



## Jenseits von Tabellenkalkulation

von Michael Wulkow

*Es gibt sicher eine Reihe von Möglichkeiten, sich als Mathematiker selbstständig zu machen. Es fragt sich allerdings, inwieweit bei der daraus resultierenden Tätigkeit noch mathematische Fragestellungen eine tragende Rolle spielen. Heute finden sich die meisten mathematisch tätigen Industriemathematiker in mittleren bis großen Industrieunternehmen wie z. B. in der Autoindustrie, in der Chemischen Industrie und bei Versicherungen. Hier möchte ich berichten, wie in einem kleinen, sehr forschungsorientierten Unternehmen Mathematik in die Anwendung umgesetzt wird.*

Wenn man als Mathematiker für die Industrie arbeitet und dann auch noch Anwendungsprogramme produziert, muss man sich schnell (mehr oder weniger direkt) sagen lassen, man „mache ja nur noch Software“. Abgesehen davon, dass es sehr anspruchsvoll und durchaus eines Mathematikers würdig ist, hoch strukturierte Software zu entwickeln, kann eine mathematische Tätigkeit mit einer kommerziellen Umsetzung durchaus verknüpft werden.

Die von mir 1992 gegründete Firma Computing in Technology (CiT) bietet Beratung und Softwareentwicklung auf dem Gebiet des Scientific Computing (Wissenschaftliches Rechnen). Hauptanwendungen der Produkte von CiT finden sich in der Polymerchemie, bei der Kristallisation, bei der Simulation von Russbildung in Motoren, von Schadstoffen in Gewässern, von Kinetiken in der Chemie und Biotechnik. Die zugrundeliegenden mathematischen Probleme lassen sich im weitesten Sinne unter dem Stichwort *Populationsbilanzen* zusammenfassen. Zu den Kunden von CiT gehören internationale Unternehmen und akademische Arbeitsgruppen im Bereich der Chemie.

Für einen gut ausgebildeten Numeriker mit Interesse an naturwissenschaftlichen Anwendungen gibt es grundsätzlich ein riesiges Anwendungsfeld in der Industrie. Allerdings reicht das Anbieten abstrakter mathematischer Fähigkeiten – und seien sie für den möglichen Anwender auch noch so passend und notwendig – nicht aus. Der Numeriker muss aktuelle Probleme lösen, und dazu erst einmal um die zu lösenden

Probleme wissen – es besteht (leider) schwerlich Gelegenheit, durch ein Unternehmen zu spazieren, um interessante Fragestellungen zu entdecken. Dann sind die möglichen Kunden davon zu überzeugen, dass man nicht nur im Prinzip, sondern ganz konkret für ein bestimmtes Problem eine Lösung anzubieten hat. Auch dies erfordert eine Kenntnis des Anwendungsgebietes. Schließlich tritt man möglicherweise in Konkurrenz zu den „internen“ Mathematikern und Serviceingenieuren, scheitert also unter Umständen an psychologischen oder politischen Gründen. Eine weitere Schwierigkeit besteht darin, dass sich der finanzielle Gewinn, den ein Unternehmen durch den Einsatz mathematischer Werkzeuge erzielen kann, meist nicht gut quantifizieren lässt. Forschung ist nun einmal offen und riskant und es ist nie nur die eingesetzte mathematische Methode für den Erfolg verantwortlich – auch wenn das Problem vielleicht ohne diese Methode gar nicht oder nur schwer hätte gelöst werden können. Die grundlegende Akzeptanz von Forschung in einem Unternehmen, die Motivation der Mitarbeiter, sich für Forschungsfragen einzusetzen, die verfügbaren Messtechniken, Ideen und Grundlagen bei der Modellierung und vieles mehr ergeben erst den Erfolg. Der Mathematiker sollte sich also im Klaren sein, dass er einen wichtigen Baustein (nicht mehr und nicht weniger) beitragen kann, wenn er die eigenen Methoden nur attraktiv genug macht.

