Numerische Simulationen nach Maß

Franz-Theo Suttmeier
www.fem2m.de

1 Übersicht

Hinter der Überschrift verbergen sich mehrere Aspekte bei der Simulation realer Prozesse aus verschiedensten Anwendungsbereichen. So ist zum einen kommerzielle FE-Software sehr häufig überfordert bei der Behandlung komplexer Anwendungen in Wissenschaft und Industrie, d.h. zum jeweiligen Problem ist *maßgeschneiderte* Software unabdingbar. Zum anderen geht es nicht nur um qualitative Resultate (z.B. globale Struktur der Strömung), sondern auch mehr und mehr um *messbare*, quantitative Aussagen (z.B. Drag- und Lift-Koeffizienten eines umströmten Flügels). Einige Gesichtspunkte bei der *numerischen Simulation nach Maß*, möchte ich nun näher beleuchten. Im Einzelnen sind zu nennen

- Modellbildung und Parameterschätzung
- Variationelle Formulierung und Diskretisierung
- Lösungsprozesse
- Adaptivität als Schlüsseltechnologie
- Hardware und Software-Engineering
- Flexibilität
- Anwendungen

2 Modellbildung und Parameterschätzung

Die übergeordnete Aufgabe numerischer Simulation besteht in der adäquaten Beschreibung der Realität. Dies geschieht typischerweise durch ein mathematisches Modell. Im folgenden bezeichne U_R den Zustand der Realität und U_M die zugeordnete Lösung eines Modells, dass sich in vielen Fällen in der Form

$$B_\pi(U_M) = 0 \tag{1}$$

schreiben lässt. Hierbei bezeichne B_π einen (zunächst abstrakten) Operator, der durch einen Parametersatz π festgelegt ist. Als Beispiel zeigt Bild 1,(links) die Momentaufnahme (U_R) eines Schleifprozesses. Ein erster Ansatz zur Modellierung (U_M) besteht in der Annahme einer linear elastischen Scheibe, die gegen ein Hindernis gedrückt wird (siehe Bild 1,mitte).

Das Materialverhalten lässt sich mit Hilfe der Spannungen σ_M, der Verschiebungen u_M und den Verzerrungen $2\varepsilon(u_M) = \nabla u_M + \nabla^T u_M$ durch

$$\begin{aligned} \sigma_M &= \mu\varepsilon(u_M) + \lambda \operatorname{div} u_M \\ -\operatorname{div} \sigma_M &= f \end{aligned}$$

beschreiben, wobei es sich bei λ und μ um materialspezifische Konstanten handelt. Durch die Setzungen $U_M = (\sigma_M, u_M)$ und $\pi = (\mu, \lambda)$ kann dieses Beispiel dem abstrakten Rahmen (1) zugeordnet werden.

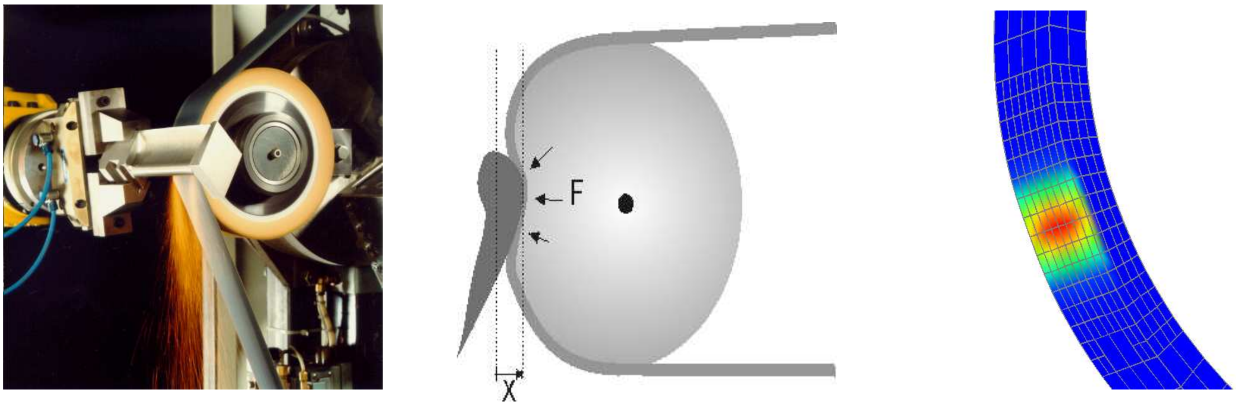


Abbildung 1: Momentaufnahme (U_R) eines Schleifprozesses (links), Modellierung (U_M) der Kontaktsituation (mitte) und Finite-Element-Lösung zum Kontaktproblem (rechts).

