

DHCAE Tools GmbH

Gekoppelte Strömungs-, Wärmetransport und strukturmechanische Simulation bei der Wärmebehandlung von Titanbauteilen

Schlussbericht Simulationsteil des SimTiPro-Projekt-Förderkennzei-
chen 03LB1007B

Ulrich Heck, Ralf Paßmann, Martin Becker

23.10.2023

Inhalt

Kurzdarstellung.....	2
1 Aufgabenstellung.....	2
2. Vorhabenvoraussetzungen.....	2
3. Planung und Ablauf des Vorhabens	2
4. Wissenschaftlicher und technischer Stand	2
5. Zusammenarbeit mit anderen Stellen.....	3
Detaillierte Darstellung	4
Verwendung der Zuwendung und der erzielten Ergebnisse im Einzelnen	4
Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises	14
Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit.....	14
Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere der Verwertbarkeit des Ergebnisses im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans.....	15
Fortschritts auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen	15
Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse.....	15
Literatur.....	16

Kurzdarstellung

1 Aufgabenstellung

Im Projekt wurde ein digitales Abbild des Wärmebehandlungsprozesses von Titanbauteilen mittels Simulationstechnik erstellt, um Einflüsse auf dem Wärmetransport zu identifizieren, optimierte Ansätze zur Wärmebehandlung am Rechner zu entwickeln und dabei den gesamtheitlichen Prozess zwischen Wärmetransport und Strukturdeformation berücksichtigt. Die Digitalisierung der Produktentwicklung von Titanbauteilen durch Simulation ist um einen automatisierten Workflow erweitert worden. Ziel war es, die Strömungs- und Struktursimulation zu koppeln und für den Einsatz in der Produktentwicklung zur Verzugsvorhersage zu qualifizieren.

2. Vorhabenvoraussetzungen

Im Bereich der Simulation sind die beiden Methoden der strukturmechanischen Berechnungen (CSM, Computational Structure Mechanics) einerseits und der Strömungssimulationen (CFD, Computational Fluid Mechanics) andererseits vergleichsweise weit entwickelt, so dass diese beiden Verfahren getrennt voneinander bereits weitgehend Einzug in die Produktentwicklung gehalten haben. Im Bereich der so genannten multiphysikalischen Anwendungen (d.h. in diesem Fall der Kombination CFD/CSM-Analyse) ist dieser Stand der Verallgemeinerung wie in den Einzeldisziplinen noch nicht erreicht. Ein Grund hierfür sind die speziellen Löser und Lösungsverfahren, die sich in der Strukturmechanik und der Strömungsmechanik deutlich unterscheiden. Hinzu kommt, dass multiphysikalische Anwendungen erhöhte Anforderungen an die Rechenleistung stellen und aufgrund der gestiegenen Modellkomplexität eine detaillierte Überprüfung und ggf. Modellanpassung erforderlich ist. Gerade bei rechenintensiven zeitabhängigen Prozessen wie in diesem Projekt ist es daher häufig notwendig, individuelle und auf den Anwendungsfall optimierte Lösungen zu erstellen und diese intensiv zu validieren.

3. Planung und Ablauf des Vorhabens

Das Projekt wurde in enger Zusammenarbeit mit dem Projektpartner Otto Fuchs durchgeführt. DHCAE hat dabei weitgehend die numerische Modellierung in der CFD und die automatisierte Umsetzung erarbeitet, während Otto Fuchs die Experimente durchführte und die Simulationsmethoden anwandte.

Aus der Aufgabenstellung ergab sich folgender Ablauf:

In der ersten Phase wurden von Otto Fuchs in Abstimmung mit DHCAE Tools Experimente zum Abkühlverhalten von Titanbauteilen durchgeführt, die von DHCAE Tools numerisch nachgebildet wurden.

Anschließend wurden die Anforderungen an einen automatisierten Workflow mit Otto Fuchs besprochen und von DHCAE Tools umgesetzt.

Die Mitarbeiter von Otto Fuchs wurden in der Anwendung der Simulationsmethoden geschult und in der Implementierungs- und Optimierungsphase von DHCAE Tools unterstützt.

4. Wissenschaftlicher und technischer Stand

Strömungssimulationen mit Wärmetransportanalysen, an denen auch Festkörper beteiligt sind, sogenannte konjugierte Wärmetransportanalysen, werden in einem breiten Spektrum von technischen Anwendungen eingesetzt. Im Rahmen dieses Projektes der Wärmebehandlung ist zusätzlich die Strukturdeformation zu berücksichtigen. Im Bereich der Wärmebehandlung von metallischen Werkstoffen sind hier z.B. die Arbeiten zum Abschrecken von Bauteilen durch gezieltes Anströmen mit Luft zu nennen, um die Härte einer Stahlprobe gezielt beeinflussen zu können. Erste Arbeiten im Bereich der CFD-Simulationen hierzu erfolgten am IWT, Bremen unter Beteiligung des Antragsstellers in den

90er Jahren [Gon98]. Zunehmende Rechnerkapazitäten und verbesserte Modellierungsmethoden ermöglichen es seitdem, sowohl komplexere Wärmetransportvorgänge als auch detailreichere Proben- und Anström-Geometrien abzubilden. In den Folgearbeiten wurden z.B. auch die Wechselwirkungen der Strömung mit der Abkühlung der Festkörper (konjugierter Wärmetransport) bei deutlich komplexeren Geometrien betrachtet [Buc15]. In anderen Arbeitsgruppen werden auch Mehrphasensimulationen in der Wärmebehandlung eingesetzt, wie z.B. beim Flüssigkeitsabschrecken von Bauteilen unter Berücksichtigung von Siedeprozessen [Sri12]. Diese Simulationen erfolgen auch unter Berücksichtigung der Wärmeverteilung im Festkörper als konjugierte Strömungs-Wärmetransportanalyse, allerdings ohne direkte Kopplung zu strukturmechanischen Berechnungen zur Beurteilung der resultierenden Spannungen im Bauteil.

Auch kann mit diesem Projekt an Vorarbeiten und anderen Kundenprojekten von DHCAE Tools angeknüpft werden: DHCAE arbeitet schwerpunktmäßig im Bereich der CFD-Modellierung und der CFD-Integration beim Endanwender. Dabei wird vorrangig der Open-Source-Solver OpenFOAM eingesetzt, der sich durch die Verfügbarkeit des Quellcodes und der Programmierstruktur sehr gut für individuelle Anpassungen eignet [Ope23]. Insbesondere im Bereich der Wärmebehandlung hat DHCAE Tools bereits zahlreiche Kundenprojekte erfolgreich durchgeführt. Dazu gehörte auch die Erstellung von Abkühlzeitmodellen in der Aluminiumherstellung.

Im Bereich der Prozessintegration verfügt DHCAE über ein umfangreiches Portfolio an Integrationswerkzeugen für industrielle Endanwender. Dazu gehören GUI-basierte Vernetzungs- und Monitoringsysteme sowie automatisierte Auswerteverfahren. Diese Werkzeuge konnten teilweise in den angestrebten automatisierten Workflow der Prozesskette integriert werden. Insbesondere das Monitoringtool für Simulationsabläufe konnte im Rahmen des Projektes erweitert und dem Endanwender für die Aufgabenstellung zur Verfügung gestellt werden.

