

Modellierung und Simulation: Einführung

Einführung

Computer werden für eine Vielfalt von Aufgaben eingesetzt:

- Ausstellung von Rechnungen
- Bestandskontrollen in der Industrie
- Buchungen
- Übersetzungen
- Überwachung von Produktionsprozessen

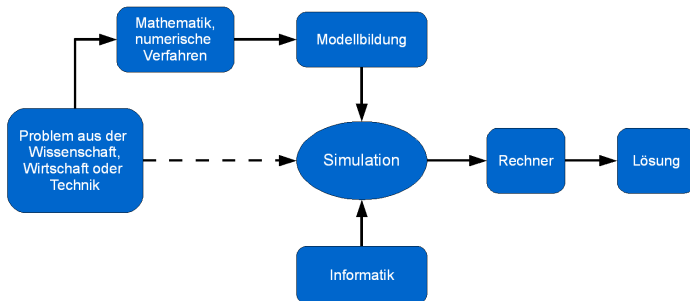
Modellbildung und Simulation

Im Bereich der **Modellierung und Simulation** werden Computer eingesetzt zur Lösung von Problemen aus der Wissenschaft und Technik.

Genauer: Sie stellen Lösungen für mathematische Modelle physikalischer Prozessabläufe bereit. Man spricht von den computerorientierten Ingenieurwissenschaften.

Die **Modellierung und Simulation** verbindet Methoden der Mathematik, insbesondere der numerischen Mathematik mit Methoden der Informatik, um Probleme aus der Technik auf Rechnersystemen zu lösen.

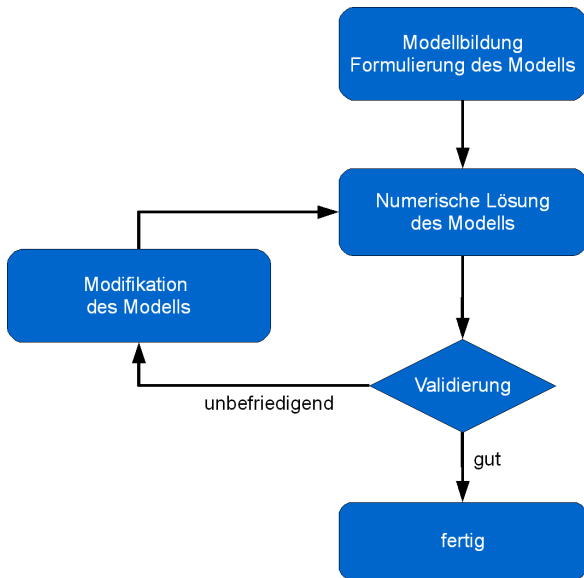
Ablauf: Modellierung und Simulation



Modellbildung

- Formulierung mathematischer Gleichungen für physikalische Gesetze und unter Berücksichtigung relevanter Einflussgrößen
- Entwicklung numerischer Verfahren zur Lösung bzw. zur Approximation der Lösung
- Validierung (Gültigkeitsprüfung)

Ablauf: Modellbildung



Simulation (= Lösung des Modells auf einem Computer)

Wichtige Aspekte:

- Rechnerarchitektur: HPC, PC, ...
- Rundungsfehler (Güte der Approximation):
numerische Stabilität, Konditionierung des Verfahrens,
Genauigkeit
- Diskretisierungsfehler:
Konvergenzfehler, Abschneidefehler
- Effizienz bezüglich Rechenzeit und Speicher:
Optimierung des Algorithmus, moderne numerische
Verfahren, Parallelisierung

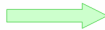
Bewertung des Simulationsprogramms:

Ein gutes Programm zeichnet sich aus durch:

- Zuverlässigkeit (keine bugs)
- Robustheit
- Portierbarkeit
- Wartungsfreundlichkeit
modulare, klare Struktur, coding style, gute
Dokumentation, Testverfahren.

Prozessablauf

Modellbildung



Simulation



Visualisierung und
Datenauswertung

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(L_{00} \nabla \frac{1}{T} + \sum_{j=1}^N L_{0j} \nabla \left(-\frac{\mu_j}{T} \right) \right)$$

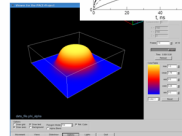
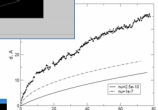
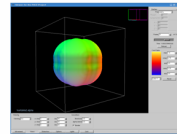
$$\frac{\partial c_i}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(L_{i0} \nabla \frac{1}{T} + \sum_{j=1}^K L_{ij} \nabla \left(-\frac{\mu_j}{T} \right) \right)$$

$$\frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial t} = \varepsilon (\nabla \cdot \alpha \nabla \phi_{\alpha} - a_{\alpha} \phi_{\alpha}) - \frac{1}{\varepsilon} \nabla \phi_{\alpha} - \frac{f_{\phi_{\alpha}}}{T} - \lambda$$

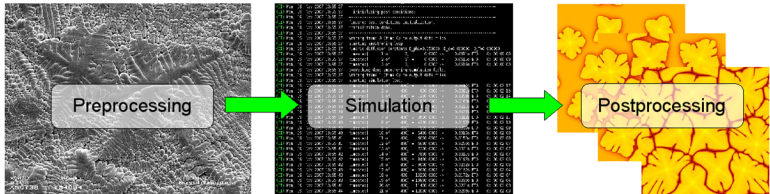
- Festlegung der Systemgrößen
- Prozessdaten
- Initialisierung
- Konfiguration des Gebiets



- Numerische Verfahren
- High Performance Computing
- Parallelrechnen
- moderne Mehrgittermethoden



Pre-, Main- und Postprocessing



- ✗ Konvertierung experimenteller Daten, z.B. Schliffbilder, EBSD
- ✗ Schnittstelle zu atomistischen Simulationen, z.B. MD
- ✗ Ankopplung an thermodynamische Datenbanken

- ✗ parallele Implementierung
- ✗ adaptive und schnelle Algorithmen
- ✗ modulares Softwaredesign
- ✗ flexible Erweiterbarkeit

- ✗ verfügbare Bibliothek mit Auswerte- und Analysemethoden
- ✗ 3D Visualisierung
- ✗ verschiedene graphische Darstellungen