

Simulationsmethoden im Mikrometer-Bereich

Die Finite-Elemente-Methode (FEM)





Part I - Überblick über die Methode der Finiten Elemente

Part II – Algorithmische Details der Methode der Finiten Elemente

Part III - Kristallplastizitäts-FEM





Was genau ist die Finite Elemente Methode (FEM), und wie funktioniert die FE-Analyse?

Im Allgemeinen: eine Methode um partielle Differentialgleichungen näherungsweise zu lösen

Und z.B. im Kontext der Berechnung der Deformation eines Kunststoff-/ Glas-/Holz-/Metall-/...-rohres:

- Analyse = löse das (visko-)elastische/elasto-plastische/... Problem
- Finite Element = Unterteile den kontinuierlichen Körper in eine endlichen
 Anzahl kleiner Volumina/Flächen als Approximation der Geometrie und ...
- … löse die konstitutiven Gleichungen (z.B. für Elastizität) für Teilbereiche des gesamten Körpers näherungsweise.
- Das Gesamtsystem wird dabei aus seinen Teilbereichen "assembliert",

Die FEM-Theorie erfordert Spezialwissen über Kontinuumsmechanik, PDEs und Numerik. Hier: nur ein kleiner Überblick, mehr Details zur Materialmodellierung gibt es u.a. in der Kernfach/Nebenfach WW8-FEM-Vorlesung



Was genau ist die Finite Elemente Methode (FEM), und wie funktioniert die FE-Analyse?

 eine der am weitesten verbreiteten Methoden im Ingenieurwesen, in Forschung und Industrie,...

 Anwendungsbereich vor allem in der Festkörpersimulation, teilweise auch in der Strömungsmechanik

2 Stichpunkte: Diskretisierung & Interpolation:

 Innerhalb des "finiten Elements" werden Ansatzfunktionen definiert (z.B. Polynome), die die tatsächlichen Werte annähern

setzt man die Ansatzfunktionen in (die "schwache" Form der) zu lösende Differentialgleichung ein, erhält man zusammen mit Anfangs-, Rand- und Kompatibilitätsbedingungen ein lineares Gleichungssystem (LGS) → i.d.R. numerische Lösung

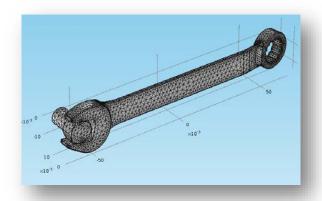
 Größe des zu lösenden LGS hängt maßgeblich von der Anzahl der finiten Elemente ab. Lösung des LGS = numerische Lösung der betrachteten DGL

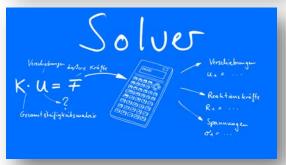


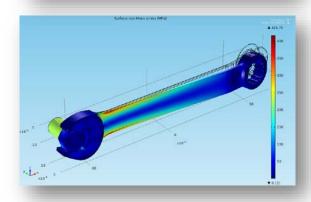
Die 3 Schritte in der FEM:

- Preprocessing "übersetzt" das Modell in die Sprache der Finiten Elemente.
 Definition von z.B. Randbedingungen, Geometrie und Diskretisierung.
- Processing ist das numerische lösen des diskretisierten Systems ← Blackbox in kommerziellen Programmen

Postprocessing ist das Visualisieren,
 Auswerten und Validieren der Rechnung









Die 3 Schritte in der FEM: (I) Preprocessing

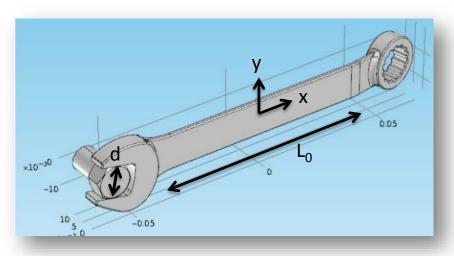
Hierin werden dem Finite Elemente Programm die zur Berechnung des Problems notwendigen Eingabedaten interaktiv oder auch in Form von Eingabedateien zur Verfügung gestellt. Die Kontrolle der Eingabe kann zumeist grafisch durchgeführt werden. Wesentliche Eingabedaten sind:

- Geometrie: Beschreibung der Form des betrachteten Körpers
- Material: welche(s) Material(ien)? in welchen Bereichen?
 Temperaturabhängig? Zeitabhängig?
- **geometrische Randbedingungen**: Verschiebungen, Lager
- statische Randbedingungen: Lasten/Kräfte
- Volumenlasten: z.B. Gravitation, Temperatur
- Typ der verwendeten finiten Elemente: i.d.R. 'simpler' als die Geometrie
- Netzgenerierung (Zerlegung der Struktur in finite Elemente)

