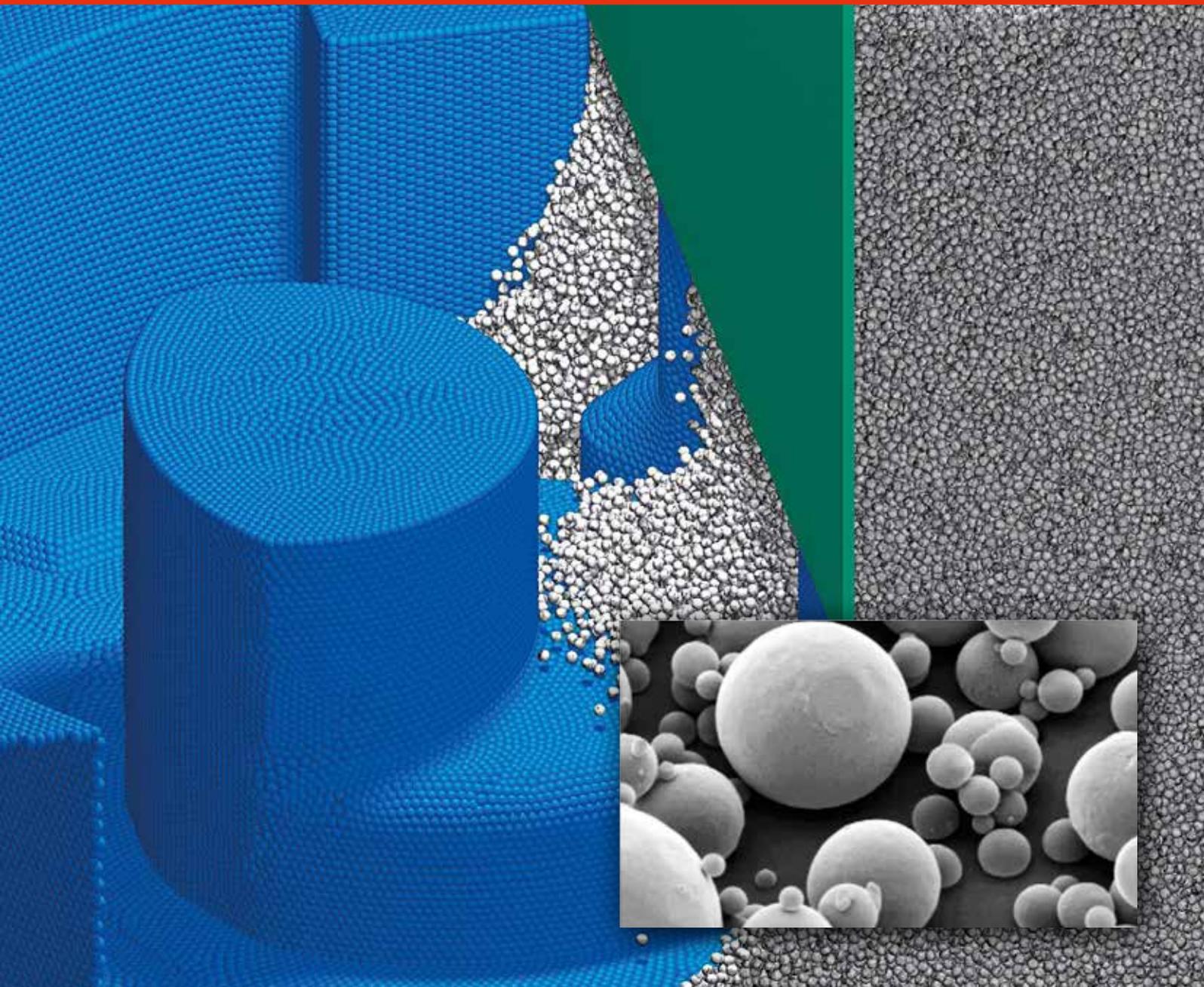
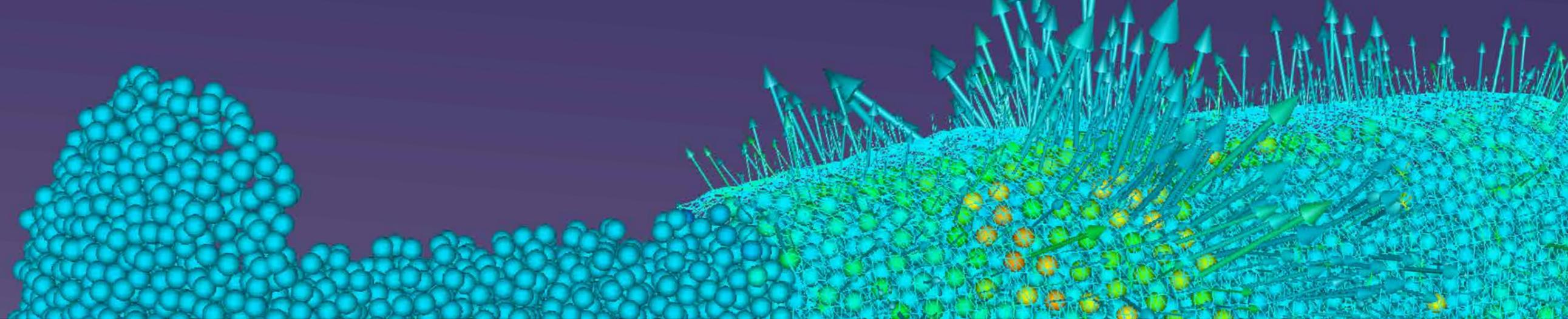


