

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 2018 war die Simulation von Testfälle, die dazu dienen, zuverlässige Zeitmessungen und die Effizienzaspekte des Füllvorgangs komplexer 3D-Formen unter Anwendung adaptiver zeitlicher Verfeinerung bereitzustellen.

Die Formfüllung ist eine Spritzgießphase von großer Bedeutung, da in diesem Prozessschritt viele Fehler der Kunststoffbauteile auftreten können. Daher spielt es eine wichtige Rolle bei der Bestimmung der Qualität der produzierten Teile. Unser Ziel ist die zeitliche Verfeinerung in der Nähe der sich entwickelnden Schmelzfront im Rahmen von 4D-Simplex-Raumzeitgittern.

Dieses neuartige Diskretisierungsverfahren verfügt über eine inhärente Flexibilität, völlig unstrukturierte Netze mit unterschiedlichen Auflösungsstufen sowohl in der räumlichen als auch in der zeitlichen Dimension einzusetzen, wodurch die Verwendung von lokalen Zeitschritten während der Simulationen ermöglicht wird. Dies kann zu einer höheren Simulationspräzision bei gleichbleibender Effizienz der Berechnung führen.

Es geht um Zweiphasenströmungssimulationen [E1, E2], die umfassen:

- i. Spritzgussverfahren einer dreidimensionalen plattenförmigen Geometrie erhalten vom Institut für Kunststoffverarbeitung der RWTH Aachen (IKV);

- ii. Spritzgussverfahren einer dreidimensionalen Kavität mit Verteiler (Geometrie erhalten von den Sandia National Laboratories).

Vorgehensweise

Die wichtigsten Merkmale des mathematischen Modells sind:

- i. Navier-Stokes-Gleichungen für inkompressible viskose Newton'sche Flüssigkeiten oder strukturviskose Flüssigkeiten;
- ii. die transienten inkompressiblen Navier-Stokes-Gleichungen, sind mit der Wärmeleitungsgleichung gekoppelt;
- iii. ein effizienter und robuster Algorithmus, um die komplexen Frontbewegungen zu erfassen (Level-Set-Gleichung);
- iv. die Slip-Typ-Randbedingungen sind ein Mittel zur Umgehung des "kinematischen Paradoxons " einer beweglichen Kontaktlinie an einer rutschfesten Grenze. Ein Kontaktmodell wird in Kombination mit einer Slip-Typ-Randbedingung verwendet und die Bedingung selbst ist auf eine kleine Zone in unmittelbarer Nähe der beweglichen Phasengrenze beschränkt;
- v. Verbindung der Navier-Stokes-Gleichungen und der Level-Set-Methodik mit neuartigen, unstrukturierten Raum-Zeit-Gittern;
- vi. 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, C und Python 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

Die Befüllung einer plattenförmigen Geometrie wurde mit dem hauseigenen Solver XNS des Lehrstuhls für computergestützte Analyse technischer Systeme (CATS) simuliert [E1]. Das Institut für Kunststoffverarbeitung (IKV) hat die Geometrie geliefert. Eine Füllstudie wurde durchgeführt, um die Entwicklung der Strömungsfront und die Druckverteilung an verschiedenen Positionen des Hohlraums zu veranschaulichen und die Simulationsleistung zu analysieren, während eine adaptive zeitliche Verfeinerung mit XNS durchgeführt wurde. Zur Validierung der vorgeschlagenen Methode wurden vom Institut für Kunststoffverarbeitung (IKV) virtuelle Experimente mit Hilfe der von Autodesk, San Rafael California, USA, entwickelten Spritzgießsoftware Moldflow durchgeführt.

Als Nächstes haben wir den Füllprozess einer dreidimensionalen Kavität mit Verteiler berechnet [E2]. Durch die Symmetrie der Geometrie zur Mittelebene wurde nur die Hälfte der Geometrie simuliert, was Zeit und Ressourcen gespart hat. Der gleiche Testfall wurde von den Sandia National Laboratories mit der Software ARIA simuliert. In diesem Benchmark haben wir das Temperatur- und Viskositätsprofil sowie die Form der sich entwickelnden Grenzfläche beobachtet. Obwohl die Sandia National Laboratories von einer Newton'schen Schmelze ohne Temperaturgradienten ausgegangen waren, wurden in unserer ersten Berechnung Auswirkungen der Strukturviskosität berücksichtigt und mit dem Carreau-WLF-Modell dargestellt.

Zusammenfassung und Ausblick

Im Jahr 2018 wurde die Zweiphasenströmung hochviskoser Flüssigkeiten mit Hilfe eines neuartigen Diskretisierungsansatzes berechnet, der eine beliebige zeitliche Verfeinerung der Raumzeitplatten in der Nähe der sich entwickelnden Vorderseite der hochviskosen Schmelze während des Spritzgießens ermöglicht.

Zukünftige Arbeiten beinhalten die Kombination von beliebiger zeitlicher Verfeinerung mit beliebiger räumlicher Verfeinerung in der Nähe der sich ausbreitenden Schnittstelle. Das Verfeinerungskriterium sollte auf einer geeigneten a-posteriori-Fehlerschätzung lokaler oder globaler Größen von Interesse beruhen, wie beispielsweise der vorderen Krümmung,

Drucksprünge in der Nähe der Grenzfläche,
Materialdiskontinuitäten und Gradienten im Viskositätsfeld.

Veröffentlichungen

- [E1] Karyofylli, V., Schmitz, M., Hopmann, C., & Behr, M. (2018, May). Adaptive temporal refinement in injection molding. In *AIP Conference Proceedings* (Vol. 1960, No. 1, p. 090008). AIP Publishing.
- [E2] Karyofylli, V., Wendling, L., Make, M., Hosters, N., & Behr, M. (2019). Simplex space-time meshes in thermally coupled two-phase flow simulations of mold filling. *arXiv preprint arXiv:1903.08710*.

Andere Veröffentlichungen:

- [E3] Karyofylli, V. und andere, 2018. Stabilized FEM for Simplex Space-Time Meshes in 4D. In: *Curves & Surfaces Konferenz*. Arcachon, France, Juni – Juli 2018.
- [E4] Karyofylli, V. und andere, 2019. Two-Phase Flow Simulations for Mold Filling on 4D Simplex Space-Time Meshes. In: *90. GAMM Jahrestagung*. Wien, Österreich, Februar 2019.