Weitere wichtige Funktionalitäten sind Austauschtools zwischen strömungsmechanischen und strukturmechanischen Lösern zur Einwegkopplung. Hier nutzt DHCAE Tools bisher den Open-Source Solver CalculiX als Strukturlöser. Dabei werden Temperaturen aus der CFD-Analyse an die strukturmechanische Analyse übergeben, um thermische Spannungen zu berechnen. Diese Methoden der DHCAE Tools konnten erweitert werden, um auch eine transiente Berechnung automatisiert durchführen zu können. Die Tools wurden auch angepasst, um diese Mapping-Funktionalität in der Kombination von OpenFOAM und Abaqus zu nutzen. In der Strukturanalyse wurde der kommerzielle Solver Abaqus in dem Vorhaben eingesetzt, um insbesondere die Kriechvorgänge zuverlässig abzubilden [Das19]. In der Finite Element Simulation des Kriechens von Titan wird vorwiegend das Potenzgesetz verwendet, z.B. in [Den14]. Es finden sich aber ebenso Beispiele zur Verwendung eigens entwickelter Materialgesetze, indem Benutzer-Unterprogramme (User Subroutines) in die Simulation eingebunden werden [Har14]. In diesen Arbeiten wird sich aber nicht auf die hier eingesetzte Werkstofflegierung bezogen und es wird ein Temperaturbereich bis 700°C betrachtet.

5. Zusammenarbeit mit anderen Stellen.

Eine Zusammenarbeit, insbesondere zur Diskussion von Modellierungsansätzen und -ergebnissen, fand auch mit dem IWT Bremen, vertreten durch Dr. Thomas Lübben, statt.

Im Bereich der strukturmechanischen Modellierung konnte von DHCAE Tools eine Zusammenarbeit mit Prof. Kraska, Brandenburg, initiiert werden. Hier wurde im Rahmen einer Masterarbeit die Eignung des Open Source Solvers CalculiX für Kriechvorgänge untersucht.

Detaillierte Darstellung

Verwendung der Zuwendung und der erzielten Ergebnisse im Einzelnen

Zuwendungen für Personal: Den höchsten Anteil der eingesetzten Mittel wurde für Personalaufwendungen verwendet.

Diese sind im Wesentlichen zur Durchführung der Aufgaben im Bereich der Strukturmechanik und der Strömungssimulation eingesetzt worden.

Folgende Ziele waren gemäß Antragsstellung zu erreichen:

Ziel 1: Aufbau einer geeigneten Strömungssimulation (CFD) zur Nachbildung der relevanten Umgebungseinflüsse bei der Wärmebehandlung von Titan-Strukturauteilen.

Um dieses Ziel zu erreichen, musste im ersten Schritt die vom Projektpartner zur Verfügung gestellte Geometrie aufbereitet werden. Die Geometriekomponenten bestehen aus mehreren Teilen, wie z.B. dem eigentlichen Bauteil, den Stützen und dem Rost. Für die Strömungssimulation musste eine geeignete Vernetzungsmethodik entwickelt werden, um sowohl die Körper als auch die umgebende Luft abzubilden. Im Rahmen der Modellierung wurde ein vergleichsweise hoher Aufwand in die Überprüfung des Einflusses von Spalten, insbesondere zwischen den Stützen und dem Bauteil, investiert. Hier ergeben sich Schwierigkeiten in der Simulation, da Spalte im Bereich der Bauteilauflage in der Regel auf eine fehlerhafte CAD-Darstellung zurückzuführen sind, aber durch Behinderung der Wärmeleitung die Ergebnisse verfälschen können. Auch erzeugen solche engen Spalte bei der Vernetzung des Strömungsraums ein schlechtes Gitter, da die Zellen in diesen Spalten meist stark deformiert sind. Dies führt bei der Simulation zu schlechter Konvergenz oder Absturz des Lösers. Die Einflussfaktoren wurden an den verschiedenen CAD Modellen, für die Versuche an realen Bauteilen durchgeführt wurden, untersucht und mit dem Projektpartner diskutiert.

Im nächsten Schritt ist es notwendig, den so ermittelten Raum effizient zu vernetzen. Dabei waren verschiedene Einflussfaktoren der Vernetzung auf die Ergebnisse zu untersuchen. So war es z.B. für die Modellierung der Bauteilkühlung an ruhender Luft nicht erforderlich, ein aufwendiges Boundary-Layer-Meshing (wandnahe Schichten im numerischen Gitter zur Abbildung von Geschwindigkeits- und Temperaturgradienten) zu verwenden, da hier die Abkühlvorgänge weitgehend durch Strahlungsaustausch dominiert werden. Bei der Modellierung der Abkühlung in der Luftschnellkühlung zeigte sich jedoch, dass ein Boundary-Layer Meshing erforderlich ist. Dies erschwerte sowohl den manuellen Aufbau als auch die spätere Integration dieser Vernetzungsfunktion in den automatisierten Arbeitsablauf. Abbildung 1 zeigt die typische Anordnung der Geometrie mit Bauteil, Stützen und Rost sowie umgebendem Strömungsraum mit Ergebnissen aus der Strömungssimulation (Geschwindigkeitsvektoren).

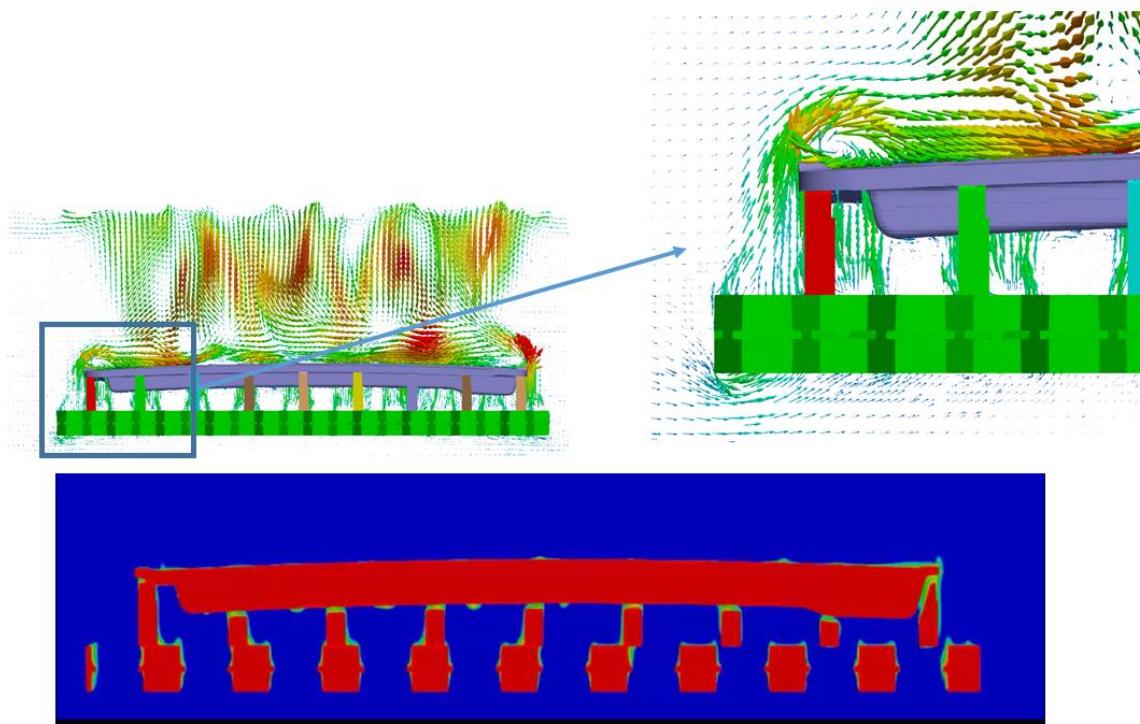


Abbildung 1: Erstellung des Strömungsraums für die gekoppelte konjugierte Wärmetransportanalyse. Dargestellt: Geschwindigkeitsvektoren im Gas, Temperaturkonturen im Bauteil und im Gas (unteres Bild).