# **PARTIKELSIMULATIONEN UND CO-SIMULATIONEN FÜR GRANULARE MEDIEN UND KOMPLEXE ANWENDUNGEN**





## GRANULARE MEDIEN, KOMPLEXE FLUIDE, PROZESSMODELLIERUNG

Transport und Verarbeitung von Feststoffpartikeln sind grundlegende Prozessschritte in der Verfahrenstechnik. Beispiele sind das Mahlen und Sichten, die Filtration oder die Deposition granularer Produkte.

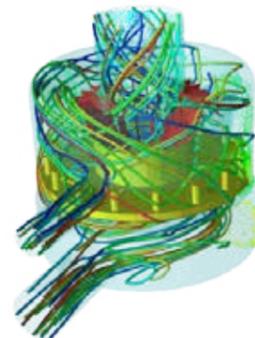
Im Falle von Mehrphasenströmungen mit geringer Feststoffbelastung wird der granulare Feststoff durch das umgebende Fluid getragen. Die Interaktionen innerhalb der partikulären Phase, d.h. zwischen einzelnen Partikeln, ist oft vernachlässigbar.

Bei höherer Feststoffkonzentration, etwa in Folge von Sedimentation, bei Wirbelschichten oder dem Transport von Schlücker, haben die Stöße zwischen Partikeln einen zunehmenden Einfluss auf das Bewegungsverhalten der partikulären Phase.

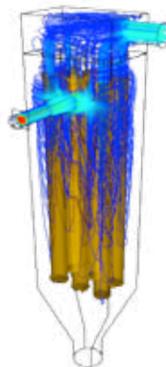
Beim Fließen und Kompaktieren von Pulvern sowie der Bewegung von Erdrich und Schüttgütern wird die umgebende Luft meist durch die Partikel bewegt. Übliche Computational Fluid Dynamics (CFD) Methoden bilden die Physik bei solch hohen Packungsdichten nicht mehr korrekt ab.

Der Modellierung und numerischen Lösung von Problemen mit dominierender Partikel-Partikel-Interaktion widmen sich die beiden Fraunhofer-Institute IWM und SCAI. Basis ist der vom Fraunhofer IWM entwickelte Simulations-Code SimPARTIX®, der die Diskrete Element Methode (DEM) verwendet. Dabei wird die Bewegung einzelner Partikel und deren Interaktion durch physikalisch fundierte Kraftgesetze simuliert. Die primären diskreten Elemente sind Kugeln. Komplexere Partikelformen lassen sich durch starre oder elastische Cluster von Kugeln approximieren.

