

Teilprojekt/Arbeitskreisgruppe B6

Titel

Dreidimensionale Modellierung und effiziente numerische Beschreibung des Kontakts zwischen Festkörpern und Flüssigkeiten

Projektleitung/-bearbeitung

Sauer, Roger A., Prof., Ph.D. (Leitung)
Harmel, Maximilian, M.Sc. (Bearbeitung)
Aachen Institute for Advanced Study in Computational Engineering Science
Schinkelstraße 2a
52062 Aachen

Aufgabenstellung

Ziel des Teilprojekts B6 ist es den thermomechanischen Kontakt zwischen einer abkühlenden Schmelze und einem Festkörper mit rauer Oberfläche numerisch effizient zu beschreiben.

Der finite Elemente Code der *AICES contact mechanics group* ermöglicht effiziente Simulationen des mechanischen Kontakts für Flüssigkeiten und Festkörper. Dazu wird eine nichtlineare Membranformulierung verwendet, die vom Projektleiter entwickelt wurde und bereits anhand von zahlreichen numerischen Beispielen aus verschiedenen Anwendungsbereichen validiert wurde. Zusätzlich soll die Strömung im Inneren der Schmelze berücksichtigt werden. Im letzten Jahr (2016) wurde zu diesem Zweck die numerische Modellierung und Lösung zweidimensionaler Strömungsprobleme untersucht. Im laufenden Jahr (2017) ist neben der Betrachtung dreidimensionaler Probleme vor allem die Herleitung und Implementierung eines effizienten Kopplungsmechanismus zwischen viskoser Strömung, Oberflächenspannung und mechanischen Kontakts eine zentrale Aufgabe des Teilprojekts.

Eine weitere wichtige Aufgabe ist die Entwicklung eines Modells für den thermischen Kontakt zwischen rauen Oberflächen und erstarrender Schmelze. Dabei wurde die Zusammenarbeit mit TP B9 vertieft und die Modellintegration in kommerzielle und hauseigene FE-Softwareumgebungen durchgeführt.

Vorgehensweise

Die verwendete Membranformulierung ermöglicht eine besonders effiziente Beschreibung von Flüssigkeiten mit konstanter oder hydrostatischer Druckverteilung, da sie lediglich eine Diskretisierung der Oberfläche erfordert. Dadurch verringert sich die Anzahl der Freiheitsgrade und der damit verbundene Rechenaufwand typischerweise um mehrere Größenordnungen. Eine volumetrische Diskretisierung würde außerdem die Verwendung von ineffizienteren Eulerischen Elementen erfordern oder eine häufige Neuvernetzung zur Folge haben. Beide Möglichkeiten führen zu einer weiteren Erhöhung des Rechenaufwands. Um die Strömung innerhalb der Flüssigkeit ohne volumetrische Diskretisierung zu modellieren, wird sie als Stokessche Strömung betrachtet und mit der *Boundary Element Methode* (BEM) diskretisiert und gelöst. Die Gültigkeit der Annahme der Stokesschen Strömung (auch schleichende Strömung genannt) ist zwar auf kleine Reynolds-Zahlen begrenzt, jedoch sind diese Bedingungen (niedrige Geschwindigkeiten, hohe Viskosität und kleine Abmessungen) in vielen Anwendungen des SFB (z.B. Löten oder Spritzguss) vorzufinden.

Um die BEM zu implementieren, wurde zunächst die dreidimensionale Randintegralgleichung analog zu ihrem zweidimensionalen Pendant hergeleitet. Dabei wurden Strömungen sowohl innerhalb als auch außerhalb einer geschlossenen Oberfläche berücksichtigt. Die Diskretisierung der Randintegralgleichung kann durch beliebige Interpolationsfunktionen erfolgen. Hier werden isogeometrische Basisfunktionen verwendet, die sich durch vorteilhafte Stetigkeitseigenschaften auszeichnen.

Zum Lösen der Randintegralgleichung muss die Greensche Funktion über die Oberfläche integriert werden. Die Greensche Funktion für dreidimensionale Stokessche Strömungen und insbesondere ihre Ableitung weisen starke Singularitäten auf. Daher wurden spezielle Quadraturregeln und Kollokationsregeln verwendet und ihr Einfluss auf die Lösung untersucht. Darüber hinaus wurde auch die Desingularisierung der Randintegralgleichung durch Überlagerung der gesuchten Lösung mit bekannten Lösungen implementiert.