Als unerwartete Schwierigkeit bei der Nachbildung der Temperaturverläufe aus dem Experiment erwies sich jedoch die Berücksichtigung der thermischen Effekte von Gefügeumwandlungsprozessen während der Wärmebehandlung von Titanbauteilen. Im Temperaturbereich zwischen 800°C und 950°C wurden in den experimentellen Abkühlverläufen Steigungsänderungen in den Abkühlraten beobachtet, die auf eine Freisetzung von Umwandlungsenergie zurückzuführen sind. Hier wurde in Abstimmung mit dem Projekt- partner nach verschiedenen Ansätzen zur Lösung und Umsetzung im CFD-Solver gesucht. Ein vielversprechender Ansatz scheint die Berücksichtigung dieser Effekte in den Wärme- kapazitätswerten (cp) zu sein. Dies ist ein gängiges Verfahren in der Simulation, um Umwandlungsenthalpien zu berücksichtigen. Für diese Umsetzung musste der CFD-Solver um verschiedene Funktionen erweitert werden (Berücksichtigung einer Umwandlungsenthalpie in Festkörpern, Verwendung von Listen in den Materialdaten). Ein genauer Ab- gleich der cp -Werte erfolgte durch vom Projektpartner initiierte Messreihen an speziell dafür vorgesehenen Proben bei vergleichbaren Abkühlgeschwindigkeiten wie in der Wärmebehandlung.

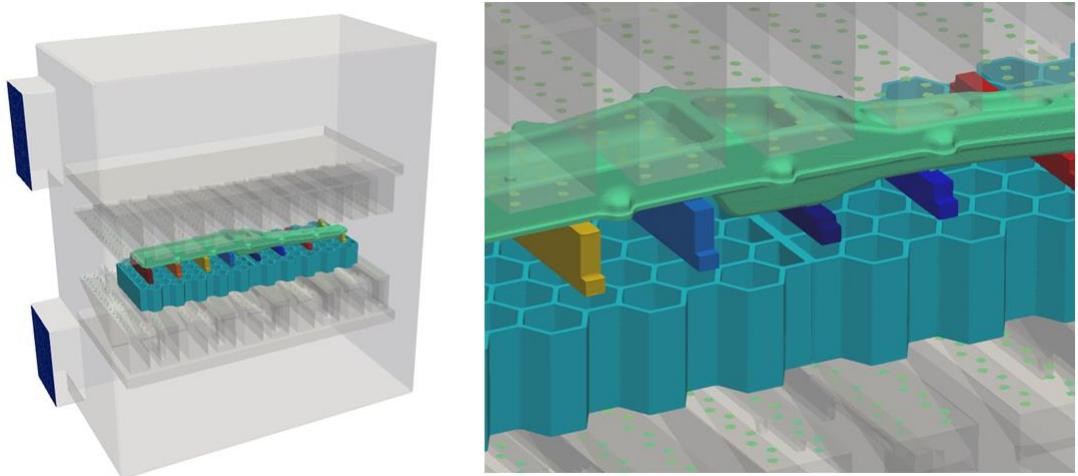


Abbildung 2: Erstellung des Strömungsraums für die Luftschnellkühlung bei vorgegebener Kammer, Düsenfeld und Auflagemöglichkeiten.

Die Umsetzung der Luftschnellkühlung verursachte gegenüber der Planung ebenfalls einen erhöhten Aufwand: Neben der oben beschriebenen aufwändigeren Vernetzung unterscheidet sich die Luftschnellkühlung wesentlich vom Abkühlvorgang an ruhender Luft, da hier ein zusätzlicher Luftstrom aus Düsen auf das abzukühlende Bauteil aufgebracht wird, Abbildung 2. Dadurch verschiebt sich der Wärmetransportmechanismus von Strahlung zu Konvektion. Aufgrund der hohen Ausblasgeschwindigkeiten müsste die Zeitschrittweite in der transienten Simulation im Falle der Lösungen aller Gleichungen jedoch deutlich reduziert werden. Dies würde zu sehr langen Berechnungszeiten von mehreren Wochen auf einer typischen Workstationarchitektur führen und ist nicht praktikabel. Aus diesem Grund muss ein anderer Berechnungsansatz für die Abkühlung verwendet werden: Da die Strömungsgeschwindigkeiten der Ausblasung während der Abkühlung konstant sind, kann hier ein sogenannter „Frozen Flow“-Ansatz gewählt werden, d.h. in einem ersten Schritt wird nur das Strömungsfeld einmalig berechnet und in diesem als stationär betrachteten Strömungsfeld die instationäre Energiegleichung (Temperaturen) während der Abkühlung berechnet, s. Abbildung 3.

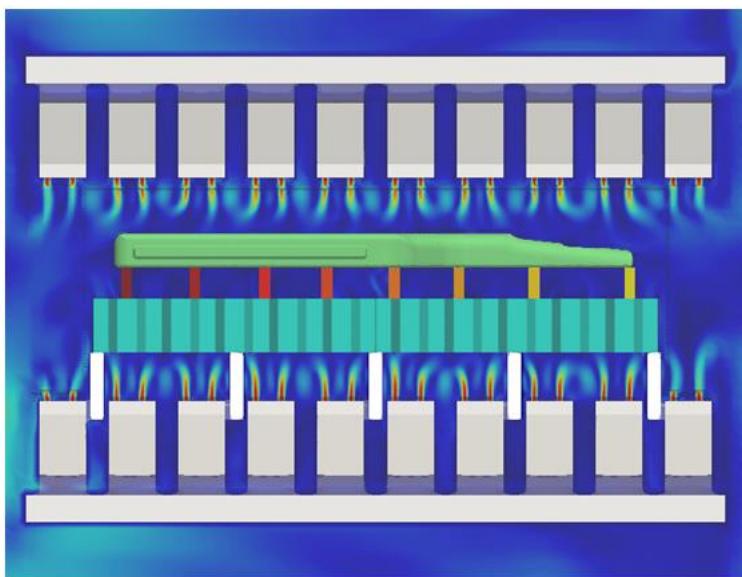


Abbildung 3: Gasstrahlen aus dem Düsenfeld bei der Luftschnellkühlung.

Hinsichtlich der Genauigkeit der zu ermittelnden Temperaturverläufe im Vergleich zum Experiment konnten die Zielvorgaben erreicht werden, s. Abbildung 4 und Abbildung 5.

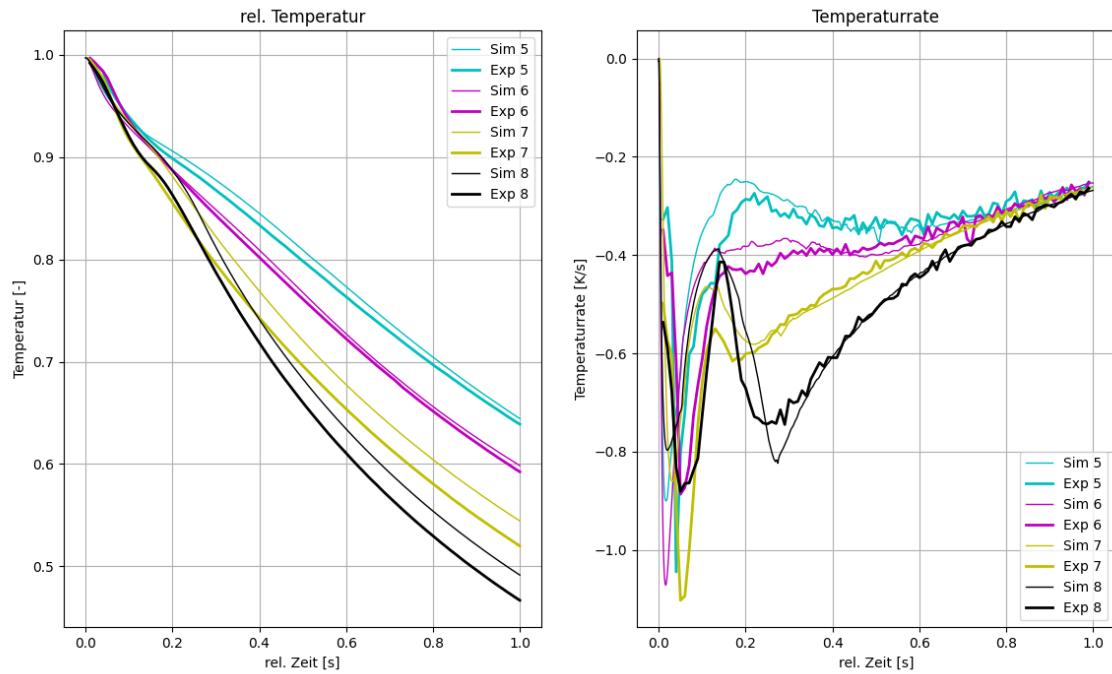


Abbildung 4: Dimensionslose Temperaturverläufe, Vergleich Simulation/Experiment für Abkühlung an ruhender Luft.