Nun gilt es durch Abgleich zwischen Versuchsmessungen $\mathcal{M}(U_R)$ und Auswertung des Modells $\mathcal{M}(U_M)$ die Größe der freien Parameter zu bestimmen. Gesucht ist somit ein Parametersatz π, so dass in geeigneten Normen

$$\min = \|\mathcal{M}(U_R) - \mathcal{M}(U_M)\|$$

erfüllt ist, unter der Nebenbedingung (1), $B_\pi(U_M) = 0$.

Im Allgemeinen lässt sich die Lösung U_M nicht analytisch beschreiben. Eine Standardtechnik zur Bestimmung einer näherungsweisen Lösung U_h, stellt die Methode der finiten Elemente (FE) dar. Wie in Bild 1,(rechts) angedeutet, wird das Rechengebiet in elementare Zellen mit Durchmesser h eingeteilt, auf denen dann U_h z.B. durch polynomiale Ansätze approximiert wird. Damit stellt sich nun die modifizierte Aufgabe: Bestimme π, so dass

$$\min = \|\mathcal{M}(U_R) - \mathcal{M}(U_h)\|$$

erfüllt ist, unter der Nebenbedingung $B_\pi(U_h) = 0$.

3 Variationelle Formulierung und Diskretisierung

Wie bereits angedeutet, stellen FE- oder allgemeiner Galerkin-Verfahren eine universelle und flexible Diskretisierungsmethode dar. Die Basis dazu bildet eine dem Problem angepasste variationelle Formulierung, angewendet auf (1) in der Gestalt

$$U_M \in V : \quad B_\pi(U_M; \Phi) = 0\,, \quad \forall \Phi \in V\,. \tag{2}$$

Hierbei bezeichnet V typischerweise einen Hilbert-Raum und $B_\pi(.;.)$ eine semi-lineare Form. Nun hat man sich mit Fragen der Existenz und Eindeutigkeit auseinanderzusetzen. Zum Beispiel liegt bei der Materialbeschreibung $\sigma_M = \varepsilon(u_M)$ zunächst einmal die variationelle Formulierung

$$(\sigma_M, \tau) - (\varepsilon(u_M), \tau) = 0 \quad \forall \tau$$

nahe. Allerdings zeigt sich im Falle von Plastifizierung, dass u_M unstetig sein kann, und somit stellt sich durch partielle Integration die Form

$$(\sigma_M, \tau) + (u_M, \operatorname{div} \tau) = 0 \quad \forall \tau$$

als angemessener heraus.

Eine Näherungslösung U_h zu (2) ergibt sich nun durch Approximation des Raumes V durch einen endlich dimensionalen (Teil-)Raum $V_h \approx V$.

$$U_h \in V_h : \quad B_\pi(U_h; \Phi) = 0\,, \quad \forall \Phi \in V_h\,. \tag{3}$$

Gütekriterien zur Konstruktion von V_h sind Konvergenz und Stabilität. Zur Illustration dient ein skalares Konvektions-/Diffusionsproblem. Die Struktur der Lösung zeigt Bild 2,links. Bei der Verwendung von Standardansätzen zeigen sich Instabilitäten (siehe Bild 2,mitte). Das korrekte Resultat unter Verwendung einer geeigneten Stabilisierung ist in Bild 2 (rechts) dargestellt.

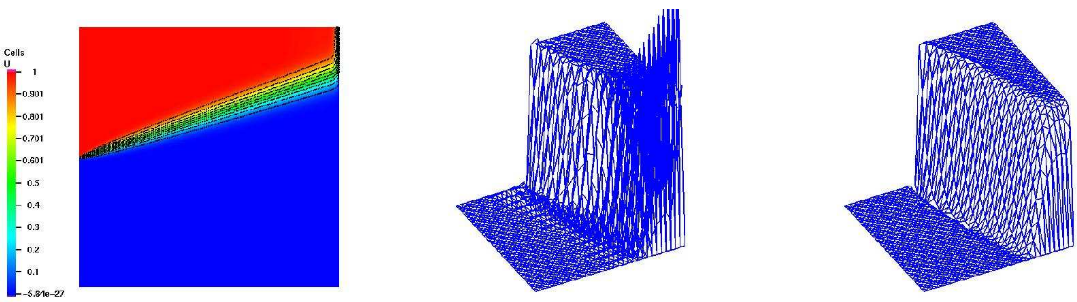


Abbildung 2: Konvektions-Diffusions-Problem: Struktur der Lösung (links), instabile FE-Lösung (mitte) und korrektes Resultat durch Stabilisierung (rechts)