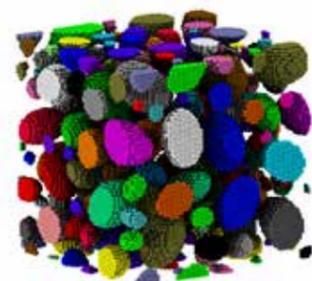
Mit SimPARTIX® ist auch die Beschreibung von Fluidbewegungen basierend auf der Methode der Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH) möglich.



1 Mehrphasenströmung in einer Sichtermühle



2 Mehrphasenströmung in einer Filteranlage



3 Giebschlücker mit nicht-sphärischen Feststoffpartikeln

## CO-SIMULATION – DAS FRAMEWORK

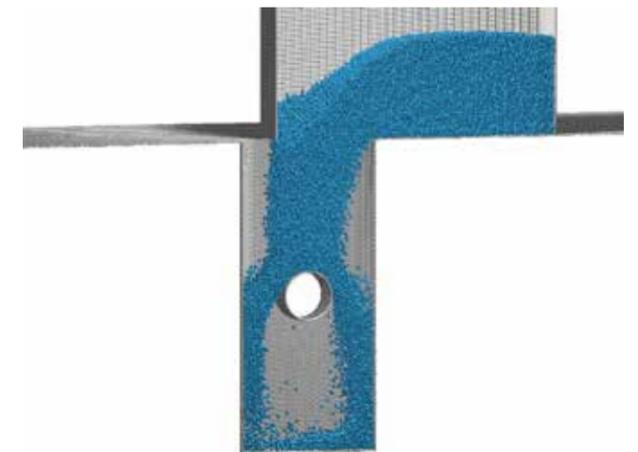
Co-Simulationen zwischen SimPARTIX® und einem strukturmechanischen Code, z.B. einer Finite Elemente Methode (FEM), sind hilfreich zur Beschreibung von Partikel-Struktur-Interaktionen mit großen Dehnungen. Ein Anwendungsfeld ist die Modellierung des Kontakts granularer Materie mit nachgiebigen Körpern. Das Simulationsframework entwickelt Fraunhofer SCAI; es erlaubt die Best-in-Class-Codes miteinander zu verknüpfen.

Die Kopplung findet an der Oberfläche eines Körpers statt, der im Kontakt mit der granularen Materie steht. Der DEM-Code ermittelt die an den Kontakten entstehenden Repulsions-, Adhäsions- und Reibungskräfte. Das FEM-Programm für die Strukturmechanik berechnet die Verschiebungen und Geschwindigkeiten in den Knoten auf Basis der Kraftwirkung. Die Verschiebungen beeinflussen die im Kontakt befindliche granulare Materie, wodurch wiederum Änderungen in den Kräften entstehen.

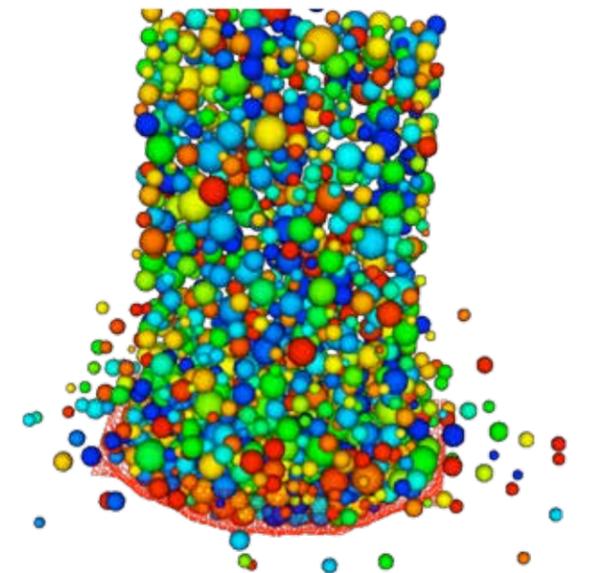
Innerhalb eines Zeitschrittes werden die Teilschritte der zwei beteiligten Codes nacheinander abgearbeitet. Zur Lösung des gekoppelten Systems folgt als letzter Schritt der Abgleich der Randbedingungen.