Es hat sich daher von Beginn der Firma CiT an gezeigt, dass man ein *Produkt* benötigt, um die Chance zu bekommen, in großen Unternehmen die eigenen Entwicklungen und Fähigkeiten vorstellen zu kön-

nen. Ein solches Produkt erlaubt es, konkrete Anwendungsbereiche anzusprechen und die besonderen eigenen technischen Fähigkeiten zu dokumentieren. Aus gutem Grund setzen nicht nur viele Unternehmen heute eher auf kommerzielle Produkte als auf eigene Softwareentwicklungen. Auch in Arbeitsgruppen an Universitäten setzt sich langsam das Bewusstsein durch, dass die Mitarbeiter besser an Experimenten und Modellen arbeiten als an der (fachfremden) Entwicklung mathematischer Methoden. Da ich mich schon im Rahmen meiner Doktorarbeit bei P. Deuffhard in Berlin mit der Simulation von Polymerisationsprozessen beschäftigt hatte, lag für mich das Anwendungsgebiet Chemie nahe. Das konkrete Interesse der Kunden konnte in dem Augenblick gewonnen werden, in dem ich einen „vorführbereiten“ Algorithmus hatte.

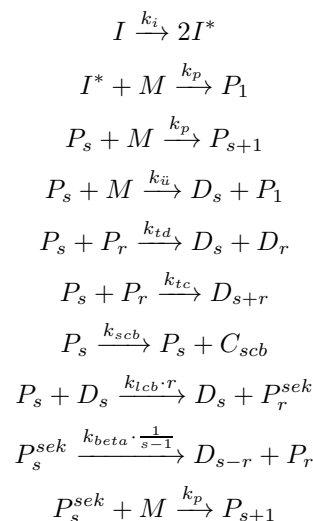
## Beispiel Polymerisation

Die Entwicklung und Produktion von Kunststoffen stellt ein großes Marktsegment der Chemischen Industrie dar, wobei die Polymere einen besonderen Schwerpunkt bilden. Wegen ihrer hohen Flexibilität gehören sie zu den vielseitigsten Werkstoffen unserer Zeit. Die Palette der auf der Basis von Polymeren hergestellten Produkte reicht von Verpackungen über Klebstoffe, Lacke, Farben bis hin zu Grundstoffen für Autoreifen. Besonders bekannte und in großem Umfang produzierte Polymere sind Polyethylen, Polypropylen und Polystyrol. Bei der Modellierung von Polymerisationsprozessen konnten in den letzten Jahren mit unserem Programmpaket PREDICI<sup>®</sup> wichtige neue Erkenntnisse erzielt werden.

Polymere sind langkettige, teilweise auch verzweigte und vernetzte Makromoleküle, bestehend aus Molekülbausteinen (Monomeren), deren Anzahl je nach Typ, Bedingungen und Prozess zwischen etwa  $10^2$  bis  $10^7$  liegt. Die Produktion von Polymeren wird im wesentlichen durch die Zusammensetzung (Rezeptur) und die Reaktorfahrweise gesteuert. Das entstehende Polymer wirkt durch seine Eigenschaften auf die Reaktion zurück. Da die Polymermoleküle in der Regel nicht einheitlich produziert werden können, entsteht eine *Kettenlängenverteilung*, deren Struktur wesentliche Anwendungseigenschaften eines Kunststoffes bestimmt. Die Kettenlängenverteilung ist eine Anzahl(dichte)verteilung mit einer diskreten Eigenschaftskordinate (der Anzahl der Monomerbausteine in der Polymerkette). Sie wird beschrieben durch eine Populationsbilanz, welche aus der Beschreibung der die Polymerisation treibenden elementaren chemischen Reaktionen entsteht. Formal führt dies auf *abzählbar-unendliche* Differentialgleichungssysteme, da für jede einzelne Kettenlänge eine

Variable eingeführt werden muss und die maximale Kettenlänge von vornherein nicht bekannt ist. Selbst wenn man solche Systeme bei einer bestimmten, genügend großen Kettenlänge „abschneidet“, ergeben sich Dimensionen zwischen  $10^2$  und  $10^{10}$ . Die effiziente numerische Lösung solcher Systeme (analytisch kann man hier in aller Regel wenig machen) stellt ein enormes praktisches Problem dar. Sie können übrigens auch als diskrete Analoga zu Systemen von partiellen Integro-Differentialgleichungen verstanden werden, was wir uns bei der Entwicklung des Simulationsprogramms PARSIVAL<sup>®</sup> für Kristallisationsprozesse zunutze gemacht haben.