Grundsätzlich besteht bei der Diskretisierung die Auswahl zwischen verschiedenen Ansätzen. So verwende ich *konforme* Ansätze für rein strukturmechanische Aufgabenstellungen. *Nicht-konforme* Ansätze verfolge ich im Rahmen gekoppelter Systeme, wie sie bei der Untersuchung von Fluid-Struktur-Wechselwirkungen auftreten. Seit neuestem arbeite ich bei elektromagnetischen Umformprozessen mit *non-standard Elementen* (edge-elements) zur adäquaten Diskretisierung der Maxwell-Gleichungen.

4 Lösungsprozesse

Zur Lösung der im Allgemeinen nichtlinearen Probleme $B(U;\Phi) = 0$ setze ich Newton-, Quasi-Newton- und Trust-Region-Verfahren ein. Im Iterationsschritt $U^{j+1} = U^j - \alpha^j D^j$ spielt dabei die Berechnung der Korrekturen D^j durch ein lineares Problem

$$L_B(D^j, \Phi) = B(U^j; \Phi) \tag{4}$$

eine zentrale Rolle. Bei der Realisierung einer effizienten numerischen Simulation muss also die schnelle und robuste Lösung der durch die Diskretisierung in (4) entstehenden linearen Gleichungssysteme erreicht werden. Dazu verwende ich

- vorkonditionierte Krylov-Raum-Verfahren,
- Mehrgitter und kaskadische Techniken,
- direkte Löser für Teilprobleme .

Insbesondere ist der Einsatz auf den jeweiligen FE-Ansatz abgestimmter Mehrgittermethoden ein Muss.

5 Adaptivität als Schlüsseltechnologie

Adaptive Diskretisierungen bilden die Schlüsseltechnologie um großskalige numerische Simulationsprobleme, die auf partiellen Differentialgleichungen fußen, zu behandeln. Das Herz der von mir eingesetzten adaptiven Konzepte ist ein Fehlerschätzer der Form

$$\|\mathcal{M}(U_M) - \mathcal{M}(U_h)\| \leq \eta(U_h, f) = \sum_T \eta_T(U_h, f)\,.$$

Der Schätzwert $\eta(U_h, f)$ zerfällt in eine Summe über auf jeder Zelle T definierten Werte $\eta_T(U_h, f)$, die durch die numerische Lösung U_h und Problemdaten f berechenbar sind. Über die verlässliche Vorhersage des Fehlers hinaus besteht durch diese lokalen Informationen die Möglichkeit eines optimierten Gitterdesigns.

Als Beispiel diene ein elasto-plastisches Werkstück mit Riss unter Belastung (siehe Bild 3,links). Das der Berechnung zugrunde liegende Gitter ist im Hinblick auf die genaue Berechnung der Randspannungen ausgelegt. Ist man hingegen an der Öffnungsweite des Risses interessiert, so ergibt sich die Zellverteilung in Bild 3, mitte. In angemessener Weise werden sowohl die Öffnungsumgebung als auch die plastifizierenden (roten) Regionen aufgelöst. Verglichen mit traditionellen adaptiven Techniken (ZZ) erzielt man bei gleichem Aufwand eine um Größenordnungen genauere Lösung (Bild 3,rechts).

Ein weiterer Effizienzgewinn ergibt sich durch Kopplung der Abbruchkriterien bei iterativen Lösern an $\eta(U_h, f)$. Grob gesprochen wäre es unnötig Iterationsfehler um Größenordnungen unterhalb des Diskretisierungsfehlers anzustreben.