Um den Einfluss von viskoser Strömung, Oberflächenspannung und mechanischen Kontakt zu berücksichtigen wurde die BEM-Formulierung für dreidimensionale Stokessche Strömung mit der FE-Membranformulierung gekoppelt. Dazu wurde ein Dirichlet-to-Neumann Operator für die Stokessche Randintegralgleichung hergeleitet. Dieser findet als Dämpfungsmatrix Eingang in das instationäre FE-System und repräsentiert so den Einfluss der viskosen Strömungskräfte. Zur zeitlichen Diskretisierung wurde die *Generalized- α* Methode verwendet. Dabei wurden drei verschiedene Kopplungsschemata implementiert: Ein vollständig implizites, ein semi-implizites und ein separiertes Verfahren.

Der thermische Kontakt zwischen rauher Oberfläche und erstarrender Schmelze soll mit einem kontinuierlichen Modell beschrieben werden. Dieses wird in einer Kooperation mit TP B9 erarbeitet. Für den Wärmeübergang zwischen Bauteiloberfläche und flüssiger Schmelze ist der Benetzungsanteil der Oberfläche von großer Bedeutung. Es wurden bestehende Benetzungsmodelle untersucht, implementiert und in den hauseigenen FE-Code von B6 sowie in eine kommerzielle FE-Software von B9 integriert.

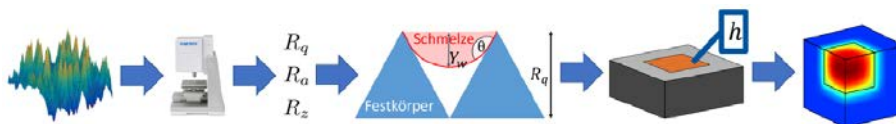


Abb. 1: Wärmeübergang: Modellierung des Wärmeübergangskoeffizienten basierend auf Oberflächenmessungen und der Benetzung

Ergebnisse

Die *Boundary Element Methode* für dreidimensionale Stokessche Strömungsprobleme wurde anhand von Strömungen, die durch rotierende Starrkörperkugeln verursacht werden, untersucht. Dabei wurde die Strömung in einer geschlossenen Kugel, außerhalb einer geschlossenen Kugel und zwischen zwei geschlossenen Kugeln betrachtet. Diese Probleme können analytisch gelöst werden und eignen sich damit zur Validierung der Methode. Unter Vorgabe von Dirichletrandbedingungen (Geschwindigkeit) wurden die resultierenden Strömungskräfte ermittelt. Für die drei unterschiedlichen Problemkonfigurationen kann eine

Übereinstimmung mit der jeweiligen analytischen Lösung in hinreichender Genauigkeit festgestellt werden. Neben einer Verfeinerung der Diskretisierung, trägt auch eine höhere Anzahl an Quadraturpunkten zu einer genaueren numerischen Lösung bei. Die Verwendung der gewöhnlichen Gauss-Legendre Quadratur zur numerischen Integration der stark singulären Greenschen Funktionen erfordern allerdings vergleichsweise viele Quadraturpunkte und verursacht dadurch einen deutlich erhöhten Rechenaufwand. Die Untersuchung von speziellen Quadraturregeln ergab, dass sich vor allem die selbst-adaptive Regel von Telles zur effizienten Integration der erforderlichen Funktionen eignet. Des Weiteren wurde durch die Implementierung der Desingularisierung der Randintegralgleichung eine Möglichkeit aufgezeigt, die Integration von singulären Funktionen zu vermeiden.

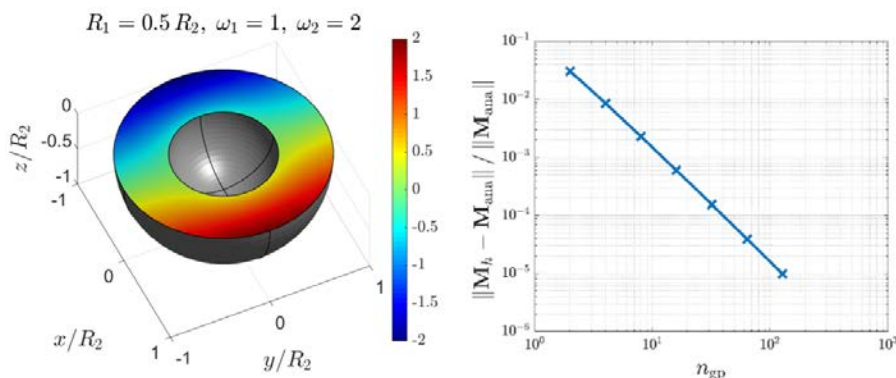


Abb. 2: Viskose Strömung zwischen zwei rotierenden Kugeln: Geschwindigkeit v_x aus BEM Simulation (links) und Fehler des Moments bei steigender Anzahl an Quadraturpunkten (rechts)

