0 Allgemeines

Dieses Dokument ist ein Projektantrag für das Projekt „Saces“ Simple Artificial Chemistry Experimental System. Das ist eine Projekt- und Diplomarbeit an der Berner Fachhochschule BFH, Hochschule für Technik und Informatik HTI im Jahr 2005. Der Antrag wird per Montag, 28. März 2005 gestellt.

Projektbearbeiter: Anthony Aguillon, Daniel Noelpp

Projektbetreuer: Dr. Peter Schwab, Dr. Thomas Hinze (auch Auftraggeber)

Projektcoach: Gerhard Schwab

Projektantragsdokument nach Hermes 2003 (Systementwicklung Punkt 5.3.49)

1 Zweck des Dokuments

Ein Projektantrag gemäss dem Vorgehensmodell Hermes fasst ein Projekt zu Beginn soweit zusammen, dass man einen Entscheid fällen kann: Will man das Projekt starten oder nicht? Insbesondere enthält es die Ausgangslage (Wo stehen wir jetzt? Was ist das Problem?), eine Zielvorstellung (Was wollen wir erreichen?) und mögliche Lösungswege (Wie könnten wir das Ziel erreichen?).

2 Management-Übersicht

Gemäss dem Vorgehensmodell Hermes enthält die Management-Übersicht eine kurze und prägnante Zusammenfassung der nachfolgenden Kapitel und soll optisch hervorgehoben werden (darum der Rahmen). Dieses Dokument (Projektantrag) wurde im Rahmen einer Übung im Fach „Projektführung“ erstellt.

„Saces“ ist ein Experimentiersystem in künstlicher Chemie. Es ist gedacht für Lehre und Forschung. „Saces“ simuliert chemische Reaktionen anhand physikalischer Gesetzmässigkeiten. Eine dreidimensionale Animierung dient dem Einblick in die ablaufenden chemischen Prozesse. Das Projekt ist eher akademisch-wissenschaftlich als wirtschaftlich ausgerichtet, insbesondere steht nicht zwingend ein unmittelbar brauchbares Produkt im Vordergrund, sondern ein akademisch-wissenschaftliches Erarbeiten von Wissen.

Am HTI wird im letzten Semester des Informatikstudiums eine grosse Projektarbeit mit rund 450 Stunden Arbeitsaufwand pro Student durchgeführt. Wenn es die Verhältnisse erlauben, kann die Projektarbeit als Diplomarbeit mit weiteren 600 Stunden Arbeitsaufwand weitergeführt werden. Mit zwei Projektbearbeitern stehen also rund 2100 Arbeitstunden für die Umsetzung zur Verfügung. Gemäss der Kategorisierung von Projekten nach Hermes ist dieses Projekt von Kategorie „C“, d.h. ein kleines Projekt. Auch entstehen wenige oder keine dem Auftraggeber verrechenbare Kosten.

Die Software ist in Java zu entwickeln mit den Toolkits SWT für das GUI und JOGL für die dreidimensionale Darstellung. Es kann zu Performanzproblemen kommen (Simulationsalgorithmus!), darum braucht man einen Profiler für eine sorgfältige Optimierung.

Für die Berner Fachhochschule und die Technische Universität Dresden resultieren Vorteile einer vertieften fachlichen Zusammenarbeit und für den Auftraggeber Dr. Thomas Hinze ein in Lehre und Forschung praktisch nutzbares Simulationstool, das chemische Experimente veranschaulicht und die Bildung von „Was-wäre-wenn-Szenarien“ erlaubt.

Da das Projekt fixe Abgabetermine hat, führt eine Verzögerung unmittelbar zu einer Reduktion im Funktionsumfang oder Qualität (fehlende Dokumentation, schlechte Optimierung) der Software.

Risiken sind Probleme in der Interoperabilität zwischen SWT und JOGL, die Effizienz des Simulationsalgorithmus und von Java und zuletzt die Frage, ob die Simulation wirklichkeitsgetreu ist.

3 Ausgangslage

3.1 Einleitung

Die Welt, in der wir leben, wird von den Naturgesetzen der Physik und Chemie bestimmt. Insbesondere chemische Reaktionen, die unter kontrollierten Bedingungen ablaufen, besitzen eine hohe wirtschaftliche Bedeutung. Das Verständnis der Prozesse auf molekularer Ebene und dadurch mögliche Optimierungen hinsichtlich verschiedener Kriterien wie Energiebedarf, Produktausbeute und Reaktionsdauer sind Gegenstand wissenschaftlicher Forschung.

