB im Realbetrieb getestet werden soll.

Aus dieser exemplarischen Aufzählung von Forschungsprojekten wird klar, dass die Wärmepumpentechnik an Bedeutung gewinnt. Hauptsächlich deshalb, weil Wärmepumpen gegenüber konventioneller Wärmebereitstellung eine signifikante Reduktion des Energieverbrauchs und damit auch der Treibhausgasemissionen ermöglichen. ■

playing an increasing role in trains. Up to 20% of the total energy consumption is related to heating and air conditioning of railway coaches. As in the case of electric cars, heating is typically realized by direct electric heating systems, which could be replaced in future by air-conditioning systems with heat pump function. In the project GreenHVAC4Rail, the Institute of Thermal Engineering, together with the companies Liebherr-Transportation Systems, Obrist Engineering and Rupert Fertinger, developed a R744 system for both heating and cooling of coaches. The concept is so promising that it is the goal of the follow-up project "eco2jet" to test it in real life operation in an ÖBB Railjet coach.

Abbildung 3:
R600-Hochtemperaturwärmepumpe im IWT-Labor.

Figure 3:
R600 high-temperature heat pump in the laboratory.



© Institut für Wärmetechnik

This exemplary list of research projects underlines the interest in heat pumping technology. A major driver for this is that it enables a significant reduction of energy consumption and greenhouse gas emissions. ■



© VIRTUAL VEHICLE Research Center

Abbildung 4:
E-Fahrzeug mit reversibler R744-Kälteanlage in der IWT-Klimakammer.

Figure 4:
Electric vehicle with reversible R744 a/c system in the climatic chamber.



Eine Umleitung für die Handfunktion *Rerouting the Function of the Hand*

Das Projekt MoreGrasp geht zu Ende und kann mit beachtlichen Ergebnissen aufwarten: Mit neu bearbeiteten Hirnsignalen kann die gedankliche Steuerung von Neuroprothesen in Zukunft wesentlich vereinfacht werden. Eine groß angelegte Machbarkeitsstudie ist im Laufen.

Marcel ist querschnittgelähmt, kann seine Beine nicht und seine Arme nur teilweise bewegen. Er kann Gläser nicht angreifen und braucht Unterstützung beim Essen. „Die weitverbreitete Annahme ist, dass man in einem solchen Fall nichts mehr tun kann. Dass die Querschnittlähmung eine unveränderliche Tatsache ist“, erklärt Gernot Müller-Putz vom Institut für Neurotechnologie der TU Graz. „Das muss aber gar nicht so sein.“ Er will Menschen wie Marcel zu mehr Lebensqualität und Selbstständigkeit verhelfen.

Brain-Computer Interfaces

Gernot Müller-Putz forscht an Brain-Computer Interfaces – kurz BCI oder übersetzt Gehirn-Computer-Schnittstellen. Diese Schnittstellen können per Elektroenzephalografie – kurz EEG – gemessene Hirnströme in Computerbefehle übersetzen, die wiederum eine Neuroprothese steuern können. „Bei einer Querschnittlähmung sind ja alle Schaltzentren im Gehirn und die Muskeln im betreffenden Körperteil noch vorhanden, nur die Leitung zwischen Gehirn und Extremität ist unterbrochen. Das umgehen wir, indem wir das Gehirn mit einem Computer kommunizieren lassen, der wiederum den Befehl an die Muskeln weiterleitet“, erklärt der Professor. Angesteuert und zur Bewegung animiert werden die Muskeln mit Elektroden, die außen am Arm angebracht sind und

The MoreGrasp project is coming to an end and has provided substantial results. The mental control of neuroprostheses can be considerably simplified in the future with the help of reprocessed brain signals. A large-scale feasibility study is being carried out.

Marcel is paralysed and can only partially move his arms and legs. He cannot grasp glasses and needs support to eat. "The common assumption is that you cannot do anything more for someone in such a case, and that tetraplegia is an immutable fact," explains Gernot Müller-Putz from TU Graz's Institute of Neural Engineering. "But it doesn't have to be like that." He wants to help people like Marcel to have more quality of life and independence.

Brain-computer interfaces

Gernot Müller-Putz conducts research on brain-computer interfaces or BCI. These interfaces can translate brain waves measured by an electroencephalogram (EEG) into computer commands, which in turn can control a neuroprosthesis. "In tetraplegia all the circuits in the brain and muscles in the body parts concerned are still intact, only the neurological connection between the brain and the limbs is interrupted. We bypass this by communicating via a computer which in turn passes on the command to the muscles," explains the professor. The muscles are triggered and their movement stimulated by means of electrodes fastened to the outside of the arm, thus eliciting, for example, opening and closing of the fingers.

Up to now we work using a mental rerouting to generate distinct signals to control the prosthesis. The test persons thought

Abbildung 1:
Gernot Müller-Putz leitete das gerade abgeschlossene Projekt MoreGrasp.
Figure 1:
Gernot Müller-Putz headed the recently completed MoreGrasp project.



zum Beispiel das Schließen und Öffnen der Finger auslösen können.