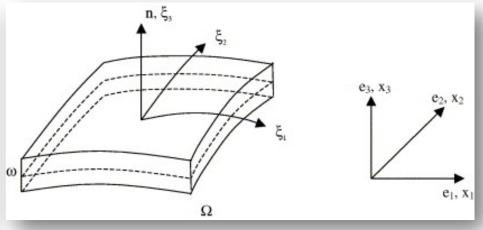


Geometrie

- Definition der Abmessungen des betrachteten K\u00f6rpers
- Definition von (lokalen) Koordinatensystemen (wichtig vor allem bei komplizierter Geometrie)



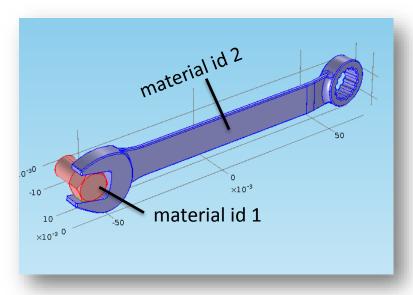
Werkzeuggeometrie mit Bemaßungen

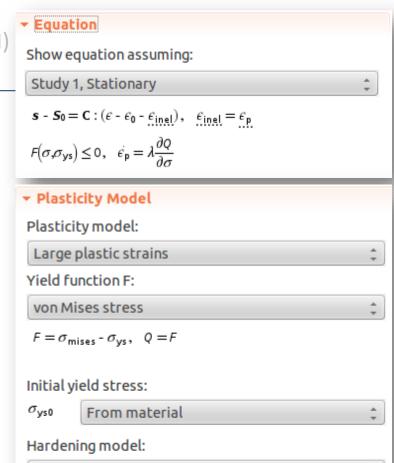


dünne, gebogene Schalenstruktur mit lokalem nicht-Kartesischem Koordinatensystem

Material

- Beschreibung des Materialgesetzes = konstitutives Gesetz
- Z.B. linear elastisch isotrop: erfordert Parameter E, ν
- Z.B. elasto-plastisch, erfordert z.B. die Fließfunktion, E, ν , sowie Verfestigungsmoduli





Isotropic

Isotropic hardening:

Use tangent data

 $\sigma_{ys} = \sigma_{ys0} + \frac{E_{Tiso}}{1 - \frac{E_{Tiso}}{E}} \epsilon_{pe}$

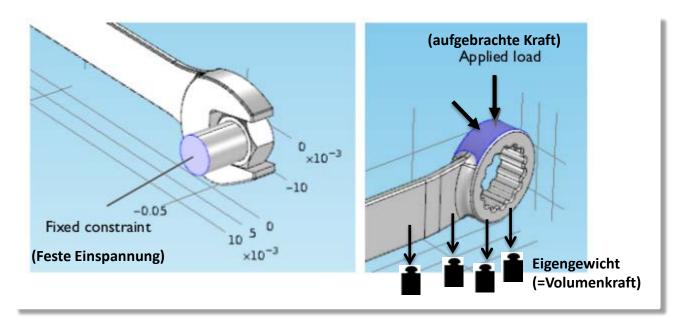
Isotropic tangent modulus:

E_{Tiso} From material ‡



geometrische Randbedingungen (Verschiebungen, Lager) statische Randbedingungen (Lasten), Volumenlasten

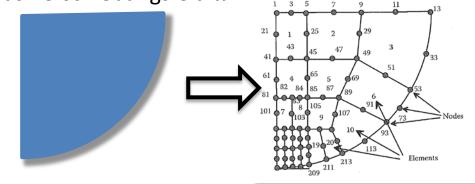
- Mechanische Deformation ist eine Randwertproblem (BVP)
- jeder Punkt der Oberfläche muss definierte Randbedingungen haben
- In der FEM wird in jedem Punkt des Randes/der Oberfläche die Verschiebung und/oder Kraft definiert, oder er wird als "frei" definiert





Typ der verwendeten Elemente und Netzgenerierung (Zerlegung der Struktur in finite Elemente)

- Diskretisierung der Geometrie: ersetze (komplexe) Geometrien durch einfache Formen – die finiten Elemente
- Die primären Unbekannten (Verschiebungen) werden dann auch auf diesen einfachen Geometrien angenähert
- Bestandteile der diskreten Geometrie (=Netz**): Knoten* und Elemente
 - Knoten: Punkt im Körper gegeben durch Koordinate, bezeichnet durch Knotennummer
 - Während der Deformation kann jeder Knoten in eine neue Position geraten. Das ist gegeben durch das Verschiebungsfeld $m{u}$.
 - Lösung des FE-Problems
 - = Bestimmung aller Knotenverschiebungen!