Die beiden Co-Simulations-Codes kommunizieren nicht direkt miteinander, sondern über einen Service-Prozess. Dieser organisiert und steuert nicht nur den Datenaustausch, sondern sorgt zugleich für das korrekte Mapping der Daten, die auf unterschiedlichen Gittern definiert sein können.

Bei der Kommunikation zwischen den beteiligten Prozessen wird automatisiert das schnellste und effizienteste Kommunikationsverfahren gewählt, also TCP/IP oder Infiniband bei verteilten Systemen, oder der gemeinsame Speicher, falls die Prozesse auf einem Multi-Core Host laufen. Der zusätzliche Aufwand für Kommunikation mit eventueller Wartezeit beträgt nur ca. 25 Prozent.



4 Füllen eines Schüttguts



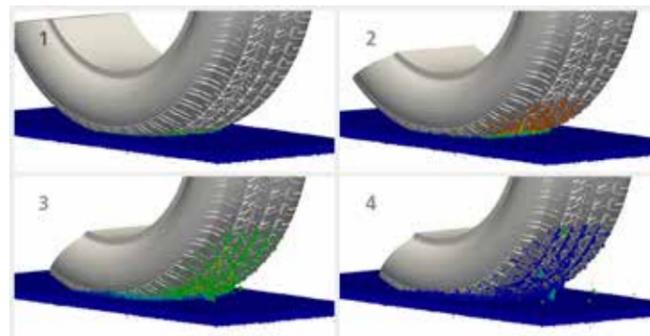
5 Partikel fallen auf eine elastische Membran.



## DEM MIT STRUKTUREN

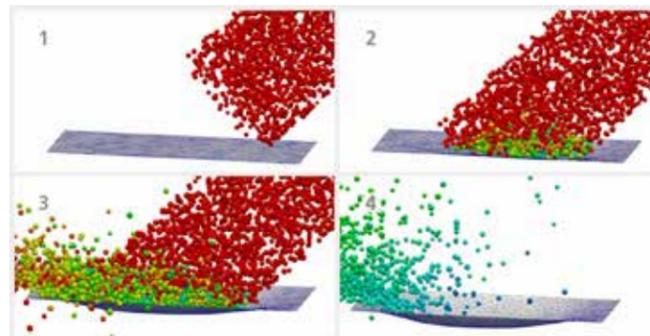
### Reifentraction

Die zwischen den DEM-Partikeln wirkenden Kräfte folgen parametrisierbaren Gesetzen. So lassen sich verschiedene Untergründe von Sand über Matsch bis hin zu Schnee abbilden, wie im rechts gezeigten Fall eines drehenden Reifens auf einem Untergrund mit starker Kohäsion. Etwa 300.000 Partikel wurden dabei verwendet. Infolge der starken Kohäsion haften Teile des Untergrundes am Reifenprofil.



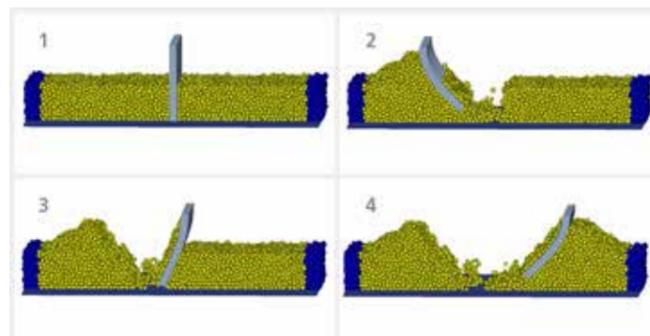
### Kugelstrahlen

Ein Blech wird mit DEM-Partikeln beschossen. Der Impuls beim Auftreffen der Kugeln führt zu einer bleibenden plastischen Deformation des Bleches. Die Kopplung erfolgt an der Blechoberfläche. Der strukturmechanische Code verfügt über Methoden zur Beschreibung plastischen Materialverhaltens.



### Gummielastischer Wischer

Ein Behälter (blau) ist mit kohäsiven DEM-Partikeln (gelb) befüllt. Ein elastisches Wischerblatt trennt zunächst das Behälter in zwei Teile. Infolge der periodischen Bewegung des Blatts verliert es den Kontakt mit dem Boden des Behältnisses. Die Partikel werden in zwei Haufwerke getrennt.