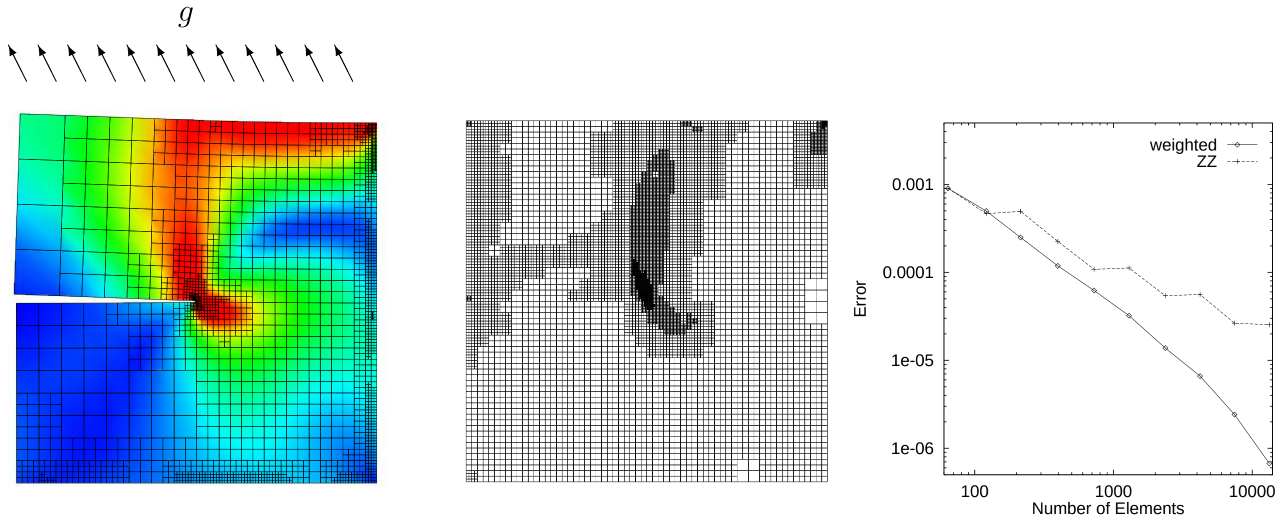


Abbildung 3: Elasto-plastisches Beispiel: Lösungsstruktur (links), optimiertes Gitter zur Bestimmung der Rissöffnung (mitte) und Aufwand/Genauigkeitsvergleich zu konventionellen Methoden (rechts).

6 Hardware und Software-Engineering

Zur Realisierung der numerischen Simulation greifen wir bei der Hardware, abhängig von der Komplexität der zu behandelnden Aufgabe, auf PC's, Workstations und PC-Cluster zurück.

Die zur Verfügung stehende Hardware kann natürlich nur durch passendes Software-Engineering gewinnbringend eingesetzt werden. Hierbei haben wir weitreichende Erfahrung in den Teildisziplinen

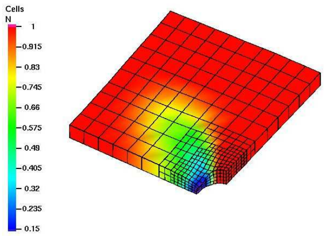
- Design von soliden Softwaresystemen
- Objektorientierte Programmierung
- DV-Projektmanagement

Software-Paket DEAL

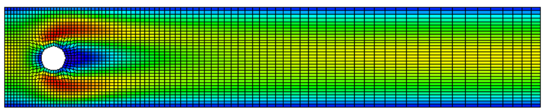
Die Grundlage oben beschriebener FE-Simulationen bildet als solide Basis das Softwarepaket DEAL.

DEAL wurde bereits erfolgreich in den verschiedensten Themengebieten eingesetzt:

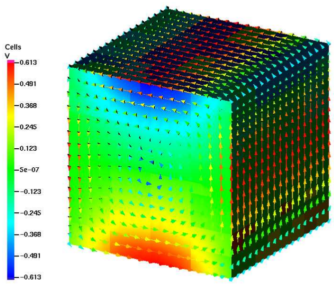
- Festkörpermechanik
  - Nichlineares Material-verhalten
  - Mikrostrukturanalyse
  - Kontaktprobleme



- Fluidmechanik
  - Inkompressible Strömungen
  - *low-Mach-number* Probleme



- Elektromagnetismus
- Multi-Physik
  - Fluid-Struktur-Wechselwirkung
  - Elektromagnetisches Umformen



Zur Implementierung werden objektorientierte Programmiersprachen eingesetzt. Dadurch besteht für Studierende die Möglichkeit Softwareerfahrung zu sammeln, die auch außeruniversitär von großer Bedeutung ist.

