

Teilprojekt/Arbeitskreisgruppe B5

Titel

Adaptive Rechengitter in Raum und Zeit zur effizienten Simulation bewegter Phasengrenzen

Projektleitung/-bearbeitung

Behr, Marek, Prof., Ph.D. (Teilprojektleiter)

Karyofylli, Violeta, M.Sc. (Doktorandin)

CATS - Lehrstuhl für computergestützte Analyse technischer Systeme,
Schinkelstraße 2, 52062 Aachen

Aufgabenstellung

Das Ziel des Teilprojekts B5 im Jahr 2016 war die Simulation von Benchmark-Tests zur Validierung der 4D Raum-Zeit-Methode in unserem in-house-Solver XNS und zum besseren Verständnis des Formfüllvorgangs beim Spritzguss. Es geht um Zweiphasenströmungssimulationen, die umfassen:

- i. zweidimensionale aufsteigende Blase;
- ii. dreidimensionale aufsteigende Blase;
- iii. Metallguss einer zweidimensionalen Kavität mit Stufe;
- iv. Spritzgussverfahren einer dreidimensionalen rechteckigen Kavität mit Verteiler (Geometrie erhalten von den Sandia National Laboratories);
- v. Spritzgussverfahren einer dreidimensionalen plattenförmigen Geometrie erhalten vom Institut für Kunststoffverarbeitung der RWTH Aachen (IKV).

Die Fälle i. bis iii. wurde mit Simplex Raum-Zeit-Elementen berechnet. Die vorgenannten Testfälle sind konstruiert, die von mehreren Gruppen zur Validierung ihrer Ergebnisse verwendet werden. Beim

Fall iii. wird auch adaptive zeitliche Verfeinerung im Bereich des Nulllevels der Finite-Element-Methoden eingesetzt, um die zeitliche Auflösung nur lokal im Bereich der Materialfront zu erhöhen. Die daraus zu erwartenden Zuwächse an Recheneffizienz werden auch quantifiziert.

Die Fälle, ii. und iii. sind jedoch komplexer und dreidimensional, aber sie wurden momentan mit extrudierten Raum-Zeit-Elementen berechnet. In Zukunft werden diese Fälle auch mit Simplex Raum-Zeit-Elementen berechnet. Die experimentellen Daten für diese Tests sind verfügbar und können verwendet werden um die Simulationsergebnisse zu bewerten.

Vorgehensweise

Die wichtigsten Merkmale des mathematischen Modells sind:

- i. Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible viskose Newton'sche Flüssigkeiten oder strukturviskose Flüssigkeiten;
- ii. ein effizienter und robuster Algorithmus, um die komplexen Frontbewegungen zu erfassen (Level-Set-Gleichung);
- iii. unterschiedliche Randbedingungen auf die Bewegung der Phasenfront entlang der Wände der Kavitäten, wie Slip-, Navier-Slip- und No-Slip-Randbedingungen;
- iv. Verbindung der Navier-Stokes-Gleichungen und der Level-Set-Methodik mit neuartigen, unstrukturierten Raum-Zeit-Gittern;
- v. zeitliche Verfeinerung im Bereich der Materialfront.

Die numerischen Methoden, die für die Simulation verwendet wurden, sind:

- i. stabilisierte lineare und quadratische stabilisierte Finite-Elemente [Galerkin/Least-Squares];
- ii. Raum-Zeit Finite-Elemente mit Zeitintegration;
- iii. in-house-Solver XNS in Fortran und C;
- iv. in-house Netzgenerator mesh4d in Fortran und C für die zeitliche Ausgestaltung basierend auf der DelaunayTriangulation (qhull Code);

- v. Newton-Raphson-Iterationen mit GMRES linearen Solver;
- vi. ILU Vorkonditionierung, skaliert über mehrere Tausend Prozessorkerne.

Ergebnisse

Die simplex-basierte Version des in-house-Solver XNS, die zuvor auf anderen Plattformen verwendet wurde, wurde für die aktuellen Bull Knoten des IT-Centers kompiliert.

Der hauseigene Netzgenerator mesh4d wurde ebenfalls für diese Knoten kompiliert. Dazu wurde die neueste Version des qhull-Codes verwendet. Die numerischen Beispiele, die genutzt wurden, um die oben erwähnte Version des XNS zu validieren, beinhalten die Simulationen von einer zweidimensionalen aufsteigenden Blase und einer dreidimensionalen aufsteigenden Blase.

Der Metallguss einer zweidimensionalen Kavität mit Stufe wurde auch mit der simplex-basierten Version des in-house-Solver XNS simuliert. Die Simulation wurde auf Basis von Navier-Stokes-Gleichungen sowie Level-Set-Gleichungen in Kombination mit adaptiver zeitlicher Verfeinerung erstellt und die Ergebnisse stimmen sehr gut mit denen der Referenzberichte überein.

Zusätzlich wurde das Spritzgussverfahren einer dreidimensionalen rechteckigen Kavität mit Verteiler und einer dreidimensionalen plattenförmigen Geometrie simuliert. Dabei ist zu erwähnen, dass Raum-Zeit Gitter mit prismatischen und nicht mit simplex-basierten Elementen für diese Simulationen verwendet wurden.

Zusammenfassung und Ausblick

Zusammenfassend kann festgestellt werden, dass alle Benchmark-Fälle erfolgreich simuliert wurden.

Das Hauptziel ist jedoch, die simplex-basierte Version von XNS für Probleme von ingenieurwissenschaftlicher Signifikanz zu verwenden. Daher werden die Fälle iv. und v. die Grundlage bilden für die Untersuchungen der Simplex Raum-Zeit-Gitter und

die temporale Verfeinerung in der Nähe der sich bewegenden Grenzflächen.

Veröffentlichungen

Bisher gab es keine Veröffentlichungen in wissenschaftlichen Fachzeitschriften, jedoch können die folgenden Konferenzvorträge diesem Projekt zugeschrieben werden:

- M. Behr, V. Karyofylli, Ph. Knechtges, M. Frings and Stefanie Elgeti

Enhanced Discretization and Space-Time Refinement in Moving-Boundary Flow Simulation

eingeladener Vortrag auf dem Workshop über Space-Time Methods for PDEs, RICAM, Linz, Austria, November 2016.
- V. Karyofylli, M. Frings, L. Wendling and S. Elgeti

Adaptive Mesh Refinement in Filling Simulations Based on Level Set

Vortrag auf dem Workshop über Space-Time Methods for PDEs, RICAM, Linz, Austria, November 2016.
- L. Wendling, M. Frings and M. Behr

Two-Phase Flows Modeling of an Impacting Jet Using the Level-Set Method

YIC GACM AC.CES Conference, Aachen, Juli 2015.

Eine Veröffentlichung wird 2016 eingereicht:
“Simplex space-time meshes in two-phase simulations”, Violeta Karyofylli, Markus Frings, Stefanie Elgeti, Marek Behr, Paper (2016).