Ein typisches (leicht vereinfachtes) kinetisches Schema aus der radikalischen Polymerisation, z. B. zur Modellierung von Polyethylen, sieht folgendermaßen aus ( $I$  Initiator,  $I^*$  Initiatorradikal,  $M$  Monomer,  $P_s$  aktives Polymer der Länge  $s$ ,  $D_s$  totes Polymer (d. h. Produkt) der Länge  $s$ ,  $P_m^{sek}$  aktives Polymer der Länge  $s$  mit einem sogenannten Sekundärradikal aus der Übertragungsreaktion):



Ausgehend vom Initiator werden einzelne Monomermoleküle aktiviert und wachsen dann in einer Kettenreaktion, die durch verschiedene Reaktionen beendet bzw. wiedergestartet wird. Mit Hilfe der Modellierung wird zunächst das Auftreten der einzelnen Reaktionsschritte in der Realität mit den zugehörigen Wahrscheinlichkeiten (Reaktionskoeffizienten) untersucht. Danach sollen die Modelle eingesetzt werden, um Produkteigenschaften und Produktionsbedingungen zu optimieren. Der Dialog in Abbildung 1 aus dem Programm PREDICI zeigt, dass ein solches System dort direkt (und in der gleichen Notation) vom Benutzer komfortabel eingegeben werden kann.

Besonders wichtig sind hier die Schritte „Übertragung auf das Polymere“, „Beta-Scission“ und „Backbiting“, die zu verzweigten und unter Umständen auch

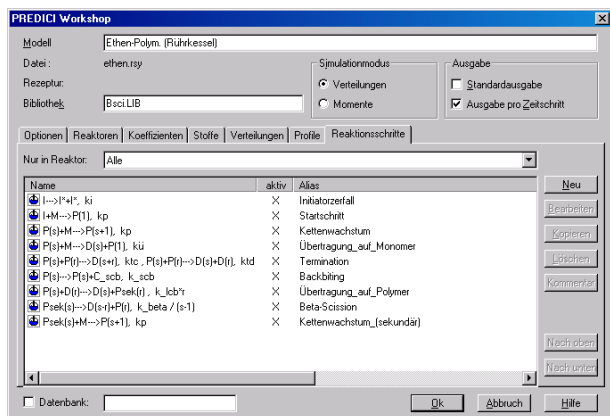


Abbildung 1: Hauptdialog („Workshop“) von PREDICI zur Eingabe von Polymerisationsmodellen, hier das oben aufgestellte Polyethylenmodell.

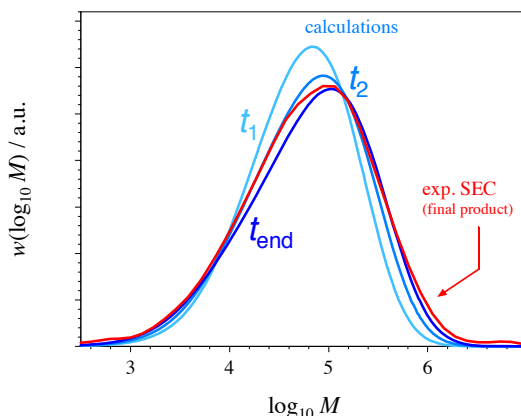


Abbildung 2: Molmassenverteilungen aus einem Polyethylenprozess in der sogenannten GPC-Darstellung, d.h. mit dem Quadrat der Kettenlänge gewichtet. Auch für sehr große Ketten wurde bei dieser Modellierung eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Messung erreicht.