Somit steht zum einen ein gutes Lehr- und Lernkonzept für die Ausbildung zur Verfügung, zum anderen kann eine systematische Weiterentwicklung betrieben werden, um auch im Bereich des High-Performance-Computing erfolgreich zu arbeiten, d.h., daß für komplexe ingenieurwissenschaftliche Fragestellungen mit realen Anwendungen in der Industrie neue mathematische Methoden entwickelt und als numerische Software realisiert und ausgetestet werden, die bzgl. ihrer Qualität, Flexibilität und Leistungsfähigkeit bestehende, auch kommerzielle, Softwarepakte deutlich übertrifft.

7 Flexibilität

Basierend auf mehr als zehnjähriger Erfahrung, gesammelt an den Universitäten Bonn, Heidelberg und Dortmund, bieten wir ein großes Maß an Flexibilität ...

... in der Themenwahl:

Wir haben Erfahrung und forschen in den Bereichen

- Nichtlineares Materialverhalten
- Umformprozesse durch Magnetfelder
- Reaktive Strömungen
- Inelastische Körper in strömenden Fluiden

... in der Programmiersprache:

Wir unterstützen die Verwendung von

- C und C++
- Java
- FORTRAN

... in der Arbeitsumgebung:

Wir unterstützen *public domain* Software zur individuellen Gestaltung der Programmierumgebung

8 Anwendungen

Eine Anwendung numerischer Simulation nach Maß ist bereits in Bild 1 angedeutet. Es geht hierbei in Zusammenarbeit mit Wissenschaftler der Ingenieurdisziplinen um die Entwicklung eines geeigneten Prozessmodells für Schleifvorgänge, deren prinzipielle Struktur nochmals in Bild 4 gezeigt ist.

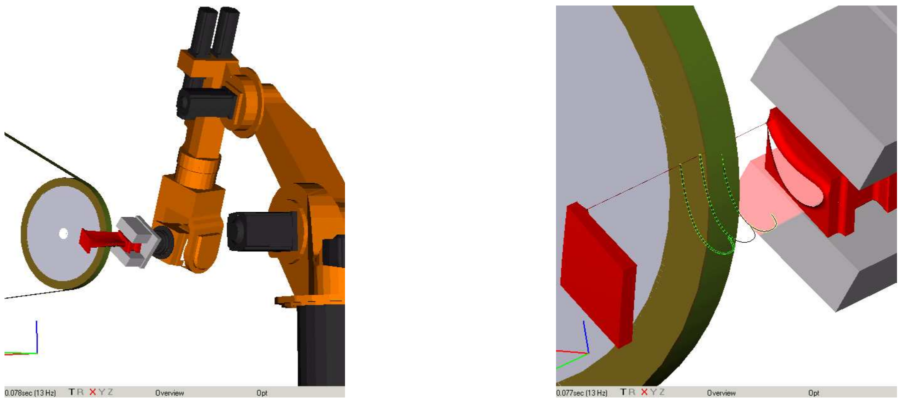


Abbildung 4: Prinzipielle Struktur der untersuchten Schleifvorgänge.

Hier sieht der iterative Prozess der Interaktion zwischen Modell und Simulation wie folgt aus (siehe Bild 5). Über eine gemeinsam entwickelte Schnittstelle wird die Werkstückgeometrie an die Simulation übergeben. Dort werden oben genannte Techniken (u.a. mathematische Formulierung, Diskretisierung, schnelle Lösung) eingesetzt, um verlässliche Informationen über die Andruckkraftverteilung im Kontaktbereich zwischen Schleifscheibe und Werkstück bereitzustellen. Diese Resultate werden dann zur Bestimmung des Abtragverhaltens herangezogen, was wiederum zu einer Änderung der Werkstückgeometrie führt.

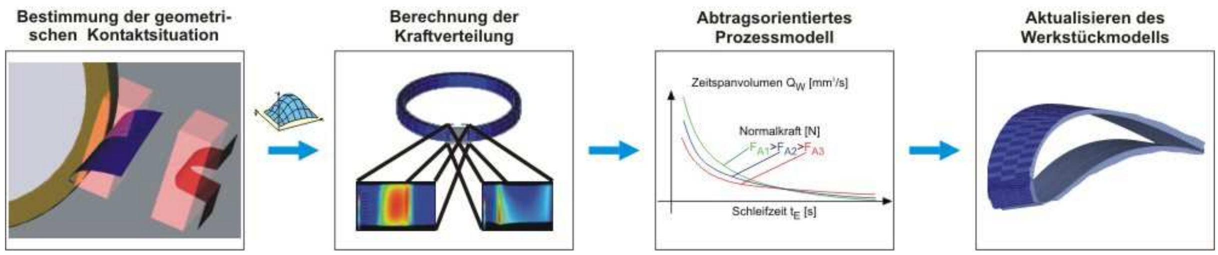


Abbildung 5: Iterativer Prozess zwischen Modell und Simulation.