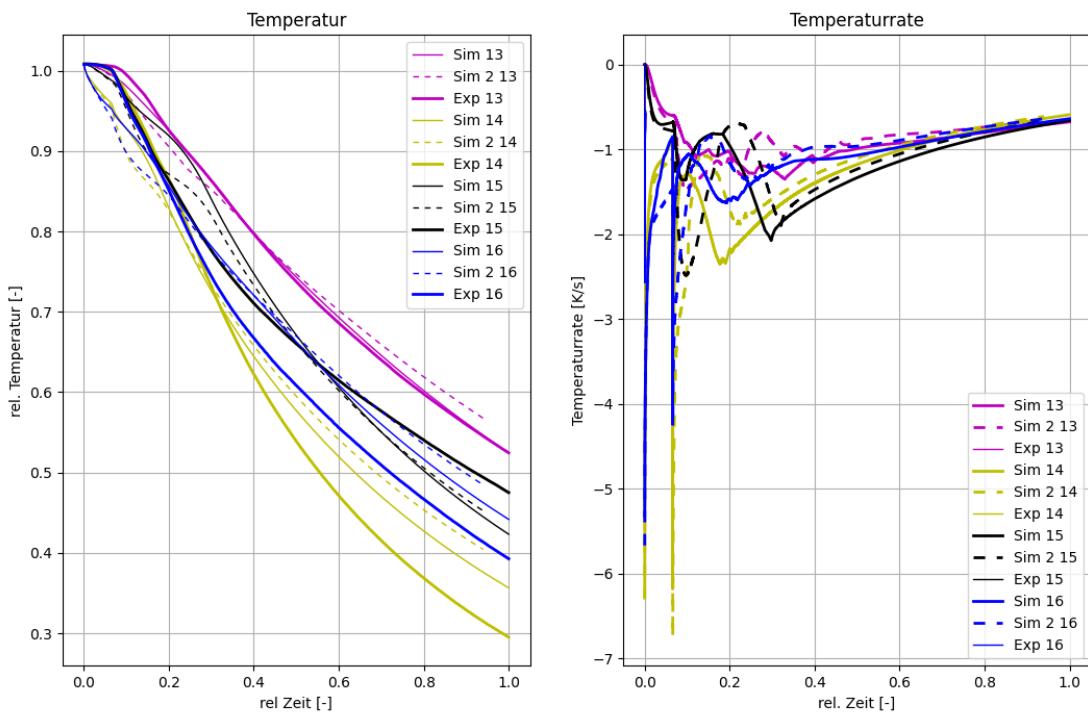


Abbildung 5: Dimensionslose Temperaturverläufe, Vergleich Simulation/Experiment für Abkühlung in der Luftschnellkühlkammer.

Ziel 2: Kopplung der Struktursimulation, die das elastisch-plastische Verformungsverfahren des Bauteils unter Berücksichtigung der Kriechverformung abbildet, mit der Strömungssimulation, die die thermischen Einflüsse während der Wärmebehandlung möglichst realitätsgerecht wiedergibt.

Von Seiten der CFD wird ein Temperaturfeld des Finite-Volumen-Netzes zu verschiedenen Zeitpunkten über ein Mapping an das Finite-Element-Netz der strukturmechanischen Berechnungen übergeben, s. beispielhaft eine Temperaturverteilung in Abbildung 6. Aus diesen Temperaturfeldern werden Temperaturwerte als Funktion der Zeit für jeden Knoten übertragen, s. Abbildung 7. Auch werden die Temperaturraten als Funktion der Zeit für jeden Knoten berechnet und ermöglichen eine effiziente Bestimmung der Temperaturen während der strukturmechanischen Simulation. Die Speicherung der Temperaturen und Temperaturraten führt zu einer Erhöhung des Speicherbedarfs während der Berechnung, jedoch nur zu einer geringen Erhöhung der Rechenzeit. Das Einlesen der Temperaturen ist zu verschiedenen Lastschritten möglich. Die Datenaufbereitung erfolgt mittels Python-Skripten, die Bereitstellung der Temperaturen in einer FORTRAN-Schnittstelle des verwendeten FE-Systems. Im Bereich der Strukturmodellierung war der Aufwand für die Erstellung und den Test der Ein- und Zweiwegekopplung höher als geplant. Im Bereich der Strömungssimulation war der Aufwand geringer als erwartet, da sich herausstellte, dass eine vollständige iterative Kopplung zwischen Strömung und Struktur nicht erforderlich ist. Dadurch konnten bei der letztendlich umgesetzten Einwegkopplung bereits vorhandene Austauschwerkzeuge von DHCAE an die Problemstellung angepasst werden.

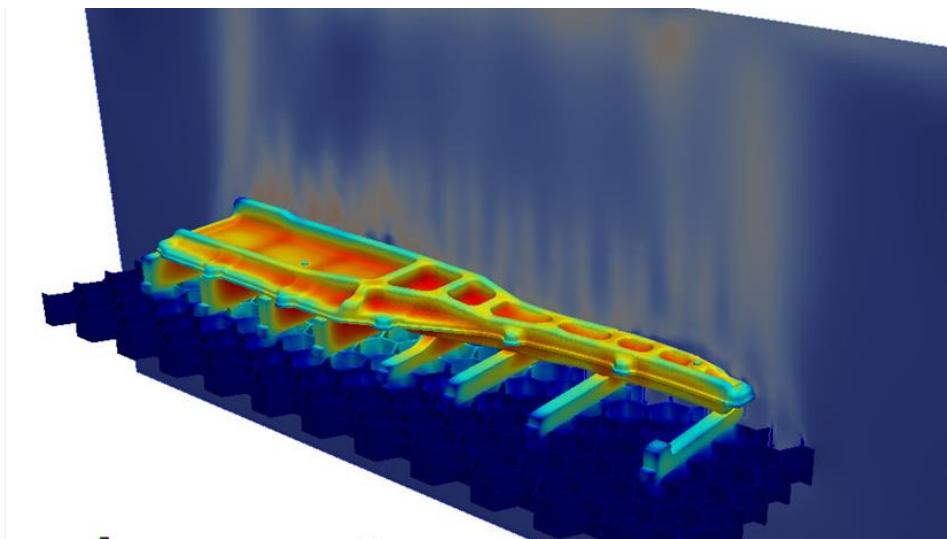


Abbildung 6: Ergebnis der CFD. Temperaturverteilung im Titanbauteil zu verschiedenen Zeiten.