vernetzten Molekülen führen. Beim Polyethylen bestimmt die Anzahl solcher Verzweigungen entscheidend die Produktqualität. Um einen Eindruck von den zugehörigen Differentialgleichungen zu geben, sei hier die Bilanz für die toten Polymerketten  $D_s$  gezeigt ( $s = 1, 2, \dots$ ):

$$\frac{dD_s(t)}{dt} = k_{ü}MP_s + k_{td}P_s \sum_{r=1}^{\infty} P_r + \frac{1}{2}k_{tc} \sum_{r=1}^{s-1} P_r P_{s-r} + k_{lcb} \cdot \left( -s \cdot D_s \sum_{r=1}^{\infty} P_r + P_s \sum_{r=1}^{\infty} r \cdot D_r \right) + k_{beta} \sum_{r=s+1}^{\infty} P_r$$

In PREDICI<sup>®</sup> werden alle resultierenden Bilanzen eines Modells (auch die sogenannten Momentengleichungen) für jede Kombination der über 75 verfügbaren Reaktionsmodule automatisch modular zusammengesetzt (wobei natürlich nicht wirklich Gleichungen implementiert sind, sondern Darstellungen in einem Folgenraum). Wie schon erwähnt, ist der Index  $s$  (die Kettenlänge) formal nicht begrenzt, kann in der Praxis aber auf einen endlichen variablen Wert gesetzt werden. Allerdings darf die Wahl dieses maximalen Index das System nicht signifikant stören. In diesem Modell haben wir es mit drei Verteilungen und ca. 10 Reaktionsschritten (Operatoren) zu tun, die Kettenlänge reicht bis ca.  $10^6$ . Der Anwender reizt in der Regel die bestehenden Möglichkeiten immer aus, so dass auch schon Modelle mit mehr als 10 Verteilungen und über 100 Reaktionsschritten bearbeitet wurden. Die besondere Komplexität der vorliegenden Problemklasse begründet sich im Auftreten der Summenterme bzw. von Integralen bei einer kontinuierlichen Eigenschaftskordinate. Es ist daher zwingend erforderlich, die Gesamtzahl der zur Approximation der Verteilungen benötigten Freiheitsgrade zu minimieren und gleichzeitig die gewünschte Genauigkeit

zu erzielen. Das obige Schema enthält noch eine Reihe von Zusatzstrukturen, wie z. B. die Abhängigkeit der Reaktionskoeffizienten von Temperatur und Kettenlänge und weitere Bilanzen, welche Thermodynamik und Reaktorfahrweise widerspiegeln.

Das von uns entwickelte numerische Verfahren leistet all dies. Es basiert auf einer sogenannte Galerkin-h-p-Methode und besteht im Kern aus einer Approximation von Anzahldichtefunktionen diskreter oder kontinuierlicher Koordinaten mit Orthogonalpolynomen auf vergleichsweise groben Gittern. Eine höherdimensionale Erweiterung wird für den kommerziellen Einsatz vorbereitet.

Die in Abbildung 2 gezeigten Verteilungen aus einer Simulation von Polyethylen sieht in der logarithmischen Skala und in einer speziellen Gewichtung recht einfach aus, ist aber extrem sensitiv. Kleinste Ungenauigkeiten bei großen Kettenlängen verursachen hier drastische Störungen im Bereich von Kettenlängen ab  $10^4$ .

### Aspekte der Umsetzung

Ein so komplexes mathematisches Verfahren (welches sich der Resultate verschiedener Gebiete wie Spezielle Funktionen, Approximationstheorie, Halbgruppentheorie, Differentialgleichungen und Statistik bedient) wie das Galerkin-h-p-Verfahren in auslieferbare Software umzusetzen, erfordert die Beachtung sehr verschiedenartiger Aspekte. Neben der notwendigen Robustheit der Algorithmen sind wichtige Punkte bei der Planung und Entwicklung zum einen die Softwarearchitektur (bei CiT sind alle Programme streng objekt-orientiert durchorganisiert), welche offen genug sein muss, um spätere Erweiterungen zu berücksichtigen, zum anderen die Anforderungen an Ge-

schwindigkeit und Speicherplatz auf der Hardwareseite und die unterstützten Betriebssysteme. Hierbei sollte man sich weitgehend nach den Wünschen der Kunden richten, wobei sich die Konzentration auf MS Windows<sup>TM</sup> wegen seiner Kompatibilität und großen Verbreitung in den Unternehmen für uns als sehr wichtig und gut erwiesen hat.