Projekte

http://www.mathematik.uni-dortmund.de/~fritzi/research.html

- Röntgen-Mikrotomographie und adaptive Finite-Elemente-Simulation der Schädigungsprozesse im Mikrobereich von partikelverstärkten Metallmatrix-Verbundwerkstoffen: (zusammen mit Prof. Dr. H. Blum)

  DFG-Projekt (Bl 256/5-2):
  http://www.mathematik.uni-dortmund.de/~fritzi/mikrowww/index.html
  Mittel p.a.: 1 BAT2a Stelle und eine Hilfskraft (19.5 Stunden/Woche)
  1999 - 2004

- Adaptive Finite Elemente für Variationsungleichungen: (zusammen mit Prof. Dr. H. Blum)

  DFG-Teilprojekt der Forschergruppe 366 *Simulationsgestützte Offline-Prozessplanung und -optimierung bei der Fertigung von Freiformflächen*
  http://www-isf.maschinenbau.uni-dortmund.de/fgfff/
  Mittel p.a.: 1 BAT2a Stelle und eine Hilfskraft (19.5 Stunden/Woche)
  2000 - 2005

- Zuverlässige Finite Elemente Diskretisierungen und Modellidentifikation für Prozesse des Hochgeschwindigkeitsumformens: (zusammen mit Prof. Dr. H. Blum)

  DFG-Teilprojekt der Forschergruppe 443 *Grundlagen der Wirkmechanismen der Elektromagnetischen Umformung von Blechen*
  http://www.mathematik.uni-dortmund.de/~fritzi/emf.html
  Mittel p.a.: 1 BAT2a Stelle und eine Hilfskraft (19.5 Stunden/Woche)
  2001 - 2006

- Realisierung von schnellen Lösern und effizienten Datenstrukturen für Probleme mit Fluid-Struktur-Wechselwirkung: (zusammen mit Prof. Dr. S. Turek)

  DFG-Teilprojekt im Paketantrag *Fluid-Struktur-Wechselwirkungen*
  http://fsw.informatik.uni-stuttgart.de
  Mittel p.a.: 1 BAT2a Stelle und eine Hilfskraft (19.5 Stunden/Woche)
  2002 - 2007

- Modellierung und numerische Simulation der Feinblech-Mikroumformung in der Zone der Kontaktflächen (Geldgeber: ThyssenKrupp; zusammen mit Dr.Ing. Th. Rauscher (Universität Dortmund), Prof. M. Geiger (LFT,Universität Erlangen)),
  Beginn Januar 2005.
  Mittel p.a.: 1 BAT2a Stelle
  2005 - 2006

- Optimierung der Bauteilgüte durch Simulation beim NC-Formschleifen von Freiformflächen

  Teilprojekt im Rahmen des DFG-Schwerpunktprogramms *Wechselwirkungen Struktur-Prozess (SPP 1180).*

- Design eines objektorientierten Finite-Elemente Software-Paketes (in C++) in Zusammenarbeit mit Dr. G. Kanschat.

  DEAL – differential equations analysis library,
  `http://www.mathematik.uni-dortmund.de/~fritzi/deal/deal.html`

- Fehlerschätzung und adaptive Gittersteuerung für Elasto-Plastizitätsprobleme: (zusammen mit Prof. Dr. R. Rannacher)

  DFG-Teilprojekt im Paketantrag *Adaptive Finite-Elemente-Methods in Applied Mechanics*
  `http://www.mathematik.uni-dortmund.de/~fritzi/plasti.html`
  Mittel p.a.: 1 BAT2a Stelle und eine Hilfskraft (19.5 Stunden/Woche)
  1993 - 1998

Den Anwendungsbezug meiner Forschungsarbeiten möchte ich anhand der nachfolgenden Beschreibungen der Drittmittelprojekte (s.o.: *laufende Projekte*) darstellen.