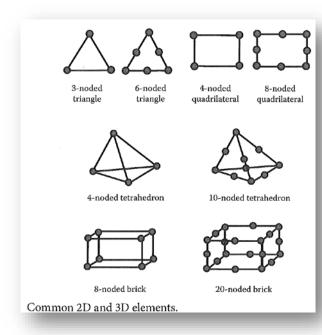




Typ der verwendeten Elemente und Netzgenerierung (Zerlegung der Struktur in finite Elemente)

Bestandteile der diskreten Geometrie (=Netz**): Knoten* und Elemente

- Elemente: Elemente werden verwendet um den Körper in diskrete Regionen zu partitionieren.
 Sie haben folgende Eigenschaften:
 - 1. eine Elementnummer, gewöhnlich eine ganze Zahl, um das Element zu identifizieren
 - eine Elementgeometrie, z.B. in 2D ein Dreieck* oder ein Viereck**. In 3D: Tetraeder***, Würfel**** oder (unregelmäßige) 8-Knoten Elemente****.
 - eine Zahl von Oberflächen die Seiten der Elemente
 - Jedes Element wird "aufgespannt" von den Knoten

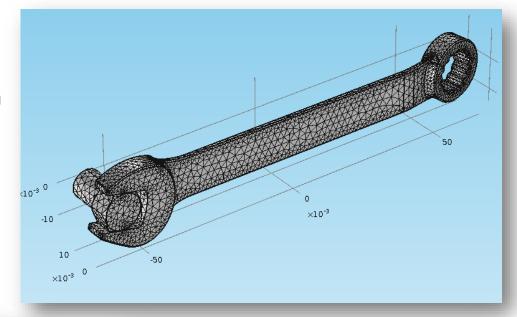


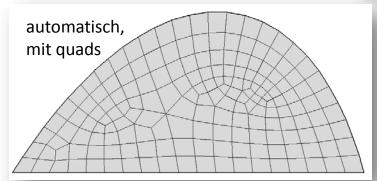


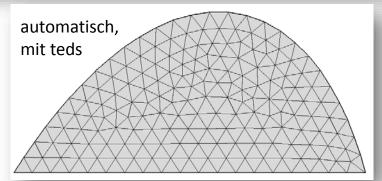
Typ der verwendeten Elemente und Netzgenerierung (Zerlegung der Struktur in finite Elemente)

Netzgenerierung

- entweder manuell (einfache Geometrie), oder automatisch (komplexe Geometrie)
- für automatische Netzgenerierung geeignet:
 Dreiecke und Vierecke
 (2D) oder Tetraeder (3D)









Die 3 Schritte in der FEM: (II) Processing

Innerhalb des Processing findet die numerische Umsetzung der Finite Elemente Methode statt. Hierzu sind im wesentlichen folgende Schritte notwendig:

- Berechnung der Elementsteifigkeitsmatrizen beschreibt das Verhalten eines jeden Einzelelements während Deformation
- Berechnung der Elementlastvektoren (Volumen- und Randlasten) welche Elemente haben BCs/Volumenkräfte vorgeschrieben, welche Elemente grenzen nur an andere Elemente?
- Zusammenbau (Assemblierung oder Ensemblierung) der Systemsteifigkeitsmatrix und des Systemlastvektors – das Gesamtsystem ist die Summe aller Einzelbeiträge unter Berücksichtigung, wie die Einzelelemente zusammen gehören
- Auflösung des entstandenen linearen Gleichungssystems nach dem Systemverschiebungsvektor – das Ziel! PDE→LGS, und das können wir leicht lösen!



Lösung und Output bei COMSOL

▼ 🚳 wrench.mph (root) ▶ ■ Global Definitions ▶ **Model 1** (mod1) Study 1 Step 1: Stationary ▼ 🛼 Solver Configurations ▼ 🚰 Solver 1 ## Compile Equations: Stationary ▶ u.v.w Dependent Variables 1 ▼ Tationary Solver 1 □ Direct Advanced Fully Coupled 1 ▼ N Iterative 1 ☐ Incomplete LU ▼