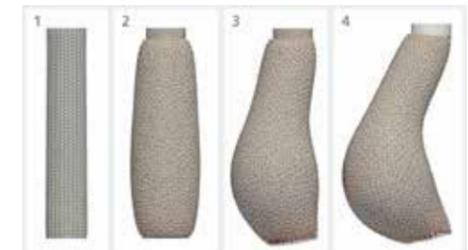


## SPH MIT STRUKTUREN

Die klassische CFD mit gitterbasierten Verfahren stößt an ihre Grenzen, wenn zum einen starke Änderungen des Strömungsraumes oder zum anderen topologische Änderungen des Gitters auftreten. Ein typischer Anwendungsfall aus der Praxis ist das Öffnen und Schließen von Ventilen. Der Wechsel von einem noch gerade geöffneten zum vollständig geschlossenen Ventil bedeutet nicht nur eine topologische Singularität, sondern auch den schlagartigen Stopp des Volumenstromes. Mit der netzfreien Smoothed Particle Hydrodynamics (SPH)-Methode entfallen solche Einschränkungen.

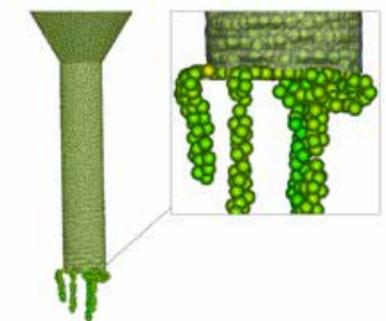
### Nichtlinearitäten und geometrische Änderungen

Ein Fluid wird mit Druck in einen undurchlässigen Schlauch aus hyperelastischem Material gepresst, dessen unteres Ende mit einem starren Deckel verschlossen ist. Der Schlauch dehnt sich zunächst symmetrisch aus, um letztendlich zu knicken, womit das System in einen Zustand niedrigerer Energie wechselt.



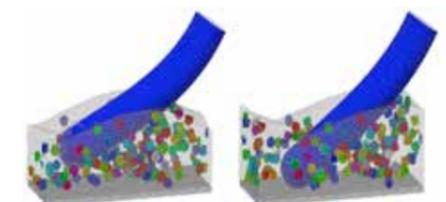
### Topologische Änderungen

Eine Paste strömt in eine schlauchförmige, undurchlässige Membran aus elastischem Material, an deren unterem Ende sich ein starrer Deckel raumfest befindet. Der Schlauch ist hierbei nicht fest mit dem Deckel verbunden. Während der Befüllung des Schlauches öffnet sich am unteren Ende ein Spalt, durch welchen die in Form von SPH-Partikeln dargestellte Paste schließlich ausfließen kann.



### SPH, DEM und elastische Strukturen

Das elastische Filament einer Zahnbürste (blau) ist eingebettet in eine Zahnpasta, die aus einem Trägermedium (SPH-Partikel) und beigemischten Abrasivpartikeln (Cluster aus DEM-Partikeln) besteht. Abhängig von der Steifigkeit des Filamentes kann das Ende des Filamentes bei einer horizontalen Bewegung mit der Oberfläche eines Zahnes in Kontakt kommen (rechts) oder bei weichem Material daran gehindert werden (links).





## PLASTIZITÄT UND DUKTILES MATERIALVERSAGEN

Die Simulation von Prozessen, bei denen sowohl große Deformationen als auch hohe Dehnraten auftreten, stellt hohe Anforderungen an die Modellierung. Zuverlässige numerische Simulationen tragen jedoch essentiell zum tieferen Verständnis der werkstoffmechanischen Vorgänge bei und ermöglichen eine Prozessoptimierung. Durch die Modellierung der plastischen Verformung und des duktilen Bruchverhaltens können beispielsweise Abtragsraten in der Materialbearbeitung vorhergesagt werden.