Die gekoppelte Formulierung aus FE-Membranformulierung und BEM für Stokessche Strömung wurde zunächst an einem schwingenden Balken in einer Flüssigkeit untersucht. Dazu wurde dieser zunächst quasi-statisch ausgelenkt, bevor die Belastung entfernt wurde. Um das erforderliche Biegemoment aufnehmen zu können, wurde die FE-Schalenformulierung des Projektleiters verwendet, die eine Generalisierung der Membranformulierung darstellt.

Die resultierenden Balkenschwingungen sind in Abb. 3 für eine Flüssigkeit mit zunehmender Viskosität (von links nach rechts) dargestellt. Es ist zu sehen, dass die erhöhte Viskosität der Flüssigkeit eine stärkere Dämpfung der Schwingung zur Folge

hat. Dieses Ergebnis entspricht den Erwartungen und stimmt auch quantitativ mit Ergebnissen aus der Literatur überein. Mit steigendem Kopplungsgrad der untersuchten Schemata steigt erwartungsgemäß der verbundene Berechnungsaufwand, aber auch die Größe des maximal zulässigen Zeitschritts. Während das separierte Schema sehr kleine Zeitschritte erfordert, verursacht das vollständig implizite Schema durch eine Berechnung der dicht besetzten Dämpfungsmatrix in jeder Iteration des Newton-Raphson-Verfahrens einen deutlich gesteigerten Rechenaufwand. Das semi-implizite Schema bietet hingegen einen guten Kompromiss.

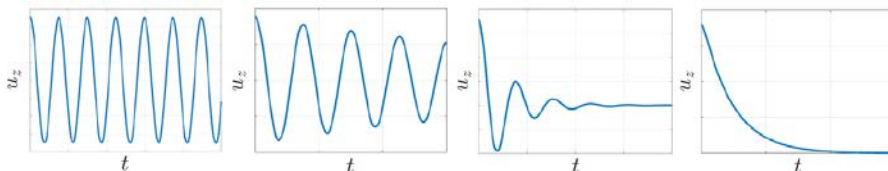


Abb. 3: Balkenschwingung in einem Fluid mit zunehmender Viskosität von (ungedämpft) nach rechts (überdämpft). Die Ergebnisse resultieren aus gekoppelten FE-BEM-Simulationen.

Um Füllsimulationen mit komplexeren Geometrien durchführen zu können, wurden entsprechende Projektionsalgorithmen implementiert. Die Anwendung in hydrostatischen Füllsimulationen ergab physikalisch nachvollziehbare Ergebnisse.

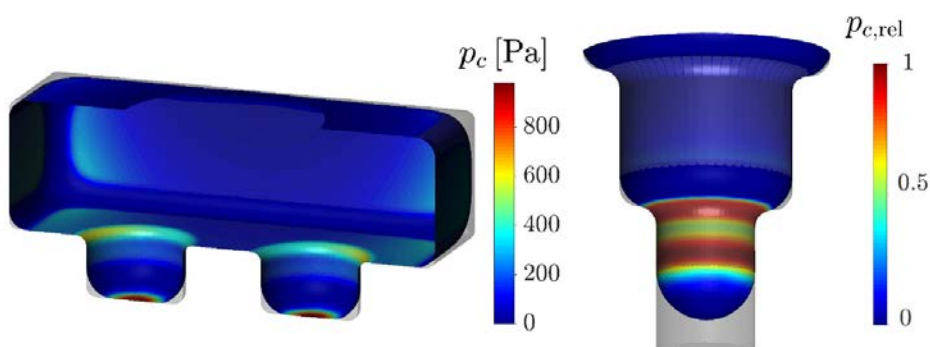


Abb. 4: Resultierender Kontaktdruck in Füllsimulationen

Die Integration des thermischen Kontaktmodells in einen hauseigenen FE-Code (B6) und eine kommerzielle FE-Software (B9) wurde anhand thermischer Beispielpunkte untersucht. Dabei wurden bisher ausschließlich die beiden numerischen Lösungen miteinander verglichen. Für den Abgleich mit experimentellen Ergebnissen werden noch Messdaten bezüglich

Kontaktwinkel und Temperaturverlauf an der Grenzfläche benötigt.