Multigrid 1 Presmoother Postsmoother Coarse Solver ▼ Results

```
========= Opened wrench.mph =======
Number of vertex elements: 264
Number of edge elements: 1561
Number of boundary elements: 5010
Number of elements: 13568
Free meshing time: 0.70s
Minimum element quality: 0.001485
Number of vertex elements: 264
Number of edge elements: 2076
Number of boundary elements: 7596
Number of elements: 21837
Free meshing time: 0.89s
Minimum element quality: 0.006041
Number of vertex elements: 264
_____
Number of vertex elements: 0
Number of vertex elements: 264
Stationary Solver 1 in Solver 1 started at 28-Jan-2013 17:04:20.
Linear solver
Number of degrees of freedom solved for: 119316.
Symmetric matrices found.
Scales for dependent variables:
mod1.u: 1
        Damping
                   Stepsize #Res #Jac #Sol LinIt LinErr
Tter
                                                          LinRes
      1.0000000
                       0.87
                                             25 0.00094
                                                         2.3e-06
Stationary Solver 1 in Solver 1: Solution time: 6 s.
```



Die 3 Schritte in der FEM: (III) Postprocessing

Die Ausgabe der Lösung und die Interpretation und Kontrolle der Ergebnisse durch den anwendenden Ingenieur erfolgt im Postprocessor des Programmsystems. Durchzuführende Operationen sind:

- Separierung der Elementverschiebungsvektoren welche globale Knotenverschiebung gehört zu welchem Element?
- Berechnung der approximierten kontinuierlichen Verschiebungen mittels der Ansatzfunktionen – bisher haben wir nur die Verschiebungen an den Knoten, deswegen die Approximation im Inneren der Elemente
- Berechnung der approximierten kontinuierlichen Verzerrungen und Spannungen, z.B. in 1D gibt die errechnete Verschiebung u eines Stabes der Länge l:

 $\varepsilon(x) = \frac{\Delta l}{l}$ und $\sigma(x) = E\varepsilon = \Delta l/l$

i.A. geht das natürlich nicht so einfach, zeigt aber die Idee des Postprocessings

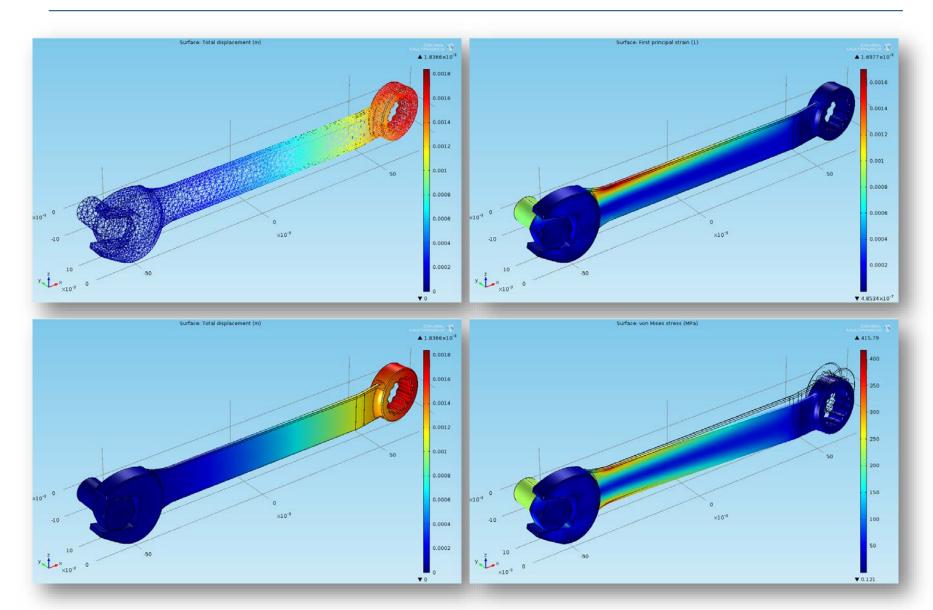
- Visualisierung von Deformationen, Dehnungen und Spannungen
- Interpretation der Ergebnisse und Fehleranalyse