Die Ansprüche auch an sehr mathematische und komplexe Software wie die unsere sind in den letzten 5 Jahren stark gestiegen. Inzwischen wird oft erwartet, dass sich ein Problem wie das oben beschriebene praktisch ohne Einarbeitung und selbsterklärend in eine Software eingeben und lösen lässt, ähnlich wie bei einem Textverarbeitungssystem. Ergonomie und Konformität zu anderen Applikationen spielen dabei eine wichtige Rolle, ein schnell agierender Support, der nicht nur Fragen zur Software, sondern auch zur Modellierung behandelt, wird selbstverständlich erwartet. Man muss bedenken, dass kaum einer der Benutzer sich ausschließlich mit einem solchen Simulationsprogramm beschäftigt. Im Gegenteil, in der Regel wechseln sich intensive Projektphasen mit längeren Pausen ab. Wenn dann die Wiedereinarbeitungszeit in ein Spezialwerkzeug einige Stunden übersteigt, sinkt dessen Akzeptanz beträchtlich. Viele Anwender nutzen weit verbreitete Standardsoftware sehr effektiv, um für gewisse Probleme schnelle und für sie überschaubare Lösungen zu finden. Eine angebotene mathematische Technik kann noch so viel leistungsfähiger, genauer und weitreichender sein als Standardlösungen, sie muss in ihrer Aufbereitung den Ansprüchen und Gewohnheiten auch solcher Nutzer gerecht zu werden versuchen. Etwas überspitzt ausgedrückt gilt es deshalb, in manchen Anwendungsbereichen erst einmal die Tabellenkalkulation zu schlagen.

Daten und Modelle sollten sich daher möglichst einfach mit anderen Programmen verknüpfen lassen. An dieser Stelle hat es sich bewährt, alle unsere Produkte mit einer OLE-Schnittstelle auszurüsten und damit eine einfache Kopplung unserer Software mit anderen Programmen zu ermöglichen.

Nicht zu vernachlässigen bei der Umsetzung sind Punkte wie Kalkulation, Verträge, Pflichtenhefte und Dokumentation. Bei einem so offenen und komplexen Gebiet ist es nicht immer einfach, das Machbare genau abzuschätzen. Im Gegensatz zu Forschungsprojekten ist die in einem Pflichtenheft garantierte Funktionalität aber auf jeden Fall zu erfüllen – auch wenn sich herausstellen sollte, dass ein Problem eine versteckte neue Schwierigkeitskomponente enthält.

Die Präsentation der Produkte ist immer entscheidend und hier eine sehr spezielle Angelegenheit. Schließlich handelt es sich nicht um Massenprodukte, sondern Werkzeuge für neue Entwicklun-

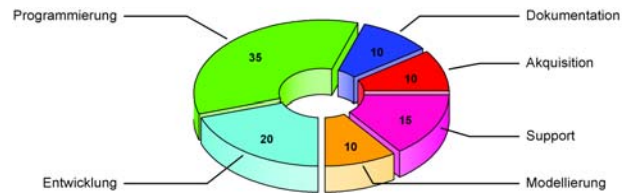


Abbildung 3: Ungefähre Aufteilung der Arbeitszeit nach Aufgabengebieten (ohne Verwaltung) bei CiT. Die Trennung zwischen den Bereichen ist natürlich nicht so strikt wie es durch die Grafik suggeriert wird.

gen. Fast jeder Kunde hat Fragestellungen zu bearbeiten, welche so bisher noch nicht aufgetreten sind. Allein die Tatsache, dass im Laufe der Zeit zahlreiche Diplomarbeiten, Doktorarbeiten und Veröffentlichungen auf Basis von Simulationen mit unseren Programmen erstellt wurden, zeigt, wie offen das Gebiet ist und damit auch die Tools sein müssen. Das bedeutet, dass die Präsentation meist nicht zu Beginn die Software vorführt, sondern mit einem wissenschaftlichen Vortrag über Methoden, Modelle und Anwendungsgebiete startet.