Im Fokus des Interesses steht eine möglichst wirklichkeitsgetreue mathematische Beschreibung teilchenbasierter Vorgänge. Mit den statistischen Gesetzmässigkeiten der Thermodynamik so genannter Vielteilchensysteme in Verbindung mit der Kollisionstheorie und dem Energieumsatz von Stoffumwandlungen existiert ein vielseitig anwendbares Modell, das eine realitätsnahe Simulation chemischer Reaktionen unter weitgehend frei wählbaren Bedingungen ermöglicht.

In der Wissenschaft prägt sich für die Modellierung und Simulation von Reaktionssystemen der Begriff „Künstliche Chemie“ (Artificial Chemistry).

3.2 Problemstellung

Eine geeignete Simulationssoftware gestattet einen Blick in das Innere von Prozesssystemen und macht Details von molekularen Abläufen sichtbar, die sich ansonsten einer unmittelbaren Beobachtung entziehen.

Eine dreidimensional angelegte Animation der simulierten Vorgänge dient nicht nur der Veranschaulichung und dem besseren Allgemeinverständnis, indem mathematische formulierte Zusammenhänge erlebbar dargestellt werden, sondern sie fördert darüber hinaus eine kostengünstige Vorbereitung laborpraktischer Arbeiten durch zielorientiertes Experimentieren in Was-wäre-wenn-Szenarien.

3.3 Anlass und Begründung des Projekts

Für eine Projekt- und Diplomarbeit am HTI hat Herr Dr. Thomas Hinze dieses Thema für die Bearbeitung durch zwei Studenten vorgeschlagen. Das Programm soll als Experimentiersystem zum besseren Verständnis und zur Veranschaulichung der naturwissenschaftlichen Gesetzmässigkeiten der Reaktionsprozessen dienen. Es ist für den Einsatz im Rahmen von Lehrveranstaltungen vorgesehen.

3.4 Situationsanalyse

Das Projekt ist eher akademisch-wissenschaftlich ausgerichtet. In Vordergrund steht nicht zwingend ein unmittelbar brauchbares Produkt sondern Wissenserarbeitung, z.B. ob das Vorgehen der Simulation so vorgeschlagen überhaupt machbar ist und wenn nicht, wo die Probleme liegen. Darum ist in diesem Projekt der Projekterfolg nicht unbedingt von Lösungsumfang abhängig („Lösungsumfang“ ist eines der Projekt-Erfolgsdimensionen nach Hermes).

Insbesondere steht das Projekt für sich alleine und braucht keine Schnittstellen zu anderen (Um-)Systemen.

3.5 Erbrachte Vorleistungen

Dr. Thomas Hinze hat zusammen mit Monika Sturm das Buch „Rechnen mit DNA", eine Einführung in Theorie und Praxis, geschrieben. Dazu gibt es Arbeitsmaterial zum Diplomprojekt „Saces“ Simple Artificial Chemistry Experimental System mit Spezifikationen und anzuwendenden mathematische Modelle.

Es bestehen ausserdem zwei Vorgänger-Diplomarbeiten mit den Themen „Simulation ausgewählter DNA-Computing Operation“ 2004 von Corina Frutschi und Pascal Grossniklaus

und „Simulation der Arbeitsweise eines DNA-Chips“ 2005 von Remo Lehmann und Bojan Jambreśić. Beide Diplomarbeiten befassen sich mit der Simulation molekularbiologischer, chemischer und physikalischer Vorgänge.

Unsere Arbeit hingegen befasst sich, verglichen mit den vorigen Diplomarbeiten und dem Material im Buch „Rechnen mit DNA“, eher mit den Grundlagen der Chemie, aber mit dem Hintergedanken, dass die Ergebnisse in Zukunft für die Lehre und Forschung im Bereich des DNA-Computings verwendet werden können.

3.6 Projektrahmenbedingungen

Das Projekt ist eine Projekt- und Diplomarbeit, wie sie gemäss dem Lehrplan der Berner Fachhochschule, Hochschule für Technik und Informatik HTI im letzten Jahr vorgesehen ist (ein Semester Projektarbeit zu 15 ECTS und 16 Wochen Diplomarbeit zu 20 ECTS). Das Projekt fängt mit dem Sommersemester 2005 am 21. Februar an und endet mit der Abgabe am 16. Dezember 2005.