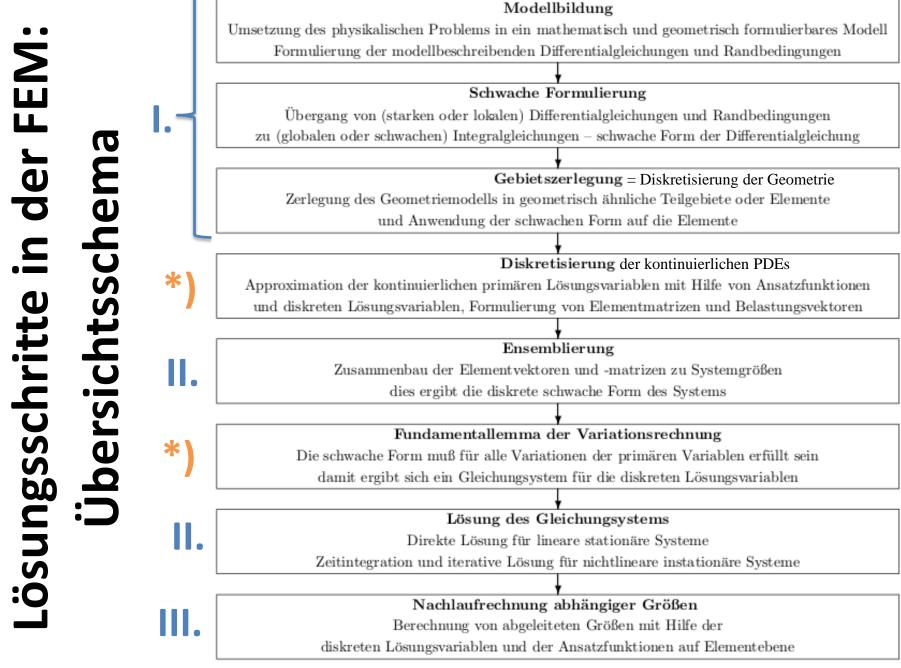


Lösung des globalen LGS Knotenverschiebungen interpolierte Verschiebungen interpolierte Dehnungen interpolierte Spannungen

Die Methode der Finiten Elemente (FEM)









Part I - Überblick über die Methode der Finiten Elemente

Part II – Mathematischen Details der Methode der Finiten Elemente

Part III - Kristallplastizitäts-FEM



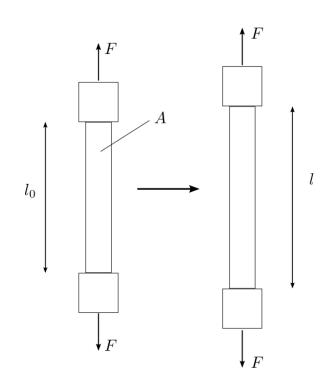


1. Kontinuumsmechanische Grundgrößen

- Verschiebungsvektor $u = u_i$
- Dehnungsstensor $\boldsymbol{\varepsilon} = \varepsilon_{ij}$
- Spannungstensor $oldsymbol{\sigma} = \sigma_{ij}$
- Materialeigenschaften $\mathbb{C} = C_{ijkl}$

In 1D (z.B. uniaxialer Zugversuch)

- Verschiebungen: $\Delta l = l l_0$
- Dehnungen : $\varepsilon = \frac{l-l_0}{l_0} = \frac{\Delta l}{l_0}$
- Spannungen: $\sigma = E \ \varepsilon = \frac{F}{A}$
- Materialeigenschaften: E



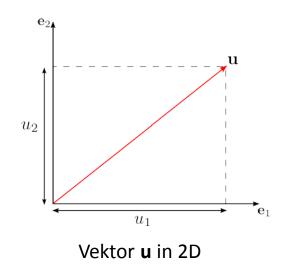


Exkurs: Wiederholung/Kurzeinführung Vektoren und Tensoren

Ein beliebiger **Vektor** (z.B. u) kann als Linearkombination von Basisvektoren geschrieben werden:

$$u = u_1 e_1 + u_2 e_2 + u_3 e_3 = \sum_{i=1}^{3} u_i e_i$$

Notation ohne Basis als Spaltenvektor: $\mathbf{u} = \begin{bmatrix} u_1 \\ u_2 \\ u_3 \end{bmatrix}$



Tensoren sind "Matrizen mit Basis"

z.B.
$$\boldsymbol{\sigma} = \sigma_{ij} \; \boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{e}_j$$

Hier: Vorstellung als Matrizen ausreichend:
$$\sigma = \begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}$$



Grundgleichungen der Mechanik

Ausgangspunkt: Zweites Newtonsches Gesetz

"Die Änderung der Bewegung ist der Einwirkung der bewegenden Kraft proportional und geschieht nach der Richtung derjenigen geraden Linie, nach welcher jene Kraft wirkt."

 $F = m \ a(= m \ \ddot{x})$

Die gesamt, resultierende Kraft ${m F}_T$ kann in Kräfte auf die Oberfläche ${m F}_c$ und Volumenkräfte

 \mathbf{F}_B aufgeteilt werden: $\mathbf{F}_T = \mathbf{F}_B$

$$\mathbf{F}_T = \mathbf{F}_B + \mathbf{F}_c = m \mathbf{a}$$

Kräfte auf Oberfläche/Kontaktkräfte (z.B. Zuglasten):

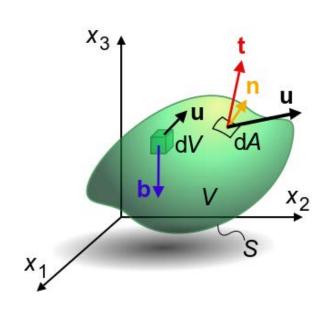
$$F_c = \int_{\Gamma} t dA$$

Volumenkräfte (z.B. Gravitation):

$$F_B = \int_V b \, dV$$

Impulsbilanz:

$$\int_{V} \boldsymbol{b} \, dV + \int_{\Gamma} \boldsymbol{t} \, dA = \int_{V} \rho \, \ddot{\boldsymbol{x}} dV$$



= 0, falls Körper in Ruhe



Wo sind die Spannungen σ ?