Bisher arbeitete man mit einem gedanklichen Umweg, um ausreichend unterscheidbare Signale zur Steuerung der Neuroprothese zu generieren: Die Probandin oder der Proband dachten beispielsweise an ein Fuß-heben-und-Senken und das per EEG gemessene gedankliche Signal öffnete die rechte Hand. Dachte sie oder er an eine linke Handbewegung, schloss sich die rechte Hand wieder. Welche Gedanken der jeweiligen Bewegung zugeordnet wurden, war dabei irrelevant – wichtig war nur die ausreichende Unterscheidbarkeit der dabei erzeugten Hirnströme.

Diese Technik entwickelte das Team an der TU Graz in Kooperation mit der Universität Heidelberg, dem Kompetenzzentrum KnowCenter, der Universität Glasgow und den Unternehmen Bit Brain Technologies sowie MEDEL im gerade abgeschlossenen, vom EU-Programm Horizon 2020 geförderten Projekt MoreGrasp weiter und schaffte einen Paradigmenwechsel. Der gedankliche Umweg ist nun nicht mehr notwendig, erklärt Müller-Putz: „Wir nutzen nun das sogenannte ‚attempted movement‘ – also den Versuch, eine Bewegung auszuführen.“ Die Probandin oder der Proband versucht dabei die Bewegung – zum Beispiel den Griff nach einem Glas Wasser – auszuführen. Wegen der Querschnittslähmung wird das dabei entstehende Hirnsignal aber nicht weitergeleitet, kann aber mittels EEG gemessen und vom Computersystem verarbeitet werden. Verschiedene Griffvarianten wurden im Projekt untersucht: Der Palmargriff (Zylindergriff, nach einem Glas greifen), der Lateralgriff (Schlüsselgriff, einen Löffel in die Hand nehmen), das Aufmachen der Hand und das Drehen nach innen und außen.

„Es sind nur sehr kleine Unterschiede zwischen dem Signal, ein Glas anzugreifen, und dem, die Finger danach wieder zu öffnen. Aber diese Unterschiede finden wir gerade heraus und lassen davon die Neuroprothese direkt ansteuern. Wir haben erkannt, dass dieser Forschungsbereich noch sehr am Anfang steht, aber wir haben diese Signale neu eingeführt und damit einen sehr wichtigen Schritt getan“, freut sich Müller-Putz. Eine völlig neue Möglichkeit, die eine deutliche Erleichterung für die Nutzerinnen und Nutzer mit sich bringen kann. >



about lifting and lowering a foot and the mental signal measured by the EEG opened the right hand. When they thought of a movement of the left hand, the right hand closes again. Whatever thoughts that were assigned to the respective movement were irrelevant: what was important was the sufficient distinguishability of the produced brain waves.

The team in Graz developed this technique further in cooperation with the University of Heidelberg, KnowCenter, University of Glasgow and partners Bit Brain Technologies and MEDEL in the recently concluded project MoreGrasp financed by the EU and created a paradigm shift. This mental “rerouting” is no longer necessary, as Müller-Putz explains: “We now use so-called ‘attempted movement’.” The test person attempts to carry out a movement, for instance to grasp a glass of water. Due to tetraplegia, the occurring brain signal is not passed on, but can be measured using an EEG and processed by the computer system. A variety of grips were investigated in the project: the palmar grip (cylinder grip, grasping a glass), the lateral grip (key grip, picking up a spoon), and opening the hand and turning it inwards and outwards.

“There is very little difference between the signal of grasping a glass and opening the fingers afterwards. But we are figuring out these differences and using them to directly trigger the neuroprostheses. We recognised that this research field is still in its infancy, but we’ve introduced these signals and thus made an important step,” >



Abbildung 1 und 2:
Verschiedene Griffvarianten wurden im Projekt untersucht: Der Palmargriff, der Lateralgriff, das Aufmachen der Hand und das Drehen nach innen und außen.

Figure 1 and 2:
A variety of grips were investigated: the palmar grip, the lateral grip, and opening the hand and turning it inwards and outwards.

Abbildung 3:
Ein User trainiert mit einer eigens konzipierten Trainingssoftware im Projekt MoreGrasp.
Figure 3:
A test person is training with a software especially designed for the MoreGrasp-project.

Abbildung 4:
Ein User hält mithilfe einer
Neuroprothese eine Dose hoch.
Diese Bewegung konnte er
vorher nicht durchführen.