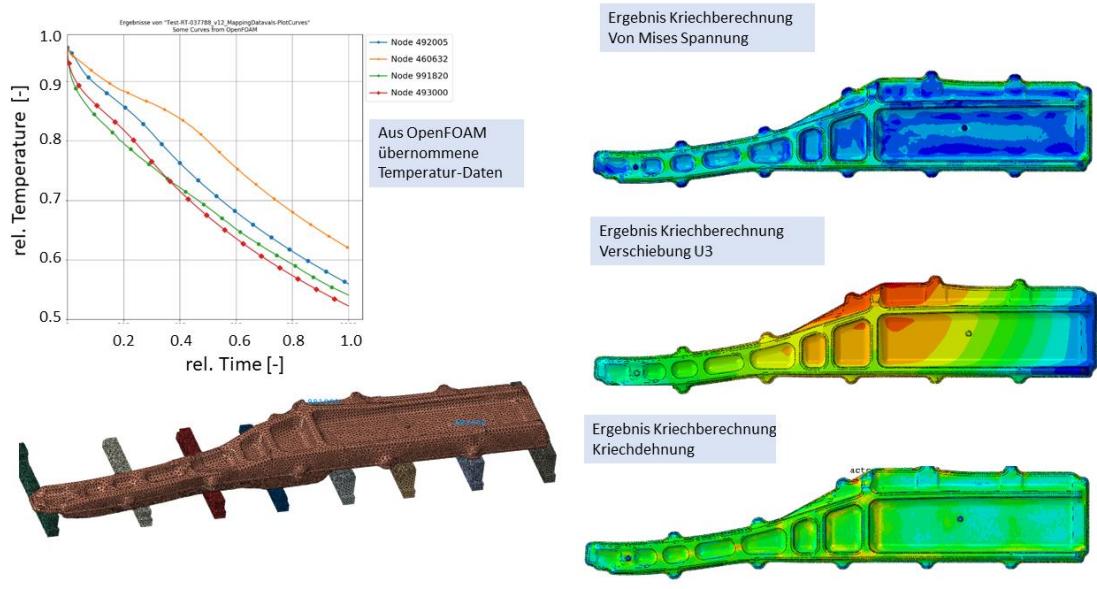


Abbildung 7: Verwendung der Temperaturfelder für die Strukturmechanik (Spannungen und Kriechmodellierung).

Ziel 3: Optimierung der gekoppelten Simulationsmethodik mit Blick auf eine verträgliche Berechnungsdauer für die Serienentwicklung von Titanstrukturbau- teilen.

Im Bereich der CFD-Optimierung konnten die Ziele insbesondere durch die Durchführung der Simulation in praxisrelevanten Zeiten erreicht werden. Hier wurden Optimierungen der Strömungssimulationen für die Abkühlung an ruhender Luft und für den Frozen-Flow-Ansatz in der Luftschnellkühlkammer durchgeführt. Zahlreiche Varianten zur Untersuchung der Zeitschrittweite und Gitterauflösung auf die Ergebnisse wurden hierzu durchgeführt. Gerade durch eine dynamische Anpassung der Zeitschrittweite (kleine Zeitschritte zu Beginn der Simulation und größere Zeitschritte bei bereits erfolgter Abkühlung) kann die Gesamtrechenzeit deutlich reduziert werden. Gleichzeitig ist die Stabilität der Lösung zu kontrollieren, da z.B. größere Zeitschritte zwar zu einer schnelleren Lösung führen, es für einzelne Geometrieanordnungen aber schneller zu einer Instabilität des Lösers und damit Abstürzen kommen kann. Hier ist der Stabilität der Lösung Vorrang im Hinblick auf einer automatisierten Durchführung der Simulationen zu geben. Auch erfordert dies, dass bei einer Optimierung der Simulationsparameter alle Realteilgeometrien mit den neuen Parametern kontrolliert werden müssen und somit diese Optimierung nicht an einem einzelnen Modell durchgeführt werden kann. Die Strömungssimulation für einen Fall kann letztendlich auf einer typischen Workstation-Architektur in 1-2 Tagen durchgeführt werden. Auf einem Cluster könnte die Rechenzeit weiter reduziert werden. Für die Optimierung der CFD konnten diese Aufgaben im vorgesehenen Zeitrahmen der Projektplanung durchgeführt werden.

Eine Optimierung der Rechenzeit der strukturmechanischen Simulation war hinsichtlich der verwendeten FORTRAN-Unterprogramme nicht mehr notwendig, da der sehr geringe Einfluss auf die Rechenzeit bereits im ersten Arbeitspunkt nachgewiesen wurde. Die Rechenzeit wird nun im Wesentlichen durch folgende Faktoren beeinflusst: die Anzahl der verwendeten Elemente zur räumlichen Diskretisierung, die statisch bestimmte Lagerung zu Beginn der Simulation sowie die Abbildung des Gleitens über die Lager. Die benötigte Rechenzeit für die Abbildung des Gleitens hängt im Wesentlichen von der Diskretisierung der Lager und der Probe ab. Daher wurden Vorgaben für eine zeiteffiziente Diskretisierung erarbeitet. Für die statisch bestimmte Lagerung wurde ein Zwischenschritt in der Berechnung eingeführt. Insgesamt konnte der Rechenaufwand reduziert werden.

Ziel 4: Automatisierung der Simulationsmethodik und Integration als digitalen, virtuellen Prozess in die Serienentwicklung von Titanstrukturbaueteilen.

Die Erstellung der automatisierten Berechnungsfälle wurde in enger Abstimmung mit dem Projektpartner umgesetzt. Sie orientiert sich an den Rahmenbedingungen der Rechnerinfrastruktur und den Abläufen von Simulationsaufgaben beim Projektpartner:

- Lösen auf einem Linux-Cluster ohne grafische Ausgabe (Zugriff z.B. über Putty von Windows und Starten des Jobs aus der Konsole)
- Postprocessing unter Windows
- Strukturmechanische Simulation mit Abaqus typischerweise unter Windows

In diese vorhandene Infrastruktur soll der Workflow zur CFD-Berechnung mit OpenFOAM als rechenintensive Anwendung und anschließender Datenübertragung für Abaqus sowie ein Postprocessing der Ergebnisse ebenfalls unter Windows integriert werden.

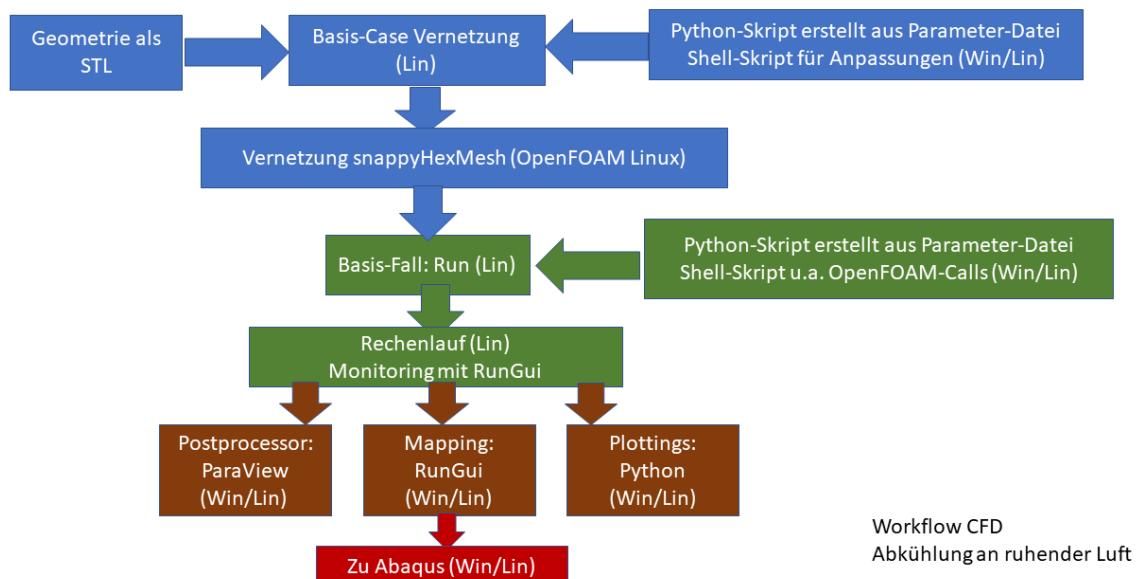


Abbildung 8: Umsetzung der automatischen Modellerstellung für die CFD.