Spannungsvektor *t* ist im allgemeinen nicht parallel zur Normalen n der Fläche dA

→ Zerlegung in Komponenten normal und parallel zur Fläche = Komponenten des Spannungstensors

$$t = \sigma n \Leftrightarrow t_i = \sigma_{ij} n_j$$



Impulsbilanz (Statik):

$$\int_{V} \boldsymbol{b} \, dV + \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{n} \, dA = \boldsymbol{0}$$

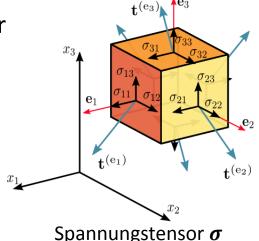


Gaußscher Integralsatz (Divergenz Theorem)

$$\int_{V} \mathbf{b} \, dV + \int_{\Gamma} \operatorname{div} \mathbf{\sigma} \, dV = \mathbf{0}$$

$$| \mathbf{b} \, dV + \int_{\Gamma} \operatorname{div} \mathbf{\sigma} \, dV = \mathbf{0}$$

$$| \mathbf{c} \, \mathbf{c} \,$$





Spannungstensor σ

Wo sind die Spannungen σ ?

Spannungsvektor *t* ist im allgemeinen nicht parallel zur Normalen n der Fläche dA

→ Zerlegung in Komponenten normal und parallel zur Fläche = Komponenten des Spannungstensors

$$t = \sigma n \quad \Leftrightarrow \quad t_i = \sigma_{ij} n_i$$



Impulsbilanz (Statik):

$$\int_{V} \boldsymbol{b} \, dV + \int_{\Gamma} \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{n} \, dA = \boldsymbol{0}$$

$$\varphi = 1 \text{ (konstant)}$$

$$\int_{V} \boldsymbol{b} \, dV + \int_{\Gamma} \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} \, dV = \boldsymbol{0}$$

Gaußscher Integralsatz (Divergenz Theorem)

Verallgemeinerung der partiellen Integration auf mehrere Dimensionen

$$\int_a^b f'(x)g(x)dx = f(x)g(x)\Big|_a^b - \int_a^b f(x)g'(x)$$

$$\int_{V} \varphi \operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} dV = \int_{\Gamma} \varphi \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{n} dA - \int_{V} \boldsymbol{\sigma} \operatorname{grad} \varphi dV$$

 $\mathbf{t}(\mathbf{e}_2)$



2. Erhaltungsgleichungen*

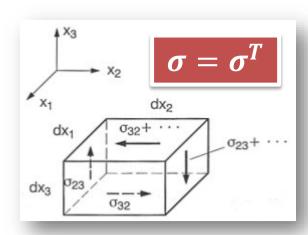
 Lokale Impulserhaltung**: innere Kräfte und Spannungen müssen sich ausgleichen, damit der Körper in Ruhe bleibt



Momenterhaltung***:

 der Spannungstensor muss symmetrisch sein

 (Beweis analog zur Impulsbilanz)

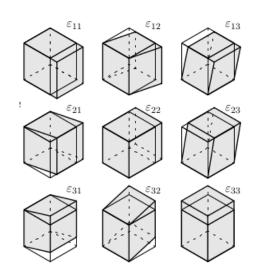




3. Kinematische Gleichung (KE) *

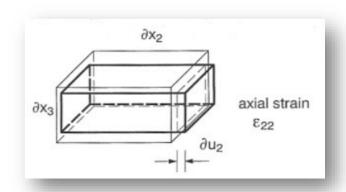
• ... stellt Beziehung zwischen Dehnungen $oldsymbol{arepsilon}$ und Verschiebungen $oldsymbol{u}$ her

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\nabla} + \boldsymbol{\nabla}^T) \boldsymbol{u}$$
 ...oder $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$



• Beispiel: axiale Dehnung

$$\varepsilon_{22} = \frac{\partial x_2 + \partial u_2 - \partial x_2}{\partial x_2} = \frac{\partial u_2}{\partial x_2}$$