Der Aufwand einer Lehrveranstaltung wird nach einem europäischen Standard in ECTS (ECTS = European Credit Transfer System) gemessen. Dabei bedeutet ein ECTS-Punkt einen durchschnittlich erwarteten Zeitaufwand (Vorbereitungsarbeiten, Lektionenbesuch, Hausaufgaben, Vorbereiten und Ablegen von Prüfungen) von 30 Arbeitsstunden. Mit 35 ECTS für die Projekt- und Diplomarbeit sollen also pro Person etwa 1050 Arbeitsstunden für das ganze Projekt eingesetzt werden. Es ist also ein kleines Projekt, oder nach Hermes von der Kategorie „C“ (auch weil das Projektrisiko relativ klein ist).

3.7 Vorgehensmodell

Für so ein kleines Projekt lohnt es sich eigentlich nicht, so detailliert gemäss dem Vorgehensmodell Hermes vorzugehen. Zum Beispiel bräuchte es keinen Projektantrag, weil der Entscheid, das Projekt durchzuführen, bereits gefallen ist. Aber wir, die Projektbearbeiter, führen unsere Projekt- und Diplomarbeit trotzdem gemäss dem Vorgehensmodell Hermes, nämlich als Übung im Fach „Projektführung“.

3.8 Projektauftraggeber

Der Auftraggeber, Dr. Thomas Hinze, ist Dozent an der Technischen Universität Dresden. Die Projektkommunikation zwischen Bern und Dresden wird fast ausschliesslich via E-Mail geführt.

3.9 Rechtliches

Es ist noch abzuklären, unter welchen rechtlichen Bedingungen die Software entwickelt wird. Wem gehört die Software nach dem Ende des Projekts?

4 Ziele und Lösungen

4.1 Zielvorstellungen kurz- und langfristig

Als erstes ist das Grundlagenwissen in Chemie und Physik zu erarbeiten. Wichtig ist auch ein früher Prototyp, der abklärt, ob die gewählten Technologien (SWT und JOGL) zusammenarbeiten und ob eine teilweise Compilierung mit gcj funktioniert.

Langfristig steht ein benutzerfreundliches, leicht verständliches Simulationstool im Vordergrund. Benutzerfreundlich, weil es auch in Lehrveranstaltungen verwendet werden soll.

Für zukünftige Erweiterungen (komplexere Reaktionsgleichungen, zusätzliche Nebenbedingungen, Parallelverarbeitung, etc.) soll der Quelltext intern gut dokumentiert und übersichtlich sein. Jedoch steht die Flexibilität nicht im Vordergrund – nach dem KISS-Prinzip (Keep it Simple, Stupid), wird ähnlich wie in den agilen Entwicklungsprozessen nur das geforderte Minimum implementiert.

4.2 Mögliche Lösungswege

Die Software ist in Java zu implementieren. Als Toolkit wird SWT (Standard Widget Toolkit) und für die dreidimensionale Darstellung JOGL (Java Open GL) gewählt. Swing und Java3D werden wegen ihrer Komplexität und möglicher Performanzprobleme nicht in Betracht gezogen.

Die Simulation hat möglicherweise grossen Leistungsbedarf (viele Objekte, quadratische Zeitkomplexität). Es ist nicht von Anfang an zu optimieren, sondern alles klar und übersichtlich in Java zu entwickeln. Wichtig ist eine saubere Software-Modellierung.

Mit einem Profiler werden die „heissen Stellen“ in der Software identifiziert und zuerst in Java optimiert, mit gcj kompiliert und zuletzt in C oder C++ neukodiert, um eine höhere Performanz zu erreichen. Möglicherweise arbeitet die Hotspot-Engine von Sun gut genug, dass eine Optimierung in Java reicht. Mit der Optimierung ist so spät wie möglich zu beginnen.

5 Mittelbedarf

5.1 Bewertung der Sicherheits- und Datenschutzaspekte

Die Software verarbeitet keine sicherheits- und datenschutzrelevanten Daten. Andere Sicherheitsprobleme werden durch die Sicherheit von Java bereits mehrheitlich gelöst.

5.2 Sachmittel

Als Hardware werden übliche PCs oder Apple Workstations verwendet (bereits vorhanden).

Man braucht eine IDE (Integrated Development Environment) und einen Profiler. IntelliJ IDEA und JProfiler werden verwendet. Kosten der Lizenzen: IntelliJ pro Person $99 (ca. CHF 130), JProfiler pro Person $199 (ca. CHF 260) (beide akademische Lizenzen).