CiT befindet sich im Luftkurort Rastede, 15 km nördlich von Oldenburg in Niedersachsen, also kurz vor der Küste, übrigens in einem Seitengebäude des Schlosses der Herzöge von Oldenburg (Abbildung 4). Eine solche – für uns perfekte – Lage wäre wohl in Zeiten vor dem Internet nicht möglich gewesen. Lieferung und Support lassen sich heute weitgehend über Email erledigen, bei den vielen Reisen (nicht nur in Deutschland, sondern auch ins benachbarte Europa, in die USA oder sogar nach Australien) kommt es nicht sonderlich auf den Startpunkt an. Obwohl diese Reisen beträchtliche Kosten verursachen (weniger durch die direkten Reisekosten als durch den Zeitaufwand), sind sie in diesem Bereich besonders notwendig. Meist handelt es sich dabei nicht um reine Präsentationsreisen, sondern es geht um intensive Diskussionen über Modelle, Programmiererweiterungen und neue Anwendungen.

## Modellierung

Bei der Anwendung relativ abstrakter mathematischer Algorithmen auf Anwendungsprobleme hat man als Mathematiker sicher den Vorteil einer strukturellen Betrachtungsweise. Es ist immer wieder interessant zu sehen, wie ähnlich sich manche Probleme aus dieser Sicht darstellen und wie wenig oft die jeweiligen Anwender von den strukturell verwandten Problemen wissen (ein aktuelles Beispiel ist die Modellierung von Prionen, die sich direkt mit unserem Polymerisationsprogramm behandeln lassen würde). Man hat hier die Chance, durch die Distanz des Fachfremden neue Einsichten zwischen den Gebieten zu

transportieren. Allerdings wird man von den Anwendern als Mathematiker nur dann akzeptiert, wenn man sich soweit wie möglich in Details, Strukturen und Terminologie des speziellen Anwendungsgebietes einarbeitet. Schon kleine Ungenauigkeiten bei der Bezeichnung von technischen Größen in einem Programmdialog können viel Akzeptanz kosten.

Manches Problem offenbart unangenehme Feinstrukturen erst bei genauer Nachfrage in der Terminologie des Anwenders oder – viel schlimmer – erst beim Versuch der Bearbeitung. Zur Behebung solcher Schwierigkeiten muss und kann man nicht immer neue Algorithmen oder Techniken entwickeln, sondern sollte seine Erfahrung einsetzen, um mit bestehenden Mitteln eine Lösung zu suchen. Sehr oft müssen solche Dinge im Tagesgeschäft innerhalb von kurzer Zeit erledigt werden.

Gleichzeitig ist es äußerst spannend, aus einer neuen Anwendungsstruktur eine Idee für eine hinreichende und gleichzeitig mit den bisherigen Mitteln durchführbare Modellierungsidee zu gewinnen. Die Aufgabe (des Mathematikers) ist es herauszufinden, was für eine erfolgreiche Modellierung wirklich an Resultaten benötigt wird. Die zwei folgenden Beispiele sollen dies etwas konkreter beleuchten und einen Eindruck von den typischen Problemen geben.