Hierzu wurde der Workflow wie in Abbildung 8 dargestellt umgesetzt: Der Geometrieimport erfolgt in Form eines diskreten Modells (stl). Die fallspezifischen Daten (z.B. Anzahl der Stützen, Positionen, grundlegende Vernetzungseinstellungen) werden in eine Parameterdatei eingetragen. Über ein Python-Skript werden daraus Ablaufskripte und Inputdateien für den Löser erstellt. Im ersten Schritt der Ausführung wird mit dem OpenFOAM Vernetzer snappyHexMesh ein hexaederdominantes Polyedergerüst erzeugt. Ein vordefinierter Basisfall wird mit den individuellen Parametern aus dem Python-Skript angepasst und die eigentliche Simulation kann gestartet werden. Die Simulation erfolgt auf einem Linux-System, während die Daten in ein gemeinsames Verzeichnis geschrieben werden. Das vor Ort verwendete Linux System hat keine grafische Ausgabe, daher wurde dem Partner ein Monitoringsystem zur Kontrolle des Berechnungsfortschritts unter Windows zur Verfügung gestellt. Dazu wurde auf dem Linux System ein Dienst installiert, der den Ablauf des aktuellen Falles überwacht und die Daten für das Monitoring extrahiert, s. Abbildung 9.

Nach Abschluss der Simulation kann das Mapping der Temperaturfelder für Abaqus durchgeführt werden. Dies geschieht ebenfalls mit dem unter Windows bereitgestellten Monitoringtool RunGui. Sollen die Daten anschließend visualisiert werden, kann ParaView unter Windows verwendet werden.

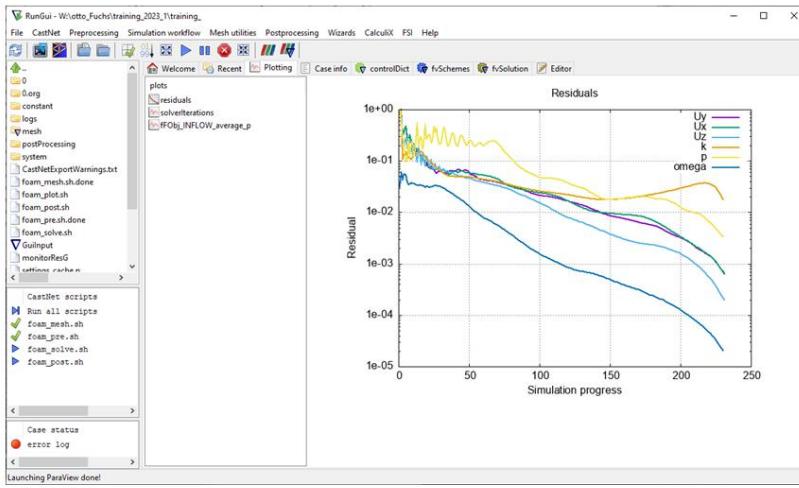
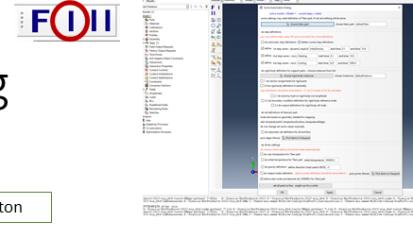


Abbildung 9: Monitoring GUI für die CFD mit Mapping-Funktionalität.

Das automatisierte parametrisierte Modell für die Abkühlung an Luft wurde an den Projektpartner ausgeliefert und im Rahmen einer 2-tägigen Schulung (inkl. Grundlagen mit OpenFOAM und Postprocessing mit ParaView) übergeben. Ebenso wurde der Projekt- partner bei der Installation der Softwarekomponenten unterstützt.

Für die Umsetzung der Automatisierung der strukturmechanischen Berechnung mit Abaqus wurden bereits in der ersten Phase zahlreiche Skripte erstellt. Durch den Zugriff auf diese Skripte konnte teilweise Arbeitszeit eingespart werden. Ziel war es, den Workflow so weit wie möglich zu automatisieren. Dies wurde durch die Erstellung von drei zusätzlichen Dialogen des vorgegebenen Preprocessing-Tools Abaqus/CAE mit der Skriptsprache PYTHON erreicht. Im ersten Dialog werden die Belastungsschritte und allgemeine Daten (wie z.B. physikalische Konstanten) definiert. Darauf aufbauend werden im zweiten Dialog Definitionen zur Modellbildung vorgenommen, s. Abbildung 10. Der dritte Dialog ist der Vor- und Nachbereitung des externen Mappings gewidmet, s. Abbildung 11. Das externe Mapping durch eine OpenFOAM-Funktionalität ist der einzige Schritt, bei dem das Preprocessing-Tool verlassen werden muss. Es ist aber auch der einzige Schritt, der nicht geometriebasiert ist. Dies erfordert besondere Sorgfalt in der Handhabung. Durch die Einführung einer Verwaltung der bereits für die Kartierung exportierten Daten kann das Risiko einer fehlerhaften Kartierung minimiert werden. Die Arbeiten hierzu wurden im Rahmen des folgenden Punktes durchgeführt.



Abaqus/CAE GUI Anpassung

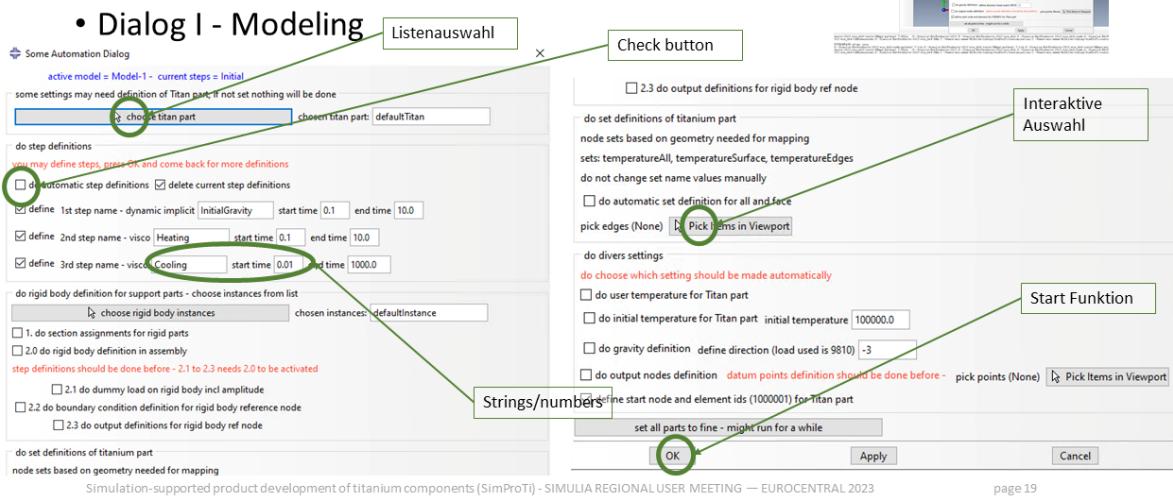


Abbildung 10: Definition von Einstellungen für die strukturmechanische Simulation in der Abaqus GUI.