Die restlichen Mittel sind entweder bereits vorhanden oder sind unentgeltlich zu beziehen (Open Source oder von der Berner Fachhochschule gestellt).

5.3 Personal

Projektbearbeiter: Anthony Aguillon, Daniel Noelpp

Projektbetreuer: Dr. Peter Schwab, Dr. Thomas Hinze (auch Auftraggeber)

Projektcoach: Gerhard Schwab

Das Personal arbeitet entweder unentgeltlich oder im Rahmen einer Anstellung als Dozent an einer Hochschule. Es braucht keinen zusätzlichen Personalaufwand.

5.4 Ausbildung

Die Projektbearbeiter stehen im letzten Jahr ihrer berufsbegleitenden Ausbildung zum Informatik-Ingenieur FH und bringen neben der Hochschulausbildung viel berufliche Praxis mit. Anthony Aguillon hat Erfahrung in Open GL und C/C++, Daniel Noelpp in Java, Java3D und Profiling. Eine gewisse Einarbeitung (Selbststudium) in die Naturwissenschaft und in SWT ist notwendig und auch eingeplant.

5.5 Bedarf an Dienstleistungen

- Projektfachbetreuung durch Dr. Peter Schwab und Dr. Thomas Hinze und Projektcoaching durch Gerhard Schwab
- PC-Infrastruktur und Internetzugang in den Räumlichkeiten an der Morgartenstrasse

6 Planung und Organisation

6.1 Projektorganisation

Einfache Projektorganisation mit Dr. Thomas Hinze als Auftraggeber (siehe Kapitel 5.3). Es braucht praktisch keine Einrichtung einer separaten Projektorganisation innerhalb der Strukturen des „Unternehmens“ Berner Fachhochschule.

6.2 Termine

- Regelmässige Zusammenarbeit der Projektbearbeiter wöchentlich jeweils Donnerstag im Sommersemester
- Etwa zweiwöchentliches Projektfach-Meeting mit Dr. Peter Schwab individuell abgemacht
- Kick-off-Meeting: Freitag, 4. März 2005
- Termin Projektantrag: Montag, 28. März 2005 (Ostermontag)
- Termin Projekthandbuch und Projektplan: Freitag, 15. April 2005
- Abschlussbericht: Freitag, 10. Juni 2005
- Fortsetzung der Projektarbeit als Diplomarbeit im Herbstquartal ab etwa August (Details sind noch abzuklären)

6.3 Prioritäten

1 Erarbeitung der naturwissenschaftlichen Grundlagen und ihrer Handhabung in Software

2 Abklärung, ob die gewählten Technologien „funktionieren“, d.h. zusammenarbeiten (Interoperabilität)

3 Software-Modellentwurf

4 Implementierung der Software

5 Dokumentation

6 Optimierung

7 Wirtschaftlichkeit

7.1 Ausblick

Da das Projekt kein kommerzielles Projekt ist, steht die Wirtschaftlichkeit nicht so im Vordergrund. Es lohnt sich aber trotzdem auch für ein akademisches Projekt im Bereich der Grundlagenforschung und Wissenserarbeitung zu überlegen, welche Kosten und Nutzen für wen auftreten.

7.2 Kosten

Der Materialbedarf und die Kosten sind bescheiden. Es ist ein kleines Projekt. Die Projektbeteiligten arbeiten entweder im Rahmen ihrer Anstellung oder Ausbildung an einer Hochschule. Es lohnt sich eigentlich nicht, eine Kostenkalkulation aufzustellen, denn es gibt keine Rechnungsstellung an den Auftraggeber.

Zwar entstehen dem Kanton Bern Kosten durch die Betreuung durch die Dozenten. Die genauen Kosten sind jedoch nicht bekannt.

Rein der Übung in Projektführung halber wird hier eine einfache Kostenrechnung (für die Projektarbeit) aufgestellt. Auf die Kostenrechnung für die Diplomarbeit wird verzichtet. Für den Personalaufwand wird ein symbolischer Wert von 1 Franken eingetragen. Die Anzahl

450 Stunden berechnet sich aus den 15 ECTS für die Projektarbeit (siehe Kapitel 3.4). Der Aufwand für die Betreuungsarbeiten ist eine grobe Schätzung (Daumen mal Pi).