*Verzweigungen.* Die oben kurz vorgestellten Modelle in der Polymerchemie werden meist nur bezüglich der Kettenlänge als Eigenschaftskoordeinate betrachtet. Im Polyethylenprozess wird aber durch den Schritt „Übertragung auf das Polymere“ eine mögliche Verzweigung innerhalb einer Polymerkette erzeugt. Eine solche Verzweigung ist umso wahrscheinlicher, je länger die Kette ist. Es entsteht ein Produkt mit vielen kurzen (leichten) und wenigen langen (schweren) und verzweigten Ketten. Es ist leicht, mit Hilfe eines Zählers die durchschnittliche Verzweigungszahl pro Kette, aber unabhängig von der Kettenlänge, auszurechnen. Aufgrund neuer Messtechniken wurde es vor ca. 2-3 Jahren zusätzlich interessant, die Verzweigungsstruktur genauer zu ermitteln. Ein dies berücksichtigendes Schema lässt sich mit Verteilungen mit einem zweiten Index formulieren.  $P_{s,j}$  ist dann die Anzahl der Ketten der Kettenlänge  $s$  mit  $j$  Verzweigungen. Nun gab es aber zu der Zeit kein rigoroses Verfahren, ein solches 2D-Problem allgemein zu lösen. Was war machbar und beantwortete gleichzeitig noch die Fragen der Anwender? Um dies beurteilen zu können, mussten wir uns mit den konkreten Prozessen auseinandersetzen. Ist die erwartete maximale signifikante Anzahl solcher Zusatzeigenschaften „klein“, kann man einzelne Fraktionen  $P_s^0, P_s^1, \dots, P_s^{j_{max}}$  bis zu einem Index  $j_{max}$  einführen. Um das Ganze noch rechenbar zu halten (auf Personalcomputern ohne Parallelisierung), soll-

te  $j_{max}$  nicht viel größer als 10 sein. Tatsächlich gibt es wichtige Anwendungen, bei denen ein solches Vorgehen genau die gewünschte Einsicht bietet. Leider nicht beim Polyethylen, wo man je nach Verzweigungstyp 1–30 Verzweigungen auf 1000 C-Atome findet. Eine lange Kette kann so mehr als 1000 Verzweigungen besitzen. Die Frage stellt sich damit: Genügt nicht die durchschnittliche Anzahl der Verzweigungen und eine Abschätzung der Streuung der Verzweigungen pro Kettenlänge? Die Antwort war positiv und wir entwickelten ein Kalkül, um für die typischen Reaktionsschritte jeweils sogenannte „Bilanzreaktionen“ zur Verfügung zu stellen, mit denen kettenlängenabhängige Eigenschaften berechnet werden können. Mit dieser Methode lassen sich jetzt nicht nur Verzweigungen, sondern auch Einbauverhältnisse, Endgruppenstrukturen und sogar Topologien der Moleküle relativ schnell und mit den bestehenden Mitteln berechnen. Erste Erfolge konnten dabei schon nach relativ kurzer Zeit erreicht werden, inzwischen haben sich eine Reihe von Vorträgen und Veröffentlichungen verschiedener Forschungsgruppen daraus ergeben.

*Kompartimente.* Bei der sogenannten Emulsionspolymerisation findet die Polymerisation im wesentlichen in kleinen Partikeln (Tröpfchen) innerhalb des Reaktors statt. Die Anzahl der Partikel pro Liter liegt bei etwa  $10^{17}$ – $10^{18}$ . Unter bestimmten Bedingungen kann man annehmen, dass sich in jedem der Partikel so viele aktive Ketten (Radikale) befinden, dass alle Partikel zusammen wie ein durchmischter Reaktor betrachtet werden können. Dazu muss man ein Mehrphasenkonzept in das Modell einbauen, hat aber keine weiteren mathematischen Schwierigkeiten. Nun gibt es aber auch Prozesse, bei denen die Anzahl der Radikale gering gehalten wird. Es befinden sich dann nur wenige (etwa 2-5) Radikale in einem Partikel. Damit lässt sich die wichtige Terminationsreaktion, bei der sich zwei Polymerketten gegenseitig deaktivieren, nicht mehr so einfach wie in einem durchmischten Reaktor formulieren. Schließlich „sehen“ sich die Polymerketten ja nicht über die Partikelgrenzen. Dieses Problem der Kompartimentalisierung wird seit längerem in vielen Veröffentlichungen diskutiert und teilweise sehr aufwendig behandelt (ähnlich komplex wie die Verzweigungen aus dem vorherigen Abschnitt). Über längere Zeit damit konfrontiert, stellten wir schließlich ein volles mathematisches Modell auf, welches wir dann Schritt für Schritt unter bestimmten Annahmen vereinfachten. Es stellte sich heraus, dass man unter Verwendung der Verteilung der Radikale in den Partikeln und mit einer recht allgemeinen Annahme das Problem deutlich in seiner Komplexität reduzieren kann. Insbesondere ergab es sich, dass, solange die Radikalverteilung eine Poissonverteilung