Figure 4:
*A test person wearing a
neuroprosthesis is holding a
cup which he was not able
to do before.*



© moreGrasp

Groß angelegte Studie

Im Rahmen des Projekts wurde eine eigene Online-Plattform zur Vernetzung Interessierter und Betroffener eingerichtet. Dort können sich Endnutzerinnen und -nutzer auch für die Teilnahme an einer groß angelegten Machbarkeitsstudie registrieren, die die im Projekt entwickelte Technik auf ihre Alltagstauglichkeit überprüfen soll. „Wir werden anschließend alle Teilnehmerinnen und Teilnehmer, die für unsere Studie infrage kommen, mit einem eigens entwickelten Toolkit auf ihre motorischen Fähigkeiten testen. Dabei schauen wir uns EEG-Muster an, testen, ob die Muskeln mittels Elektrostimulation angesteuert werden können, und machen ein komplettes Assessment aller vorhandenen Muskelkräfte und Bewegungsausmaße“, erklärt Müller-Putz die aufwendige Untersuchung. Danach wird jeder Probandin und jedem Probanden ein maßgeschneidertes BCI-Training zur Verfügung gestellt, das in mehrere Stunden dauernden Sessions jede Woche eigenverantwortlich absolviert werden muss. So werden Hirnsignale gesammelt und das System lernt bei jedem Versuch dazu.

Der erste Griff

Neben der bahnbrechenden Forschung sind Müller-Putz und sein Team vor allem um Bewusstseinsbildung bemüht. Kurz vor Projektbeginn wurde in Heidelberg die erste Ambulanz in Europa eröffnet, die sich auf Neuroprothesen spezialisiert hat. Und auch bei anderen Ärztinnen und Ärzten sehe man zunehmendes Interesse an der Thematik: „Wie gesagt, war man bisher der Meinung, dass eine Querschnittlähmung eine Tatsache ist. Und man kommt langsam drauf, dass es gar nicht so sein muss.“ Aber vor allem für die betroffenen Personen ist die Forschung ein wichtiger Schritt, erklärt Müller-Putz, selbst mit unverhohlener Freude im Gesicht: „Wenn sich nach Jahren plötzlich die eigene Hand bewegt, dann ist das für die Leute ein Wahnsinn. Dieses Grinsen, das sie dann haben – das ist einfach nicht zu beschreiben.“

Text: Birgit Baustädter ■

says a delighted Müller-Putz. This is a completely new possibility and could be a game-changer for users.

Large-scale study

A special online platform to link up interested persons and those concerned was set up in the course of the project. End users can register on the platform to enter a large-scale feasibility study which is intended to check compatibility in everyday life of the technique developed in the study. “Following this, we will test the motoric abilities of all the participants who are eligible for our study using a specially developed toolkit. In doing this, we will look at EEG patterns, test whether the muscles can be triggered using electrical stimulation, and make a complete assessment of all available muscle power and degrees of movement,” explains Müller-Putz. Afterwards, each test person will be provided with a tailor-made BCI training course which must be completed independently in sessions lasting several hours each week. In this way brain signals will be gathered and the system will learn during each experiment.

The first grip

In addition to the groundbreaking research, Müller-Putz and his team are very involved in creating awareness of it. Just before the project started, the first outpatients department in Europe specialising in neuroprostheses was opened in Heidelberg. And there is increasing interest in the topic from other doctors: “As I already said, up to now people were of the opinion that tetraplegia was an open and shut case. But we are slowly realising that it doesn’t have to be.” But the research is an important step in particular for the people concerned, explains Müller-Putz, with barely concealed joy on his face: “When they can suddenly move their hands again after so many years, it’s fantastic for them. This grin that they have: you just can’t describe it.”

Text: Birgit Baustädter ■

Zusammenspiel von Mensch und Maschine in komplexen Produktionssystemen *Human and Machine Interaction in Complex Production Systems*



Abbildung 1:
Olga Saukh forscht an komplexen Systemen – an der TU Graz und am Complexity Science Hub Vienna.

Figure 1:
Olga Saukh does research on complex systems – at TU Graz and at the Complexity Science Hub Vienna.

© Lünghammer – TU Graz

Fortschritte im Bereich Automatisierung, Kommunikation, Internet of Things und Künstliche Intelligenz stellen immer stärker die Frage, welche Rolle Menschen in Fabriken der Zukunft noch spielen werden. Dieser Frage und noch vielen mehr widmet sich Olga Saukh, Expertin für vernetzte Sensorik und Datenanalyse an der TU Graz und am Complexity Science Hub Vienna.

In modernen Produktionsumgebungen spielen Maschinen, Roboter, Werkzeuge und Menschen in einem komplexen System zusammen. Bei jedem einzelnen Produktionsschritt müssen höchste Qualitäts- und Sicherheitsstandards eingehalten werden – dazu gehört auch, dass sowohl Produktionsmaschinen als auch das Produkt selbst während des Herstellungsprozesses ständig überwacht werden. Eine große Anzahl an Sensoren zeichnet während des Fertigungsprozesses entlang der Montagelinie Daten auf – eingehende Analysen dieser Daten können den Prozess verbessern.