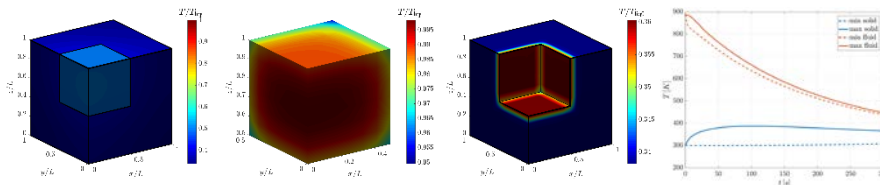


Abb. 5: Thermisches Kontaktmodell: Temperaturentwicklung zwischen erstarrender Schmelze (AlSi7) und festem Bauteil

Zusammenfassung und Ausblick

Um die Strömung im Inneren der Schmelze in die bestehende FE-Formulierung für fest-flüssig Kontakt zu integrieren, wurde die BEM für dreidimensionale Stokessche Strömungen untersucht und implementiert. Die Simulation von Strömungen durch rotierende kugelförmige Körper ergab eine gute Übereinstimmung mit der analytischen Lösung.

Weiterhin wurde ein Verfahren entwickelt, um die BEM mit der FE-Membranformulierung zu koppeln. Die gekoppelte Methode wurde anhand einer Balkenschwingung in einem viskosen Fluid untersucht. Dabei wurden die Ergebnisse erfolgreich gegen Referenzwerte aus der Literatur validiert.

Zukünftig soll die FEM-BEM-Kopplung verwendet werden, um die Verformung flüssiger Tropfen unter Berücksichtigung von Oberflächenspannung, fest-flüssig Kontakt und Stokesscher Strömung zu beschreiben. Die Methode wird in mehreren Benchmarks gegen analytische Lösungen und Referenzergebnisse validiert. Daraufhin werden frei einströmende Flüssigkeiten modelliert um Füllsimulationen (beispielsweise aus dem Kunststoff-Spritzgussprozess) durchzuführen. Dabei wird die numerische Methode mit denen aus TP B5 verglichen.

Zur Beschreibung des thermischen Kontakts an rauen Oberflächen während der Erstarrung wurde in Kooperation mit TP B9 ein Wärmeübergangsmodell hergeleitet und implementiert. Eine Validierung gegen experimentelle Ergebnisse ist aufgrund fehlender Materialkennwerte noch ausstehend. Zusätzlich soll das entwickelte Modell in thermomechanischen FE-Simulationen aus dem Metall-Gießprozess verwendet werden.

In der nächsten Förderperiode soll zum einen das entwickelte mechanische Modell erweitert werden. Dabei werden transiente Trägheitseffekte der Stokeschen Strömung, reibungsbehafteter Kontakt und verformbare Bauteilformen berücksichtigt. Zusätzlich sollen die thermischen Phänomene Wärmeübergang und -leitung in das mechanische Modell integriert werden. Die Wärmeleitung innerhalb eines Körpers wird dabei ebenfalls mit der BEM modelliert. Zur Berücksichtigung der Erstarrung soll ein einfaches BEM-Modell entwickelt werden, das zwischen linearer Fluid- und Festkörpermechanik interpoliert.

Die entwickelten Modelle und Methoden werden in zahlreichen Kooperationen mit Teilprojekten aus dem Metall- und Kunststoffbereich untersucht und validiert.

Veröffentlichungen

HARMEL, M., SAUER, R.A., BOMMES, D.: Volumetric mesh generation from T-spline surface representations. *Computer Aided Design* 82, pp. 13-28, 2017

HARMEL, M., SAUER, R.A.: Boundary element and finite element analysis for the efficient simulation of fluid-structure interaction and its application to mold filling processes. *Proc. Appl. Math. Mech.*, 17:513, 2017

RASOOL, R., HARMEL, M., SAUER, R.A.: A strategy to interface isogeometric analysis with Lagrangian finite elements – application to fluid-structure interaction problems, arxiv.org/abs/1711.06237, 2017

HARMEL, M., SAUER, R.A.: Coupling boundary element and finite element analysis for the efficient simulation of thermomechanical interactions between fluids and solids and its application to shaping processes. *VII International Conference on Coupled Problems in Science and Engineering, Rhodes*, 13.06.2017