ist, das „durchmischte Modell“ auch für wenige Radikale pro Partikel korrekt ist. Dies war ein überraschendes Ergebnis und hat zu einigen Diskussionen mit den Anwendern geführt. Der Vorteil des mathematischen Vorgehens war, dass die Annahmen genau identifiziert wurden und mit den chemischen Voraussetzungen verglichen werden konnten.

*Machbarkeit.* Mit diesen Beispielen möchte ich zeigen, dass es in der Praxis darum geht, die bestehenden Mittel möglichst schnell und effizient einzusetzen, anstatt entweder schlicht aufzugeben (das sollte man sich auch nicht erlauben, wobei man sich gleichzeitig hüten sollte, etwas zu versprechen, was man nicht halten kann) oder erst ein langdauerndes Projekt zu starten. Man darf die Probleme der Anwender nicht wegdiskutieren, aber es ist durchaus erlaubt und erwünscht, einzukreisen, welche Antworten in welchem Zeitrahmen erzielt werden können oder müssen. Es gibt immer Maximalforderungen an Modelle, die mit dem augenblicklichen Stand nicht realisierbar sind. Dann ist abzuschätzen, ob sich eine Forschung in dieser Richtung lohnt (so wie bei unserem Projekt zur Erweiterung des h-p-Algorithmus auf Populationsbilanzen in mehreren Dimensionen, welches vom Ministerium für Wissenschaft und Forschung des Landes Niedersachsen unterstützt wird). Aber wenn man die eigenen und erst recht die Mittel der Mathematik (die durchaus gelegentlich eine Konsolidierung vertragen könnten) nutzt und zusammensetzt, kann man einen großen Teil der Probleme recht schnell bearbeiten – und zwar so, dass die Anwender auch zufrieden sind.



Abbildung 4: Herzogliches Schloss von Rastede. Die Firma CiT befindet sich im seitlich gelegenen Kavalierschhaus.

Auch ein Unternehmer kann also durchaus noch mathematisch-wissenschaftlich tätig sein. Dies erfordert natürlich eine Konzentration auf Kernkompetenzen – ein Internetkaufhaus zu betreiben ist sicher technisch einfacher und unter Umständen lukrativer.

**Anschrift des Autors**

Dr. Michael Wulkow  
 CiT GmbH  
 Oldenburger Straße 200  
 26180 Rastede  
 m.wulkow@cit.wst.shuttle.de  
 http://www.wst.shuttle.de/cit

*Geschichte der CiT GmbH*

Juni 1992 Gründung  
 Herbst 1992 Entwicklung und Implementierung einer allgemeinen diskreten h-p-Methode Populationsbilanzen  
 1992/1993 Entwicklung des Programmpakets PREDICI®  
 Herbst 1993 Erste Auslieferungen (Industrie und Universität)  
 ab 1994 Weiterentwicklung der Methoden und Software in alle Richtungen der Polymerisation, weltweit über 50 Kunden

1995–2000 Entwicklung von Programmpaketen für die Kristallisation PARSIVAL®, Biofilme (RIOVAL®), Kinetik (PRESTO-KINETICS®), Beteiligung an bzw. Durchführung von Forschungsprojekten  
 Mitarbeiterzahl 5 (Mathematiker, Physiker, Chemiker)

Literatur findet sich auf der CiT-Website