„Die schiere Menge an Daten, deren Komplexität und die Vielfalt an Produktionsprozessen stellen heutige Methoden der Datenanalyse vor große Herausforderungen. Um diese große Menge an Echtzeitdaten sinnvoll nutzen zu können, benötigen wir fortschrittliche Analysemethoden aus den Bereichen maschinelles Lernen und Komplexitätsforschung“, erklärt Olga Saukh, die seit wenigen Monaten die Laufbahnstelle für Komplexe Vernetzte Produktionssysteme am Institut für Technische Informatik innehat. >

Progress in the fields of automation, communication, Internet of Things and artificial intelligence increasingly invites the question of what role humans will play in factories of the future. This question and many others are addressed by Olga Saukh, an expert on sensor networks and data analysis at TU Graz and at the Complexity Science Hub Vienna.

Machines, robots, tools and humans interact together in a complex system in modern production environments. Highest quality and safety standards have to be adhered to at every single production step – this also includes production machines and the product itself having to be constantly monitored during the manufacturing process. A large number of sensors record data along the production line during the production process – in-depth analysis of this data can improve the process.

“The sheer amount of data, its complexity, and the diversity of production processes place great challenges on today’s methods of data analysis. To be able to use this huge amount of real-time data meaningfully, we need advanced methods of analysis from the fields of machine learning and complexity research,” explains Olga Saukh, who has occupied the tenure track position for complex networked production systems at the Institute of Technical Informatics.

Individual mass products?

“The shift from mass production to mass customisation represents a great challenge both to production >

Individuelle Massenprodukte?

„Die Verlagerung von der Massenproduktion zur Massenanpassung stellt sowohl Produktionsbetriebe als auch Kundinnen und Kunden vor große Herausforderungen“, erklärt die Forscherin. Ziel smarter Fabriken ist es, statt einer hohen Stückzahl des immer gleichen Produktes individualisierte Einzelstücke vom Fließband herzustellen, die nach den Wünschen und Anforderungen der Endverbraucher gestaltet sind. Dazu müssen die Produkte aber quasi selbst wissen, wie sie schlussendlich aussehen sollen und welche Produktionsschritte dazu notwendig sind. Und sie müssen diese Anforderungen an die erzeugenden Maschinen und Roboter kommunizieren können, die sich wiederum selbst organisieren und die notwendigen Arbeitsschritte umsetzen müssen. „Problematisch ist bei dieser Entwicklung, dass die komplexen Produktionssysteme immer effizienter und schneller werden sollen, aber auch robust gegenüber Fehlern sein müssen“, so Saukh. „Das ist neu gegenüber derzeitigen Strategien zur Risikominimierung, die auf Redundanzen und einer feinen Prozesssteuerung basieren. Damit werden zwar Fehler vermieden, aber es erhöht die Durchlaufzeit.“

Die Wahl als Qual

Paradoxerweise sinke durch die vielen Wahlmöglichkeiten aber auch die Kundenzufriedenheit, erzählt Saukh weiter: „Der Psychologe Barry Schwartz hat das als ‚Paradoxon der Wahl‘ bezeichnet: Es gibt so viele ‚richtige‘ Wahlmöglichkeiten, dass wir überfordert, unentschieden und letztlich unzufrieden zurückbleiben.“ In Zukunft werden deshalb neue Instrumente zur Unterstützung der Entscheidungsfindung immer wichtiger, glaubt Saukh: „Zum Beispiel personalisierte Empfehlungssysteme, personalisierte Nachrichten und personalisierte Medizin.“

Themen wie diese stehen im Zentrum des Forschungsinteresses am Complexity Science Hub Vienna, einem Forschungsverbund von vier öster-

companies and their customers,” explains the researcher. The aim of smart factories is to produce individualised single pieces from the assembly line according to the wishes and requirements of the end users – instead of a high number of products which are all the same. However, the products have to – in a manner of speaking – know themselves what they should finally look like and what production steps are actually necessary for this. And they have to be able to communicate these requirements to the producing machines and robots, which in turn have to organise themselves in order to implement the required working steps. “This development is problematic in that the complex production systems have to become increasingly more efficient and faster, and also more resilient to faults,” says Saukh. “This is new with respect to current strategies regarding risk minimisation, which are based on redundancies and a very fine process control. In this way errors are avoided, but the throughput time is raised.”

What price choice?

Paradoxically, customer satisfaction is lowered through too many choices, continues Saukh: “Psychologist Barry Schwartz has called this the ‘paradox of choice’: there are so many ‘right’ choices that we remain overburdened, undecided and finally dissatisfied.” For this reason, new instruments to support decision-making will become increasingly important in the future, believes Saukh: “For example, personalised recommendation systems, personalised news and personalised medicine.”

Topics such as these are at the centre of research interest at the Complexity Science Hub Vienna, a research alliance of four Austrian universities (TU Graz and TU Wien, MedUni Vienna, and Vienna University of Economics and Business) and two research institutions (AIT, IIASA), where researchers from different academic backgrounds are conducting research into complex systems. “The hub is an

Abbildung 2:
Eine smarte Fabrik ist
ein komplexes System.