Eine einfache Kostenrechnung

Bezeichnung	Menge	Ansatz (CHF)	Total (CHF)
Projektbearbeiter A. Aguillon (h)	450	1	450
Projektbearbeiter D. Noelpp (h)	450	1	450
Projektcoach G. Schwab (h)	ca. 20	1	20
Projektfachbetreuung P. Schwab (h)	ca. 20	1	20
IntelliJ IDEA Academic License	2	ca. 130	260
JProfiler Academic License	2	ca. 260	520
Total			1720

7.3 Nutzen

Für den Projektauftraggeber Dr. Thomas Hinze entsteht im besten Fall ein leicht zu benutzendes Simulationstool, das in der Lehre und Forschung von Nutzen ist. Aufwendige und kostspielige Laborexperimente können eingespart werden oder zumindest effizienter vorbereitet werden. In der Lehre können die chemischen Prozesse den Studenten leichter verständlich gemacht werden, auch weil sie „virtuell“ experimentieren können.

Für die Berner Fachhochschule und die Technische Universität Dresden gibt es eine Vertiefung in der Zusammenarbeit und Kontaktpflege.

Für die Projektbearbeiter Anthony Aguillon und Daniel Noelpp gibt es Wissenszuwachs in den naturwissenschaftlichen Bereichen Chemie, Biologie und Physik und Erfahrungserwerb in Simulation und den gewählten Java-Technologien wie SWT und JOGL. Und natürlich ist die Projekt- und Diplomarbeit Bestandteil des Hochschuldiploms zum Informatik-Ingenieur FH.

8 Konsequenzen

8.1 Auswirkungen

Es sind keine besonderen Auswirkungen zu erwarten abgesehen vom möglichen Nutzenzuwachs wie im Kapitel 7.3 beschrieben.

8.2 Auswirkungen bei Nicht-Realisierung

Der Nutzenzuwachs bleibt aus. Der Auftraggeber arbeitet wie gewohnt weiter in Forschung und Lehre. Es gibt einen Image-Verlust für die Berner Fachhochschule und für die Projektbearbeiter.

8.3 Auswirkungen bei verspäteter Realisierung

Da die Projekt- und Diplomarbeit fixe Abgabetermine haben, gibt es keine verspätete Realisierung. Sollten Arbeitspakete mehr Zeit brauchen als geplant, werden nicht alle Features implementiert, die Optimierung weggelassen oder die Dokumentation weniger ausführlich verfasst. Die Auswirkungen wären also reduzierter Funktionsumfang und Qualität.

8.4 Auswirkungen auf Schnittstellen zu anderen Systemen

„Saces“ ist ein Projekt, das für sich alleine steht und kaum Schnittstellen zu anderen Systemen hat, deshalb gibt es keine Auswirkungen auf Schnittstellen zu anderen Systemen.

8.5 Qualitätsverbesserungen

Es sind in Forschung und Lehre Qualitätsverbesserungen durch einfachere Handhabung von chemischen Experimenten und virtuelle „Was-wäre-wenn-Szenarien“ erreichbar.

8.6 Risikobeurteilung

1 SWT arbeitet nicht mit JOGL zusammen

2 Java-Applikation ist nicht schnell genug oder der Simulationsalgorithmus nicht effizient genug

3 Der Simulationsansatz ist nicht wirklichkeitsgetreu genug (spielen Wasserstoffbrücken oder Quanteneffekte eine Rolle?)

8.7 Ausweichmöglichkeiten

1 Verwendung von Swing anstelle von SWT (Problem gcj?)

2 Optimierung, Verwendung von nativem Code, Compilierung mit gcj, Verwendung eines anderen Simulationsalgorithmus, Vereinfachung von Rechenschritten

3 Kaum Ausweichmöglichkeiten, da eine wirklichkeitsgetreuere Simulation zu grosse Performanzeinbussen erleiden würde. Vielleicht Abstrahierung der beobachteten, nicht simulierten Effekte.

9 Antrag

9.1 Bisherige Entscheide

Der Entscheid, das Projekt durchzuführen ist bereits gefallen und das Projekt hat bereits begonnen.

9.2 Antrag

Wie im Vorgehensmodell Hermes üblich wird der Projektantrag formuliert.

Es wird die Freigabe des Projekts „Saces“ gemäss den in diesem Dokument gemachten Angaben beantragt.

Wie das Projekt rechtlich zu stellen ist, soll später abgeklärt werden (Kapitel 3.9). Ob und wie die Projektarbeit als Diplomarbeit fortgesetzt wird, soll auch später abgeklärt werden. Mit der Freigabe des Projektes werden auch Mittel für die benötigten Software-Lizenzen (rund CHF 780) freigegeben (Kapitel 5.2).

10 Anhang

Keine Anhänge.