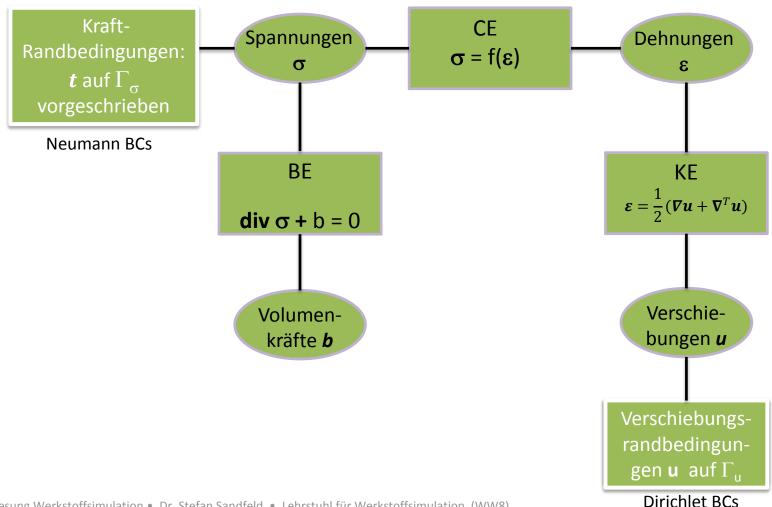


4. Konstitutive Gleichung (CE) **

- Beziehung zwischen Spannungen und Dehnungen
- DAS ist das Materialgesetz, dass der Simulation zugrunde liegen soll
- Beispiel: Hook'sche Gesetz beschreibt linear-elastisches Verhältnis zwischen Spannungen und Dehnungen
- allgemein (Tensor-Notation): $\sigma = \mathbb{C}$: ε $\sigma = E \varepsilon$ (\mathbb{C} ist der allgemeine elastische Tensor in 3D, analog zum E-Modul in 1D)
- alle anderen Materialgesetze (Viskosität, Plastizität etc.) deutlich aufwändiger!



Das Tonti-Diagramm: Überblick über Zusammenhänge zwischen allen Komponenten





Wo steckt da die Partielle Differentialgleichung??

- schreibe alle Gleichungen als Funktion der sog. "primären Variablen", z.B. Kraft und Verschiebungen (seltener: Spannung und Dehnung)
- es tauchen jetzt Originalfunktionen und deren Ableitungen (z.B. in der Gleichung für das Momentengleichgewicht) auf → PDE

• eine PDE-Variante, die elastisches Verhalten beschreibt (aber nicht für die FE-Formulierung geeignet ist), ist die Navier-Lame-Gleichung $(\lambda + \mu)\nabla(\nabla \cdot \boldsymbol{u}) + \mu\nabla^2\boldsymbol{u} + \boldsymbol{F} = 0$

mit λ , μ – Lamè Konstanten, \boldsymbol{u} das Verschiebungsfeld, \boldsymbol{F} die Kräfte



Die Besonderheit der FEM: die "schwache" Form

- Löse die PDE's nicht exakt in jedem Punkt, sondern nur in einem Integralen (=schwachen) Sinn
- Definiere Residuen ("Reste") R(x) für die Gleichgewichtsbeziehungen zusammen mit RBs, wichte diese mit Wichtungsfunktionen und integriere sie über den kompletten Körper (Methode der gewichteten Residuen)

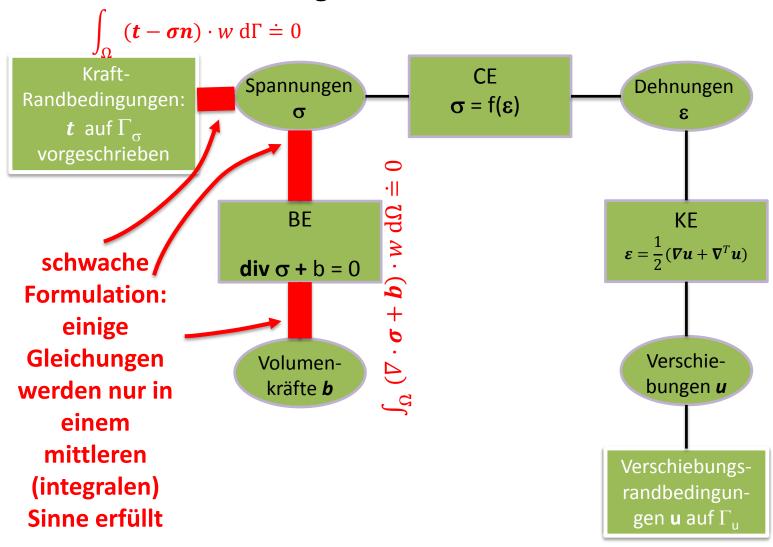
$$R(x) = 0 \Rightarrow \int R(x)w(x)dx = 0,$$

z.B. $R(x) = t - \sigma n = 0$ (auf dem Rand)