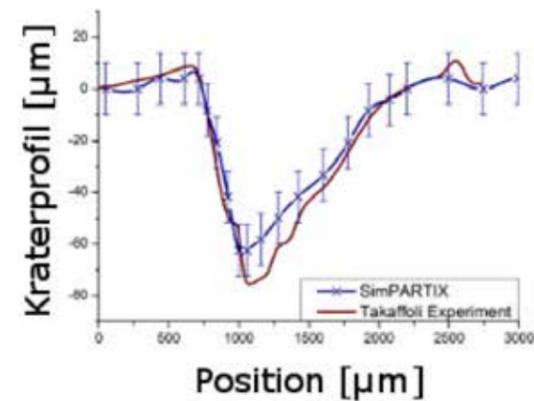
Der Vorteil der partikelbasierten Methodik liegt hier in der netzfreien Herangehensweise. Damit können große plastische Deformationen und Fragmentierung auf natürliche Art und Weise simuliert werden. Die Verformung

oder Rissausbildung wird nicht durch die Wahl eines Rechengitters beeinflusst.

Für die Simulation von duktilen Schädigungsvorgängen müssen die hervorgerufenen plastischen Deformationen sowie das Versagen des Materials durch das verwendete numerische Modell detailgetreu wiedergegeben werden. Unter Verwendung eines Plastizitätsmodells für die Fließgrenze werden in SimPARTIX® die im Werkstoff auftretenden, plastischen Verformungen berücksichtigt. Für das Versagen des Materials wird ein Versagenskriterium verwendet, das den Bruch des Materials bei einer kritischen plastischen Dehnung unter dynamischer Belastung voraussagt.



1 Simulation eines starren Korns (rot), das auf ein Aluminium-Werkstück (blau) trifft. Hierbei wird das Werkstück plastisch verformt und es kommt zur Abtrennung eines Chips aufgrund von duktilem Materialversagen.



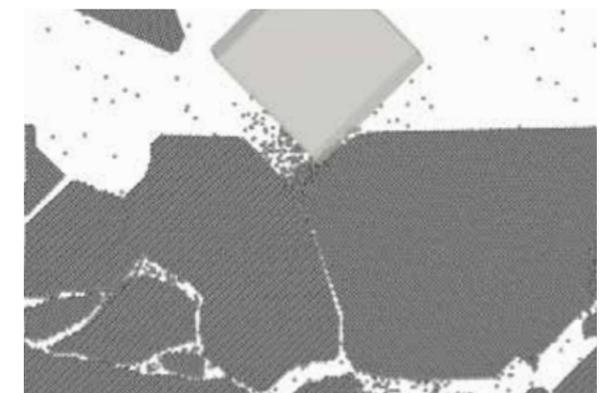
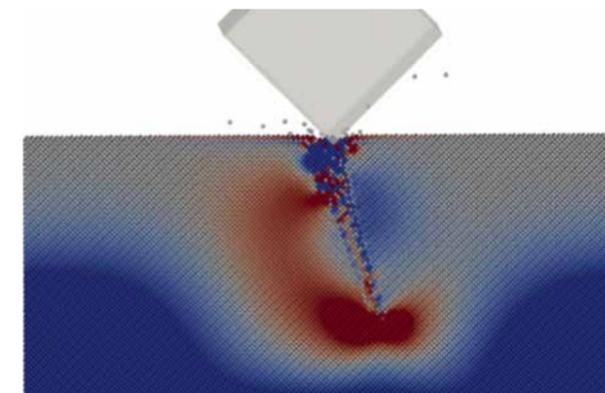
2 Der Vergleich von Simulation und Experiment (Takaffoli et al., Wear, 274–275:50–59, 2012) verdeutlicht die quantitative Aussagefähigkeit der Modellierung.

## SPRÖDE WERKSTOFFE

Keramische Werkstoffe oder Gläser zeigen typischerweise ein sprödes Bruchverhalten. Unter Zugbelastung verhält sich das Material zunächst elastisch bis es plötzlich zum Bruch und einem damit verbundenen sofortigen Abfall der auftretenden Spannung kommt. Die Bruchfläche ist bei kristallinen Werkstoffen oftmals entlang einer Kristallebene orientiert und dadurch atomar glatt.

Quantitativ kann die Bruchzähigkeit eines Materials durch den kritischen Spannungsintensitätsfaktor beschrieben werden. Diese Größe bildet eine obere Schranke für die Intensität des Spannungsfelds nahe der Risspitze. Beim Überschreiten der Schranke kommt es zum Sprödbbruch im Werkstoff.