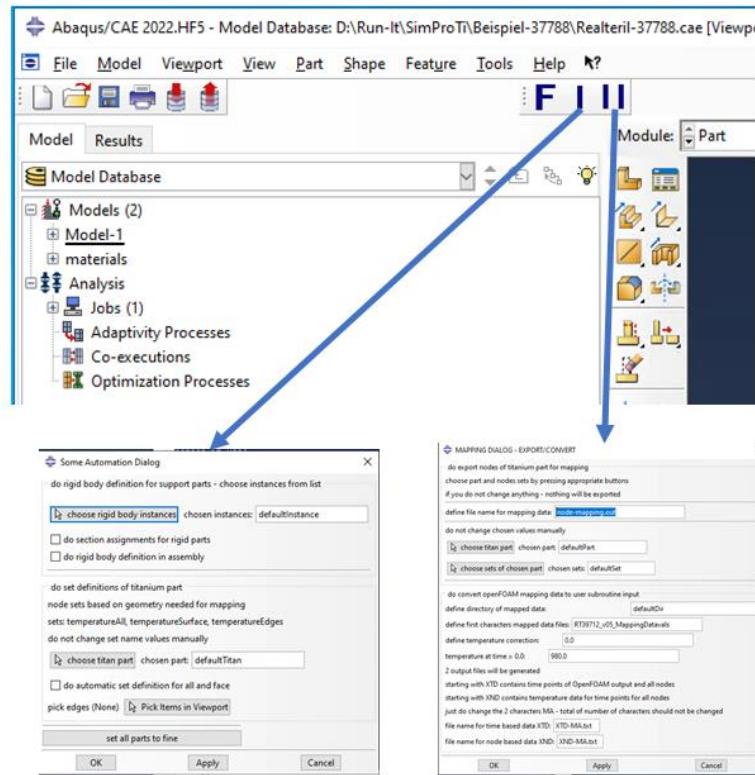


Abbildung 11: Integration von Mapping und Automatisierungselementen in die Abaqus GUI.

Ziel 5: Anwendung und Verifikation der Simulationsmethodik und Durchführung von Studien zur Verzugs- und Eigenspannungsprognose realer Bauteile als auch die Entwicklung von effektiven Ansätzen zur Verzugs- und Eigenspannungsreduktion in der Wärmebehandlung.

Hier wurde im Bereich CFD der Projektpartner bei der Durchführung eigener Simulationen unterstützt. Es wurden zusätzliche Erweiterungen in die Modelle integriert, wie z.B. die Verwendung eines zusätzlichen Strahlungsschirms in der CFD, um eine gleichmäßige Abkühlung der Ober- und Unterseite zu realisieren, s. Abbildung 12. Weiterhin wurde der Partner bei der Behandlung von Konvergenzproblemen unterstützt.

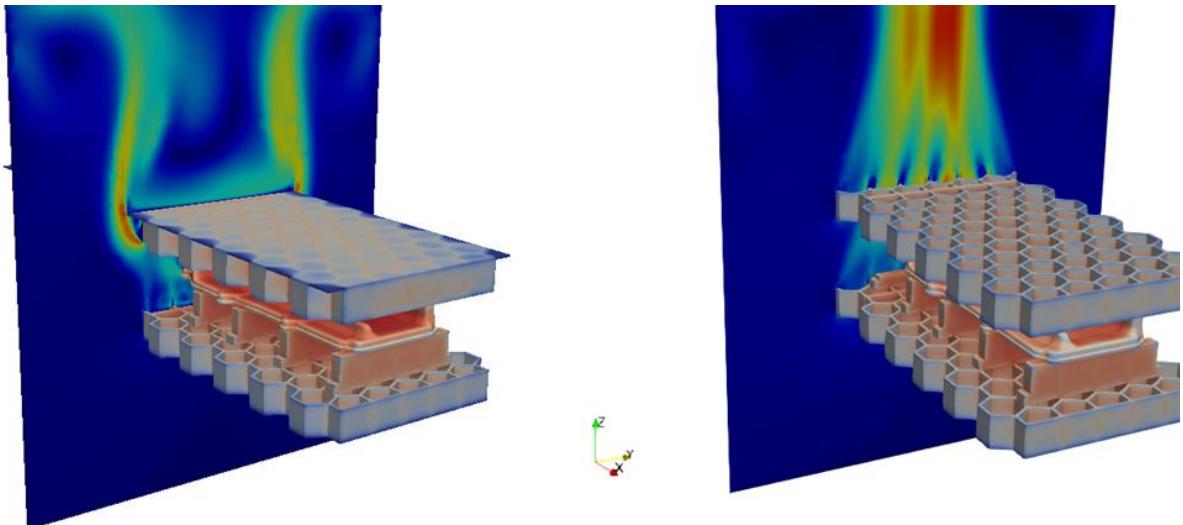


Abbildung 12: Untersuchung verschiedener Optimierungsmaßnahmen in der CFD.

Die Durchführung der verschiedenen Anwendungsberechnungen wurde begleitet. Verschiedene Szenarien zur Überprüfung des Einflusses unterschiedlichen Kriechverhaltens auf das Ergebnis wurden erstellt und im Ergebnis dargestellt. Eine Darstellung des Einflusses ausgewählter Modellparameter auf Kriechen und Relaxation wurde mittels eines Skripts zur Verfügung gestellt. Im Rahmen der verschiedenen Tests wurde die Notwendigkeit eines einfachen Datenmanagements für die Abbildung erkannt und entsprechend entwickelt.

Ziel 6: Überprüfung der Übertragbarkeit der Simulationsmethodik auf andere Arten der Wärmebehandlung und andere Werkstoffe.

Im Rahmen der Erstellung des Workflows wurden zwei verschiedene Wärmebehandlungsverfahren überprüft, die Abkühlung an ruhender Luft und die Abkühlung bei der Luftschnellkühlung. Hier wurden unterschiedliche Modellierungsansätze verwendet, um den speziellen Randbedingungen des Prozesses Rechnung zu tragen. Damit sind aber auch die wesentlichen Wärmebehandlungsmechanismen an Luft abgedeckt.

Weiterhin wurde das Modell so flexibel gehalten, dass die Stoffdaten einfach ausgetauscht werden können. Damit kann das Modell auch für andere Werkstoffe eingesetzt werden.

Insgesamt konnten damit alle in der Antragsstellung definierten Ziele erreicht werden. Abweichungen von der geplanten im Antrag geplanten Vorgehensweise waren nicht erforderlich.

Wichtigste Positionen des zahlenmäßigen Nachweises

Personalaufwand:

Zur Erreichung der Ziele war der Einsatz von hochqualifiziertem Personal mit umfangreicher Erfahrung in den Bereichen CFD, Programmierung und Strukturmechanik erforderlich. Die Arbeiten im Bereich CFD, Tool-Erweiterungen für CFD und automatisierte Workflow-Generierung konnten durch die Mitarbeiter von DHCAE Tools Martin Becker (Dipl.-Inform.) und Dr.-Ing. Ulrich Heck durchgeführt werden.

Im Bereich der Strukturmechanik war die Einstellung eines zusätzlichen Mitarbeiters (Dipl.-Ing. Ralf Paßmann) in Teilzeit erforderlich, da für die Umsetzung ein spezieller kommerzieller Löser für die Problemstellung (insbesondere für die Modellierung des Kriechverhaltens) eingesetzt werden musste, der nicht zum Portfolio der bei DHCAE Tools üblicherweise verwendeten Open-Source-Solver gehört. Aus diesem Grund wurde im Rahmen des Projektes auch eine Lizenz für den strukturmechanischen Löser Abaqus für den Projektzeitraum beantragt und wie geplant eingesetzt.

Reisekosten:

Die Reisekosten resultieren im Wesentlichen aus Besuchen und Besprechungen bei der Firma Otto Fuchs. Hier wurde ursprünglich mit höheren Reisekosten gerechnet. Aufgrund der Pandemie wurden jedoch die Besuche vor Ort reduziert und der Großteil der Besprechungen per Videotelefonie durchgeführt.

