

Teilprojekt B5

Titel

Adaptive Rechengitter in Raum und Zeit zur effizienten Simulation bewegter Phasengrenzen

Projektleitung/-bearbeitung

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

Violeta Karyofylli, M.Sc. (Doktorandin)

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

Aufgabenstellung

Das Ziel des Teilprojekts B5 im Jahr 2017 war die Simulation von komplexeren und dreidimensionalen Testfälle zur Validierung der 4D Raum-Zeit-Methode und der adaptiven zeitlichen Verfeinerung im Bereich des Nulllevels der Level-Set-Funktion in unserem in-house-Solver XNS und zum besseren Verständnis des Füllvorgangs beim Spritzgießen. 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).

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 Delaunay Triangulation (qhull Code);
- v. Newton-Raphson-Iterationen mit dem linearen GMRES Solver;
- vi. ILU Vorkonditionierung, skaliert über mehrere Tausend Prozessorkerne.

Ergebnisse

Um den neuartigen unstrukturierten Raum-Zeit-Ansatz im Kontext einer Zweiphasenströmung zu validieren, wurden verschiedene Testfälle mit dem hauseigenen Löser XNS simuliert. Zuerst wurden vereinfachte instationäre Testfälle im zweidimensionalen und dreidimensionalen Raum untersucht [E1]. Es geht um die 2D und 3D Simulation von aufsteigenden Blasen und den Metallguß in einer zweidimensionalen Kavität mit einer Stufe. Für den Anwendungsfall des Metallgusses wurde auch eine adaptive zeitliche Verfeinerung im Bereich des Nulllevels der Level-Set-Funktion eingesetzt, um die zeitliche Auflösung im Bereich der Materialfront zu erhöhen.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Größe des Gleichungssystems im Vergleich zu einem prismatischen Netz der gleichen Zeitschrittgröße gleich bleibt, aber die Anzahl der Elemente ist deutlich erhöht, was zu erhöhten

Systembildungszeiten führt. Allerdings ist die Effizienz der Diskretisierung wegen der Verwendung lokaler zeitlicher Verfeinerung deutlich verbessert, da eine bessere Auflösung der Raum-Zeit der Schmelzegrenzfläche zur Verfügung steht.

Im Jahr 2017 wurde auch der Füllvorgang komplexer dreidimensionaler Kavitäten numerisch mit dem am CATS eingesetzten Simulationstool berechnet [E2]. Mithilfe einer gemeinsam mit B3 entwickelten plattenförmigen Bauteilgeometrie wurden die Ergebnisse mit simplexbasierten Raum-Zeit-Gittern gegenüber dem Experiment und gegenüber kommerzieller Simulationssoftware verglichen. Zusätzlich wurde das numerische Artefakt untersucht, das sich die Phasengrenze an der Wand auf Grund der Haftbedingung nicht weiterbewegen kann.

Die sogenannte Haftbedingung ist eine in der Strömungsmechanik oft verwendete Randbedingung, danach darf sich ein Fluid nicht relativ zur Wand bewegen. Das bedeutet, dass die Kontaktlinie sich nicht weiterbewegen kann, denn die Fluidgeschwindigkeit ist jedoch gleich null an der Wand. Dieses Paradoxon der sich bewegenden Kontaktlinie kann auf verschiedenen Lösungswegen umgangen werden. Zum Beispiel kann man die Randbedingung, die an der Wand herrscht, ändern. Bezogen auf die Spritzgießsimulation als Anwendungsgebiet kann eine Navier-Slip-Randbedingung auf den Wänden der Kavität verwendet werden, damit sowohl die Bewegung der Phasengrenze als auch die präzisere Berechnung der Druckverteilung ermöglicht wird [E2], [E3]. Die Kontaktlinie bewegt sich ohne Hindernis und es entstehen keine Hohlräume zwischen dem geschmolzenen Material und den festen Wänden der Kavität.

Zusammenfassung und Ausblick

Das Hauptziel war jedoch im Jahr 2017, die simplex-basierte Version von XNS für Probleme von ingenieurwissenschaftlicher Signifikanz zu verwenden. Daher wurden die Testfälle iv. und v. die Grundlage für die Untersuchungen der Simplex Raum-Zeit-Gitter und die temporale Verfeinerung in der Nähe der sich bewegenden Grenzflächen gebildet.

Veröffentlichungen

- [E1] Karyofylli, V., M. Frings, S. Elgeti und M. Behr, 2017. Simplex space-time meshes in two-phase flow simulations. In: *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 2018, 86, S. 218-230, DOI: 10.1002/fld.4414.
- [E2] Karyofylli, V., M. Schmitz, Ch. Hopmann, M. Behr, 2017: Novel Discretization Methods for Improved Simulation Precision in Injection Molding. In: *Sonderausgabe des Journals: Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*. 2017, 48 (Heft 12).
- [E3] Behr, M. und V. Karyofylli, 2017. Simplex space-time meshes in mold filling simulations, In: *Oberwolfach Reports 15/2017*. Oberwolfach, Germany, 2017, S. 10-13, DOI: 10.4171/OWR/2017/15
- [E4] Schöler, C., A. Haeusler, A. Gillner, V. Karyofylli, M. Behr, W. Schulz und M. Niessen, 2017. Hybrid Simulation of Laser Deep Penetration Welding, In: *Sonderausgabe des Journals: Materialwissenschaft und Werkstofftechnik*. 2017, 48 (Heft 12).

Andere Veröffentlichungen:

- [E5] Karyofylli, V. und andere, 2017. Adaptive Temporal Refinement in Mold Filling Simulations. In: *88. GAMM Jahrestagung*. Weimar, Germany, March 2017.