In SimPARTIX® wird Sprödbbruch im Rahmen der Peridynamics-Theorie beschrieben. Dies ist eine nicht-lokale Erweiterung der klassischen Kontinuumsmechanik. Die mathematische Struktur der Peridynamics-Theorie eignet sich sehr gut für die Abbildung durch partikelbasierte Simulationen. Dabei repräsentieren die einzelnen Partikel endliche Volumina des Werkstoffs. Die Partikel sind durch Kraftbrücken verbunden, deren Steifigkeit ein Maß für die Kompressibilität des Materials ist. Die Bruchzähigkeit wird durch eine kritische Dehnung der Kraftbrücken beschrieben. Sobald diese Dehnung überschritten ist, wird die Kraftbrücke aufgelöst.



Die Abbildung zeigt die Simulation eines Eindruckversuchs mit einem Silizium-Kristall. Links sind die Zugspannungen (rot) und Druckspannungen (blau) im Kristall dargestellt. Rechts ist das sich ergebende Bruchbild nach dem Versagen des Kristalls unter der Last des Indenters gezeigt.

# ANSPRECHPARTNER

## Dr.-Ing. Carsten Dehning

Fraunhofer-Institut für Algorithmen  
und Wissenschaftliches Rechnen SCAI  
Schloss Birlinghoven  
53757 Sankt Augustin

Telefon: 02241 14-2767

Fax: 02241 14-1368

carsten.dehning@scai.fraunhofer.de

www.scai.fraunhofer.de

## Dr. rer. nat. Claas Bierwisch

Fraunhofer-Institut für Werkstoffmechanik  
IWM  
Wöhlerstr. 11  
79108 Freiburg

Telefon: 0761 5142-347

Fax: 0761 5142-510

claas.bierwisch@iwm.fraunhofer.de

www.iwm.fraunhofer.de

www.simpartix.de

## Co-Simulationen mit Partikelcodes

Sie profitieren von unserem Know-how im Bereich Co-Simulation bei zahlreichen Problemen aus der Multiphysik. Wir unterstützen Sie in allen Fragen der numerischen Simulation, der Modellierung und der softwaretechnischen Realisierung.

## Anbindung von Inhouse-Codes

Sie bevorzugen ihren eigenen FEM- oder DEM-Code und möchten mit beiden eine Co-Simulation durchführen? Unsere Erfahrung garantiert Ihnen die sichere und schnelle Anbindung ihres Codes an das Co-Simulations-Framework.

## Prozesssimulation

Mit partikelbasierten Simulationen helfen wir Ihnen dabei, Ihre Anwendungen gezielt zu optimieren. Dabei profitieren Sie von unserer langjährigen Expertise im Bereich der numerischen Simulation granularer Werkstoffe und komplexer Flüssigkeiten.

## Prozessanalyse

Sie erhalten detaillierte Einblicke in das Materialverhalten während der gesamten Prozessführung. Durch die Visualisierung werden Beziehungen zwischen Prozessparametern und resultierenden Eigenschaften klar erkennbar.

## Prozessoptimierung in den Bereichen

- Pulvertechnologie: Sprühtrocknen, Fluidisierung, Matrizenfüllen, Pressen, Foliengießen, Trocknen, Sintern, Additive Fertigung
- Turbomaschinen: Oberflächenbearbeitung
- Schüttgutförderung: Verschleißminimierung
- Photovoltaik: Drahtsägen von Siliziumwafern
- Mikroelektronik: Siebdruck von Schaltungsträgern
- Automotive: Magnetorheologische Kupplungen
- Zahnpflege: Reinigungsleistung von Zahnpasta

## Modellierung des Werkstoffverhaltens von

- Pulver, Gestein, Sand
- Pasten, Schlickern, Suspensionen, Gelen

## Bildquellen:

Seite 5: MEV-Verlag

Seite 6: C. Dehning

Seite 7: MEV-Verlag

Alle anderen Abbildungen:

© Fraunhofer IWM, Fraunhofer SCAI