- Adaptive Finite Elemente für Variationsungleichungen:

  Spanende oder umformende Fertigungsprozesse führen bei der mathematischen Modellierung auf Problemstellungen der Elasto-Plastizität mit Kontakt. Mathematisch wird dies durch Variationsungleichungen vom Signorini-Typ beschrieben. Zur Optimierung der Robotersteuerung werden hohe Präzisionsanforderungen an die Simulation gestellt. Dies macht u.a. effiziente und zuverlässige Fehlerkontrollen erforderlich.

- Röntgen-Mikrotomographie und adaptive Finite-Elemente-Simulation der Schädigungsprozesse im Mikrobereich von partikelverstärkten Metallmatrix-Verbundwerkstoffen:

  Um die Herstellung heterogener Werkstoffe hinsichtlich vorgegebener Eigenschaften optimieren zu können ist die Untersuchung des Schädigungsverhaltens von Verbundwerkstoffen von großem Interesse. Hierbei kommt der numerischen Simulation von Verformungsvorgängen eine große Bedeutung zu, um den Schädigungsverlauf innerhalb einer Materialprobe mit hinreichender Genauigkeit nachbilden zu können. Die Notwendigkeit zur Auflösung verschiedener Skalen der Modellbildung bringt einen hohen Bedarf an Speicherplatz und Rechenzeit mit sich. Zur realitätsnahen Abbildung der Gefügeausschnitte müssen moderne numerische Methoden verwendet werden, die auf genauen und robusten FE-Diskretisierungen und sehr effizienten Lösern für die hochdimensionalen Gleichungssysteme beruhen. Die Basis dafür bieten moderne adaptive Techniken und erprobte Mehrgitterverfahren. Durch datenparallele Ansätze werden diese Methoden auf den am Institut verfügbaren, massiv parallel arbeitenden Linux-Cluster mit 50 Prozessoren realisiert.

- Zuverlässige Finite Elemente Diskretisierungen und Modellidentifikation für Prozesse des Hochgeschwindigkeitsumformens:

  Maschinelle Fertigungsprozesse im Bereich der Magnetumformung führen bei der mathematischen Modellierung auf gekoppelte Systeme bestehend aus den elektromagnetischen

Feldgleichungen (Maxwell-Gleichungen) und einem Teil, der die elasto-plastischen Deformationsvorgänge beschreibt. Zur adäquaten Beschreibung des Materialverhaltens bei hoher Umformgeschwindigkeit müssen nichttriviale Modelle entwickelt werden. Daher sind zur Modellbildung im Zusammenwirken von Materialwissenschaft und numerischer Simulation komplexe Aufgaben der Parameteridentifizierung zu bewältigen.

- Realisierung von schnellen Lösern und effizienten Datenstrukturen für Probleme mit Fluid-Struktur-Wechselwirkung:

  Das Ziel ist die Herleitung und Realisierung von effizienten numerischen Methoden für industrie-relevante Probleme mit Fluid-Struktur-Kopplung. Da in vielen Anwendungen hochgradig instationäre Wechselwirkungen auf verschiedenen Skalen in Ort und Zeit erfaßt werden müssen, ist der Bedarf an Speicherplatz und vor allem Rechenzeit selbst auf Hochleistungsrechnern eines der Hauptprobleme. Daher müssen moderne numerische Methoden verwendet werden, die auf genauen und robusten Diskretisierungen und sehr effizienten Lösern für die (nichtlinearen) hochdimensionalen Gleichungssysteme beruhen. Der Einsatz von Hochleistungsrechnern ist hierbei unabdingbar.

  Gleichzeitig müssen Datenstrukturen und Implementierungstechniken verwendet werden, die schon auf (Einzel)Prozessoren einen signifikanten Anteil der verfügbaren Rechenleistung von nahezu 1 GFLOP/s erzielen.

- Modellierung und numerische Simulation der Feinblech-Mikroumformung in der Zone der Kontaktflächen

  Ziel des Projektes ist es, mit Hilfe der Modellierung und numerischen Simulation das Verhalten von tribologisch beanspruchten Oberflächen bei der Feinblechumformung im Nanometer-Skalenbereich besser zu verstehen, zu beschreiben und die Topographie der Oberflächen unter Berücksichtigung der gewonnenen Erkenntnisse so zu verbessern, dass technische Reserven für den Umformprozess erschlossen werden können.

Kontakt

Prof Dr. Franz-Theo Suttmeier
Fachbereich Mathematik
Walter-Flex-Str. 3
57068 Siegen
Tel.: 0271 740-3617
info@fem2m.de
http://www.fem2m.de