Figure 2:
A smart factory is a
complex system.



reichischen Universitäten (TU Graz und TU Wien, MedUni Wien, WU Wien) und zwei Forschungsinstitutionen (AIT, IASA), in dem sich Forschende unterschiedlicher akademischer Hintergründe mit komplexen Systemen befassen. „Der Hub ist ein wunderbarer Ort, um sich auszutauschen und gemeinsame Lösungen zu finden. Obwohl alle Forschenden aus unterschiedlichen Gebieten kommen und an sehr unähnlichen Projekten arbeiten, sind unsere Methoden doch sehr ähnlich und wir können uns wunderbar gegenseitig unterstützen“, erzählt Saukh, die für die TU Graz am Complexity Science Hub Vienna tätig ist. Ihr Forschungsinteresse ist unter anderem, dezentrale Lösungen zu entwickeln, um Produktionssysteme flexibler und widerstandsfähiger zu machen. Maschinen und Roboter sollen befähigt werden, Entscheidungen selbst zu treffen, selbstständig miteinander zu arbeiten und sich autonom zu organisieren. „Trotz aller noch offenen Sicherheitsfragen ist dieser Trend sehr interessant und ich sehe darin großes Potenzial“, ist Saukh begeistert.

Mensch und Produktion

Durch die Fortschritte in den Bereichen Automatisierung, Kommunikation, Internet of Things und künstliche Intelligenz wird die Frage, welche Rolle der Mensch in den Fabriken der Zukunft spielen wird, immer wichtiger. „Ziel muss sein, die Arbeit in Fabriken so zu gestalten, dass menschliches Potenzial ausgeschöpft und Kreativität gefördert wird. Dann können Menschen nachhaltig immer stärker automatisierte Fabriken unterstützen und optimieren“, erklärt Saukh. Sie erwartet, dass in Zukunft zwei Arten von Jobs dominieren werden: Aufgaben, die Kreativität, Führung und Out-of-the-Box-Denken erfordern, und Aufgaben, die Expert/innenwissen und Flexibilität erfordern. Diese beiden Aufgaben zu automatisieren sei derzeit – noch – nicht möglich. „Mich interessiert vor allem, die menschliche Beteiligung am Produktionsprozess zu messen und ihre Entwicklung im Laufe der Zeit zu quantifizieren. Ich versuche, die Wurzeln der menschlichen Kreativität zu verstehen, um die Ideen- und Entscheidungsfindung in zukünftigen Fabriken fördern zu können.“ Erprobt werden ihre Lösungsansätze unter anderem in der smartfactory@tugraz – einer Lernfabrik in der Grazer Inffeldgasse, in der in kleinem Maßstab Produktionsumgebungen der Zukunft nachgebaut werden können.

Text: Birgit Baustädter ■



© Lunghammer – TU Graz

Abbildung 3:
Die Wissenschaftlerin arbeitet am Institut für Technische Informatik in der Grazer Inffeldgasse – einen großen Teil ihrer Zeit aber verbringt sie am Complexity Science Hub Vienna.

Figure 3:
The scientist works at the Institute of Technical Informatics in Inffeldgasse, Graz – but spends much of her time at the Complexity Science Hub Vienna.

amazing place where you can exchange information and find shared solutions. Although all the researchers are active in different areas and are working on very diverse projects, our methods are very similar and we are able to support each other wonderfully,” explains Saukh, who works for TU Graz at the Complex Science Hub Vienna. Her research interest, among other things, is to develop decentralised solutions to make production systems more flexible and resilient. It is intended that machines and robots are enabled to make decisions themselves, to work independently together and to organise themselves autonomously. “Despite all the open questions regarding safety, this trend is very interesting and I can see great potential in it,” enthuses Saukh.

Man and production

Due to progress in the fields of automation, communication, Internet of Things and artificial intelligence, the question of what role humans will play in factories of the future is becoming more and more important. “The goal must be to shape work in factories in such a way that human potential is exploited and creativity promoted. Then humans will be able to optimise and support increasingly automated factories in a sustainable way,” explains Saukh. She expects that two kinds of jobs will dominate in the future: tasks which require creativity, management and thinking outside the box, and tasks which require expert knowledge and flexibility. It is currently not – yet – possible to automate these two kinds of tasks. “What interests me in particular is measuring human participation in the production process and quantifying its development over time. I try to understand the roots of human creativity in order to be able to promote the ideas and decision-making in future factories.” Her solution approaches will be tested at smartfactory@tugraz – a training factory in Inffeldgasse in Graz, where production environments of the future can be built on a small scale.

Text: Birgit Baustädter ■

Hochauflösende Temperaturmessung für Smart Production

High-Resolution Temperature measurement for Smart Production

Im Projekt CHIP verbessert die Ceratizit Austria GmbH (Konsortialführung) gemeinsam mit der TU Darmstadt, dem Material Center Leoben und dem Institut für Fertigungstechnik im Rahmen eines FFG-Projekts die Erfassung und Analyse von Wärmeflächen in der Fräsbearbeitung. Dabei ist dem Team eine kleine Sensation gelungen.