Projektspezifische Abschreibungen:

Die projektspezifischen Abschreibungen beinhalten die im Rahmen des Projektes anschaffte Workstation, die ausschließlich für das Projekt genutzt wurde. Aufgrund der transienten Simulationen in CFD war hier ein sehr hoher Rechenaufwand notwendig (ca. 1-2 Tage Rechenzeit für eine Simulation). Auch waren sehr viele Rechenläufe notwendig, um die verschiedenen Varianten zu berechnen und das Modell für die verschiedenen Bedingungen (z.B. Abkühlung an ruhender Luft und Luftschnellkühlung) zu optimieren. Außerdem mussten sehr viele Tests des automatisierten Workflows durchgeführt werden, um einen schnellen und stabilen Rechenlauf zu realisieren.

Sonstige direkte Projektkosten

Bei den sonstigen direkten Projektkosten handelt es sich um die Lizenz für den Struktursolver. Der Einsatz von Abaqus im Projekt war aus folgenden Gründen notwendig:

- In der strukturmechanischen Modellierung mussten Kriechvorgänge berücksichtigt werden. Die Modellierung solcher Prozesse in anderen Lösern (z.B. Open Source Strukturlösern) führt zu erheblichen Stabilitätsproblemen.
- Beim Projektpartner Otto-Fuchs ist Abaqus der Standardlöser für strukturmechanische Aufgabenstellungen. Aus diesem Grund wurde auch für die Prozessintegration eine Lösung mit Abaqus als Strukturlöser angestrebt.

Notwendigkeit und Angemessenheit der geleisteten Arbeit

Die durchzuführenden Aufgaben sind in den jeweiligen Disziplinen komplex und erfordern umfangreiche Erfahrungen. So wurde insbesondere im Bereich der zu modellierenden strukturmechanischen Themen ein langjähriger Experte für diese Themen eingestellt. Die Aufgaben umfassten nicht nur die reine Anwendung der Methoden, d.h. die Durchführung von CFD- oder strukturmechanischen Simulationen, sondern es waren an verschiedenen Stellen auch umfangreiche Erweiterungen an den Lösern vorzunehmen. Dies war z.B. im Bereich der Strukturmechanik der Fall, wo die Temperaturen an den Knoten zu den verschiedenen Zeitpunkten aus der CFD effizient über die Programmierschnittstellen in den Solver Abaqus übertragen werden mussten. Dies erfordert aufgrund der großen Datens Mengen eine effiziente Programmierung über die bereitgestellten FORTRAN-Schnittstellen. In der CFD gingen die Anforderungen weit über die reine Anwendung des Codes

hinaus. Hier musste der Solver an verschiedenen Stellen angepasst werden. Außerdem wurden automatisierte Workflows in PYTHON erstellt und dabei eine Kombination aus Python, Shell-Scripting und der Nutzung von OpenFOAM-Funktionalität verwendet.

Voraussichtlicher Nutzen, insbesondere der Verwertbarkeit des Ergebnisses im Sinne des fortgeschriebenen Verwertungsplans

Folgende Erweiterungen des Portfolios sind als Nutzen aus dem Projekt geplant:

Automatisierte Workflows als neuer Dienstleistungsschwerpunkt:

Die im Projekt erarbeitete Implementierung zur Erstellung von automatisierten CFD Workflows und die damit gemachten Erfahrungen zur Realisierung eines stabilen Rechenlaufs werden im Folgenden genutzt, um diese Methodik auf andere Anwendungen zu übertragen. Dies bietet sich insbesondere in Kombination mit einem Cloud-Service an. Ein Frontend mit API zur Erweiterung des Portfolios von DHCAE befindet sich derzeit in der Entwicklung. Sobald diese Infrastruktur realisiert ist, wird aufbauend auf den Erfahrungen bei der Implementierung stabiler automatisierter Workflows ein weiteres Spektrum an individuellen, kundenangepassten CFD-Anwendungen als Cloud-Service erschlossen.

Kopplung von CFD und Strukturmechanik: Kommerzialisierung der erweiterten Softwarewerkzeuge

Die im Projekt entwickelten Kopplungstools zum Datenaustausch zwischen der CFD-Lösung OpenFOAM und dem Strukturmechanik-Solver sollen zur Lösung allgemeiner transienter Kopplungsprobleme erweitert vermarktet werden. Dies ist generell sowohl mit Abaqus als auch mit dem bei DHCAE Tools standardmäßig eingesetzten Open-Source-Solver CalculiX möglich, da der Solver CalculiX das gleiche Eingabedatenformat wie Abaqus verwendet. Generell wird hier langfristig das größere Potential in der Kombination von OpenFOAM und CalculiX gesehen, da dann eine vollständige Lösung auf Basis von Open-Source-Lösern bereitgestellt werden kann. Dies hat später nicht nur Kostenvorteile für den Endanwender, sondern es könnte auch eine bessere Automatisierung durch Scripting realisiert werden und im Falle einer bevorzugten GUI-Anwendung wird CalculiX bereits im Workflow der DHCAE Tools durch Pre- und Postprocessing besser unterstützt als Abaqus. Aus diesem Grund wurde parallel zum Projekt im Rahmen einer Masterarbeit die Eignung von CalculiX für Kriechanwendungen untersucht. Für das spezielle Problem der Kriechberechnung sind noch einige Stabilitätsprobleme zu lösen, aber für das deutlich größere Spektrum thermischer Spannungen in der linearen Strukturmechanik steht die Kopplungsmöglichkeit mit CalculiX bereits zur Verfügung.

Effiziente Implementierung zur Simulation von Wärmebehandlungsprozessen auf längerer Zeitskala

Im Rahmen des Projektes wurde eine umfangreiche Erweiterung zur effizienten Simulation von Wärmetransportanwendungen, insbesondere auf längeren Zeitskalen, implementiert. Diese Methodik soll für andere Industriezweige im Bereich der Wärmebehandlung erschlossen werden. Gerade hier kann die gekoppelte CFD mit der Strukturmechanik einen wesentlichen Beitrag leisten.

Fortschritts auf dem Gebiet des Vorhabens bei anderen Stellen

Hierzu sind keine Fortschritte bekannt.

Erfolgte oder geplante Veröffentlichungen der Ergebnisse

Das Projekt wurde auf dem SIMULIA Regional User Meeting EUROCENTRAL 2023 vom 9. bis 11. Mai 2023 vorgestellt (Simulation-supported product development of titanium components (SimProTi) - Calculation of component distortion after heat treatment, Ralf Paßmann, DHCAE Tools GmbH).

Eine weitere Präsentation des Projektes ist auf der NAFEMS International Multiphysics Conference 2023 in München geplant. Ein Abstract wurde eingereicht und akzeptiert. Ein Stand auf der Konferenz wurde ebenfalls gebucht.

Literatur

- [Buc15] T. Bucquet, U. Fritsching, Flow conditioning in heat treatment gas quenching, Proceedings of the International Conference on Distortion Engineering 2015, Bremen, Germany, September 23-25, 2015.
- [Den14] Deng, T., Li, D., Li, X., Ding, P., & Zhao, K. (2014). Hot stretch bending and creep forming of titanium alloy profile. Procedia Engineering, 81(October), 1792–1798.
- [Das19] Dassault Systèmes. (2019). SIMULIA User Assistance 2020 - Abaqus.
- [Gon98] B. Gondersen, U. Heck, T. Lübben, U. Fritsching, F. Hoffmann, K. Bauckhage, Optimierung der Einzelteilabschreckung im Düsenfeld, Teil 2: Maß- und Formänderung und numerische Simulation, Härterei-Technische Mitteilungen, Vol. 53, S. 194-198, 1998
- [Har14] Harrison, W. J., & Evans, P. W. J. (2014). Application of the Theta projection method to creep modelling using Abaqus. Growth (Lakeland), November 2007, 1–15.
- [Ope23] <https://www.openfoam.com>
- [Sri12] V. Srinivasan, D. Greif, B. Basara, On the Heat and Mass Transfer Modeling to Simulate Quenching Heat Treatment Process, Proceedings of the 6th International Quenching and Control of Distortion, Chicago, USA, September 9–13, 2012.