- Die Lösung der lokalen Form löst automatisch die schwache (Integrals-) Form, umgekehrt können mehrere Lösungen existieren, die die schwache Form lösen.
- Die schwache Form ist Grundvoraussetzung für die Anwendbarkeit von numerischen Näherungsverfahren!
- Eng verwand mit dem "Prinzip der virtuellen Arbeit"
- FEM basiert stark auf der Methode der gewichteten Residuen



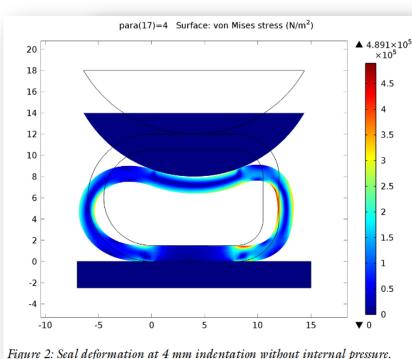
Das Tonti-Diagramm: die schwache Form





Anwendungsbeispiel: Eine hyperelastische*) Gummidichtung

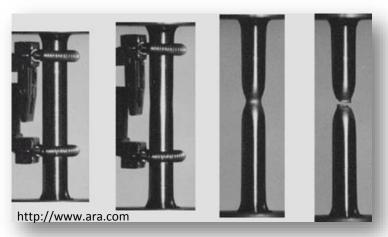
- Studie der Kraft-Verschiebungs-Beziehung der Autotür-Gummidichtung aus einem Weichgummi.
- Das Model verwendet ein hyperelastisches Materialmodel zusammen mit Formulierungen, die die großen Deformationen und den Kontakt berücksichtigen können
- Dichtung wird komprimiert zwischen einer glatten Oberflächen und einem eindrückenden Zylinder
- Wir untersuchen den Einfluss der Luft im Inneren des Gummiteils

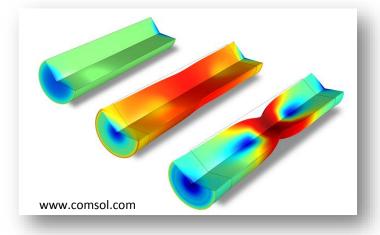


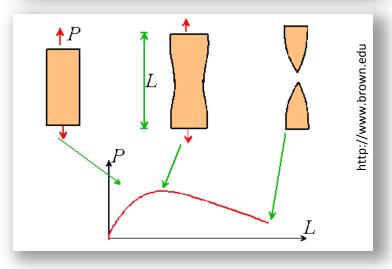
z.B. nicht-linear elastische, inkompressible Polymere oder biologische Gewebe



Einschnürung* und duktiler Bruch** eines zylindrischen Körpers während wachsender Zugbelastung







- (duktiler) Bruch tritt auf in der stark lokalisierten plastischen Zone
- Geometrieänderung im Einschnürbereich macht Spannungs-/ Dehnungsberechnung analytische Lösungen sehr kompliziert (oder fast unmöglich)
- numerische Methoden, die das System näherungsweise beschreiben sind erforderlich!



Die Finite-Elemente-Methode (FEM)

- komplexe Geometrie möglich durch Approximation mit flexiblen Elementgeometrien
- basiert auf der schwachen Form, löst Gleichgewichtsgleichungen nur im integralen Mittel
- im stationären Fall: nur noch Lösen eines linearen Gleichungssystems (LGS), im nichtstationären Fall: zusätzlich noch Zeitintegration (wie FDM)
- vielfältiger Einsatzbereich, u.a.
 Festkörpermechanik, Dynamik, allgem. Lösung von PDEs, (beschränkt auch Strömungsmechanik)
- praktisch beliebige konstitutive
 Materialgesetze implementierbar!
- viele kommerzielle (ABAQUS, COMSOL, MARC) und freie Programme (feap, deal.ii, libmesh, fenics) erhältlich, sehr weit entwickelt

Nachteile:

- Mathematische Theorie recht komplex
 → Implementierung beliebiger PDEs nichttrivial
- relativ großer Speicher- und Rechenbedarf bei feiner Diskretisierung
- es können leicht Fehler gemacht werden,
 z.B. BCs falsch vorgeschrieben
- entspricht das konstitutive Gesetz nicht dem realen System bekommt man zwar bunte Bilder, die Daten sind aber Mist!
- vor allem kommerzielle Programme verleiten zu "black box Simulationen" (sind aber andererseits bei richtiger Bedienung sehr leistungsfähig!)