„Das Sensationelle unserer Arbeit steckt in dieser unscheinbaren Grafik“, sagt Franz Haas vom Institut für Fertigungstechnik und zeigt auf ein Diagramm, das einen sägezahnartigen Temperaturverlauf über den Zeitraum einer Zehntelsekunde wiedergibt (siehe Abbildung 2). Gemessen wurde die Schnitttemperatur, die beim Fräsen einer Titanlegierung (Ti64) an der Schneidkante auftritt. Die dazu nötige Abtastfrequenz beträgt 20 kHz und war nur mit einer eigenentwickelten Hardware möglich. Mit anderen Worten: In einer Sekunde werden 20.000 Temperaturwerte erfasst und verarbeitet. Das an der TU Graz entwickelte Verfahren ist damit rund zwölf Mal genauer als das beste derzeit am Markt erhältliche System für die Prozessdatenerfassung beim Fräsen, dessen Abtastfrequenz bei maximal 1,6 kHz liegt.

Es gibt Werkstoffe, bei denen es äußerst wichtig ist, die Temperaturentwicklung während der Bearbeitung zu kennen: etwa Titanlegierungen, die im Leichtbau eingesetzt werden, und auch Kohlefaser-Verbundwerkstoffe (CFK). CFK-Materialien kommen häufig in der Luft- und Raumfahrt zum Einsatz, denn sie bieten maximale Steifigkeit bei minimalem Gewicht. Ein Risiko in ihrer Bearbeitung besteht jedoch darin, dass hohe Temperaturen die Matrix schädigen und

In the CHIP project, Ceratizit Austria GmbH together with TU Darmstadt, the Materials Center Leoben and TU Graz's Institute of Production Engineering, is improving temperature measurement in a milling tool in the framework of an Austrian Research Promotion Agency (FFG) project. While doing so, the team managed to pull off a small sensation.

“What is sensational about our project can be found hidden away in this rather inconspicuous chart,” says Franz Haas from the Institute of Production Engineering as he points to a diagram reproducing a saw-toothed temperature progression for the period of a tenth of a second (Figure 2). The cutting temperature resulting from milling a titanium alloy (Ti64) was measured on the cutting edge. The sampling frequency necessary for this amounts to 20 kHz and was only possible due to a piece of hardware developed by the Institute. In other words: 20,000 temperature values are captured and processed in 1 second. The method developed at TU Graz is thus twelve times more accurate than the best system currently available on the market for process data acquisition during milling, which has maximum sampling rate of 1.6 kHz.

It is extremely important to know the temperature development of some materials during processing: for instance, in titanium alloys, which are used in lightweight construction, and also in carbon-fibre reinforced polymers (CFRP). CFRP materials frequently find application in the aerospace industry due to the fact that they offer maximum stiffness at minimum weight. One risk involved in their processing is that the high temperatures can damage the matrix, thus destroying the



Abbildung 1:
Versuchsaufbau für den Systemvergleich bei der
Temperaturmessung im Fräs Werkzeug und im
Werkstück.

Figure 1:
Test set-up for system comparison during
temperature measurement.

somit der Materialverbund zerstört wird. Später kann es unter Belastung zur plötzlichen Zersplitterung oder zum Bruch des verbauten Materials als Folge einer Delaminierung der Struktur kommen. Daher ist es extrem wichtig, materialabhängige Temperaturgrenzwerte beim Fräsen nicht zu überschreiten. „Wo bislang Messungen einen Mittelwert der entstehenden Temperaturschwankungen ausgeworfen haben, lässt unser hochauflösendes Verfahren auch die Temperaturspitzen während der Bearbeitung erkennen, und zwar auf die Einzelschneide des Werkzeugs aufgelöst“, erläutert Franz Haas.

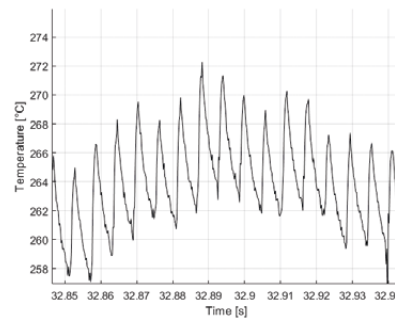
Darmstadt, Reutte, Leoben, Graz

Der Name für das Forschungsprojekt CHIP steht für „**C**ompetence through **H**ighly **I**ntelligent **P**roduction with a **U**nique Temperature Sensor in Milling Tools“ (Kompetenz durch hochintelligente Produktion mit einzigartiger Temperatur-Sensorik in Fräswerkzeugen). „Chip ist das englische Wort für einen Span, das Abfallprodukt vom Fräsen, aber natürlich spielt der Projektname auch auf die Elektronik an, die wir hier entwickeln“, sagt Franz Haas. Die TU Graz arbeitet bei CHIP mit dem Institut für Produktionstechnik der TU Darmstadt und dem K2-Zentrum Materials Center Leoben zusammen. Abwicklerin und Konsortialführerin des von der Forschungsförderungsgesellschaft FFG geförderten Projekts ist die Ceratizit Group. Das Tochterunternehmen der Tiroler Plansee AG ist auf Zerspanungswerkzeuge und Hartmetalllösungen für die Präzisionsbearbeitung eines sehr breit gefächerten Werkstoff-Spektrums spezialisiert.

„Die Zusammenarbeit mit dem Unternehmen und den Forschungspartnern verläuft sehr gut“, berichtet Haas. Das Projektteam trifft sich vier Mal im Jahr, um Zwischenergebnisse auszutauschen und nächste Schritte zu besprechen. Die Treffen finden abwechselnd in Darmstadt, Reutte, Leoben und Graz statt. „Zuletzt waren die Partner in Reutte. Es sind immer sehr produktive Meetings, bei denen auch der persönliche Austausch gepflegt wird.“

Datenmengen und Erfahrungswissen

Für Franz Haas ist das Erfahrungswissen, das auf der persönlichen Ebene ausgetauscht wird, etwas, das vor dem Hintergrund von Big Data manchmal Gefahr läuft, zu kurz zu kommen. Es ist überraschend, dies aus dem Mund eines Technikprofessors zu hören, an dessen Institut gerade eine Messmethode verbessert wurde, wenn Haas in einer Nebenbemerkung sagt: „Es gibt im >



© Institut für Fertigungstechnik

Abbildung 2:
Verlauf der Schnitttemperatur an der Schneidkante beim Fräsen einer Titanlegierung.

Figure 2:
The cutting temperature gradient at the cutting edge while milling a titanium alloy.

material-composite structure. This can lead to sudden fragmentation when subjected to stress at a later stage or to a fracture of the included materials as a result of a delamination of the structure. For this reason it is extremely important not to exceed the material-dependent temperature limits during milling. “Whereas measurements have returned an average value of the occurring temperature fluctuations, our high-resolution method also allows temperature peaks during processing to be recognised – even at the individual teeth of the tool,” explains Franz Haas.

Darmstadt, Reutte, Leoben, Graz

The name of the research project CHIP stands for “**C**ompetence Through **H**ighly **I**ntelligent **P**roduction with a **U**nique Temperature Sensor in Milling Tools”. “A chip is of course a waste product from milling, but the name of the project also hints at the electronic we’re developing,” says Franz Haas. TU Graz is working on the CHIP project together with the Institute of Production Management, Technology and Machine Tools at TU Darmstadt and the K2-centre Materials Center Leoben. The operator and consortium manager of the Austrian Research Promotion Agency (FFG) funded project is the Ceratizit Group. The affiliated company of the Tyrolean Plansee AG specialises in cutting tools and hard-metal solutions for precision processing of a wide range of materials.

“Collaboration with the company and the research partners is running very well,” reports Haas. The project team meets up four times a year to exchange preliminary results and to talk about the next steps. Meetings take place alternately in Darmstadt, Reutte, Leoben and Graz. “The last meeting took place in Reutte. The meetings are always very productive, and take place on a personal level.”

Data volume and practical knowledge

For Franz Haas, exchanging practical knowledge on a personal level is at risk from missing out against the background of Big Data. It’s surprising >



© Institut für Fertigungstechnik

Abbildung 3:
Ein Versuch mit Spänen,
dem Abfallprodukt beim Fräsen.

Figure 3:
A test using metal shavings,
the waste product during milling.

Bereich der Fertigungsprozesse viel Know-how, das nicht niedergeschrieben ist. Dieses Erfahrungswissen, das nicht nachschlagbare Wissen, ist etwas Wertvolles, das man als für jedes Unternehmen essenziellen Schatz begreifen und digital nutzbar machen sollte.“

Doch zurück zum Projekt CHIP: Der Versuchsaufbau, die Prototyp-Entwicklung und insbesondere das Einbringen von nur 0,25 mm dicken Thermoelementen in speziell vorgefertigten Fräswerkzeugen waren mechatronisch sehr anspruchsvoll. Geleitet wurden die Versuche von der jungen Chinesin Wenqi Liu, einer Mechatronik-Absolventin der Johannes-Kepler-Universität Linz, die im Rahmen des Projekts seit beinahe zwei Jahren an ihrer Dissertation an der TU Graz arbeitet. Die Innovation von CHIP liegt für Haas im interdisziplinären Ansatz, nämlich in der Verschränkung von Mechanik, Elektronik und Software. „Gerade durch bessere Elektronik, Mess- und Regelungstechnik eröffnet sich im Hinblick auf Anwendungen in der Fertigungstechnik ein sehr großes Verbesserungspotenzial“, sagt der Fertigungstechnik-Professor. „Das vorliegende Projekt-Zwischenergebnis wird uns erlauben, das Fräsen und andere Fertigungsprozesse im Sinne von „Machine Learning“ noch effizienter zu gestalten. Das ist besonders für die Qualitätssicherung wichtig, wenn man temperatur-sensitive Werkstoffe bearbeitet. Die Herausforderung ist nun, einen Algorithmus zu entwickeln, mit dem man aus der Fülle der Daten diejenigen Ergebnisse herausfiltert, die zu konkreten Verbesserungen beim Werkzeug, in der Maschine und in der Produktqualität führen können.“

Text: Werner Schandor ■

to hear a technology professor talk like this, someone at whose institute a measuring method is being improved, when he says as an aside: “In the field of production processes there is a lot of know-how which is not written down. This practical knowledge, this knowledge which you can’t look up, is something very valuable that should be understood as an essential treasure for every company and made digitally useful.”

But back to the CHIP project. The experimental set-up, the development of the prototype and especially the attachment of only 0.25mm-thick thermoelements in specially prefabricated milling tools were mechatronically very challenging. The experiments were led by the young Chinese technologist Wenqi Liu, a mechatronics graduate from Johannes Kepler University Linz, who has been working on her doctoral thesis at TU Graz in the context of the project for almost two years. In Haas’s view, the innovation of CHIP lies in its interdisciplinary approach: namely, in the cross-over between mechanics, electronics and software. “Through better electronics, measurement and control technology, a huge improvement potential is opening up with respect to applications in production technology,” says the production technology professor. “The interim results of the present project will allow us to design milling and other production processes more efficiently in the spirit of machine learning. This is particularly important for quality assurance when you’re processing temperature-sensitive materials. The challenge now is to develop an algorithm by which one can filter results out of the mass of data which can lead to concrete improvements of the tool, in machine and product quality.”

Text: Werner Schandor ■

Abbildung 4:
Projekttreffen des
CHIP-Teams in Reutte.

Figure 4:
Project Meeting of the
CHIP-team in Reutte.



© Institut für Fertigungstechnik

Forschung @ www.tugraz.at: Bleiben Sie auf dem Laufenden! *Research @ www.tugraz.at: Keep up to date!*



TU GRAZ RESEARCH MONTHLY

Mit dem Forschungsnewsletter erhalten Sie jeden Monat ausgewählte Beiträge rund um aktuelle Forschungsthemen an der TU Graz – verpackt in News, Geschichten, Interviews und Blogbeiträge. Zudem informieren wir Sie über die nächsten Event-Highlights in den Bereichen Wissenschaft und Forschung an der TU Graz. Die Anmeldung ist ab sofort über die TU Graz-Website möglich:

> www.tugraz.at/go/research-monthly

TU GRAZ RESEARCH MONTHLY

Research highlights straight to your mailbox

The monthly research newsletter provides you with selected news, stories, interviews and blog posts from the world of research at TU Graz. We will also be informing you about upcoming events in science and research at TU Graz.

You can subscribe to "TU Graz research monthly" by following this link:

> www.tugraz.at/go/research-monthly-en



PLANET RESEARCH

Erfahren Sie, woran die Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler der TU Graz in den Fields of Expertise und darüber hinaus forschen und wie sich ihre Ergebnisse auf unser Leben auswirken. Lernen Sie junge Forschungstalente kennen und informieren Sie sich über Forschungsinfrastruktur der TU Graz:

> www.tugraz.at/go/planet-research

PLANET RESEARCH

See what our researchers are doing in the Fields of Expertise and other areas, and learn about how their results will affect our lives. Get to know young research talent and keep informed about research infrastructure at TU Graz:

> www.tugraz.at/go/planet-research-en



FIELDS OF EXPERTISE

Erfahren Sie mehr über die fünf Fields of Expertise und aktuelle Forschungsprojekte:

> www.tugraz.at/go/foe

FIELDS OF EXPERTISE

Find out more about the five Fields of Expertise and current research projects:

> www.tugraz.at/go/fields-of-expertise



Fields of Expertise der TU Graz Fields of Expertise of TU Graz



Die fünf Fields of Expertise sind Kompetenzbereiche, die zu einzigartigen Markenzeichen der TU Graz im 21. Jahrhundert werden sollen. Gestärkt werden die Fields of Expertise durch thematisch neue Professuren und Investitionen sowie intensive Zusammenarbeit mit Industrie und Wirtschaft in Form von zahlreichen gemeinsamen Beteiligungen an wissenschaftlichen Kompetenzzentren und Forschungsnetzwerken. Kooperationen mit wissenschaftlichen Partnereinrichtungen wirken als weiterer Motor zum Erfolg.

Five Fields of Expertise will become distinctive hallmarks of Graz University of Technology in the 21st century. They will be strengthened by new professorships in new areas and investments as well as intensive co-operation with business and industry in the form of numerous shared participations in competence centres and research networks. Cooperations with scientific partner institutes represent a further dynamo to success.