

Polimerek reológiája és szimulációs technikái (BMEGEPTNG02)



BUDAPESTI MŰSZAKI ÉS GAZDASÁGTUDOMÁNYI EGYETEM
GÉPÉSZMÉRNÖKI KAR
POLIMERTECHNIKA TANSZÉK



Szabó Ferenc

2023

• Modell

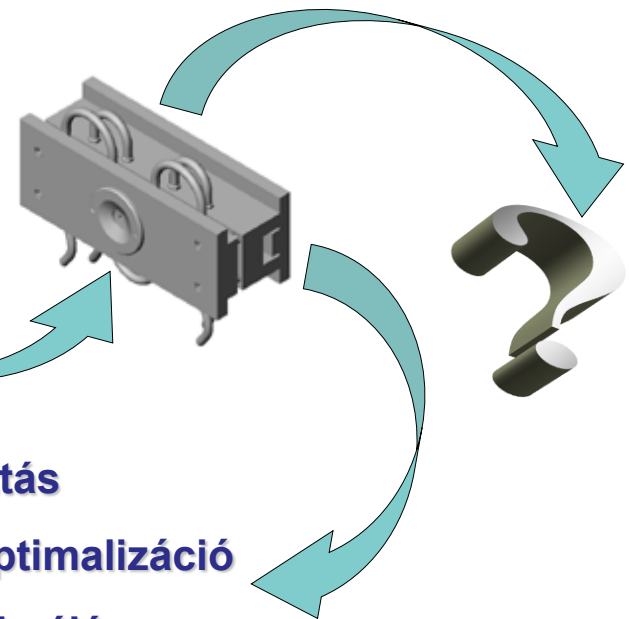
- Valamilyen rendszer leképezése hasonló viselkedésű, de más eszközökkel. A fizikai modell hasonló fizikai elveket használ, pl. áramló közegek helyett villamos áramokat, tároló elemek helyett kondenzátorokat. A matematikai modell a rendszer matematikai leírása, olyan matematikai összefüggések felírása, mely hasonló eredményt ad a számítás során, mint a rendszer a benne folyó átalakítással.



• Szimuláció

- A rendszer viselkedésének elemzése a modell segítségével
- (Szinte) sosem egy kísérlet

Anyag választás
Geometriai optimalizáció
Folyamat optimálás
Stb.



A valódi probléma

↓ modellhiba, mérési (öröklött) hiba

Tudományos modell

↓ képlethiba

Matematikai modell

↓ diszkrétizációs hiba

Numerikus modell

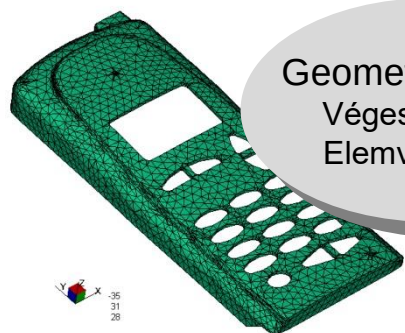
↓ kerekítési és ábrázolási hiba

Számítógépes modell

- **Elegendő egy „jó” becslés**
- **Csak akkor megfelelő a számítógépes modell, ha az egyszerűsítések és hibák ellenére megfelelő pontossággal írja le a valódi rendszer viselkedését**
- **Eredmények értékelése?**

• Hibák típusai

- **Modellhiba:** Általában a tudományos modellek nem tükrözik teljesen a valóságot, az ebből származó hibát modellhibának nevezzük. (pl.: pontszerű kiterjedés feltételezése, tömegek elhanyagolása, közegellenállás elhanyagolása stb.)
- **Mérési hiba:** A valódi probléma vizsgálatához szükségünk van bizonyos paraméterek mérésére, amely hibával terhelt. (pl.: hossz, tömeg, hőmérséklet mérése stb.)
- **Képlethiba:** Amikor egy képletet kezelhetőségének érdekében úgy egyszerűsítünk, hogy bizonyos részeit elhagyjuk, vagy egyszerűbbel helyettesítjük, képlethiba keletkezik. (pl.: végtelen sor helyett csak az első néhány taggal számolunk)
- **Diszkretizációs hiba:** A numerikus eljárások során keletkező hiba a diszkretizációs hiba. (pl.: a deriváltat differenciahányadossal, az integrált részletösszeggel helyettesítjük)
- **Kerekítési és ábrázolási hiba:** A bevitt adatokat a számítógép a saját számrendszerében ábrázolja, az ebből eredő hiba az ábrázolási hiba. A számítások során kerekíteni fog a számítógép, azaz kerekítési hibát követ el.



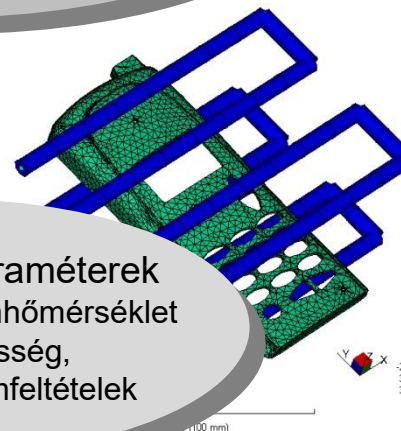
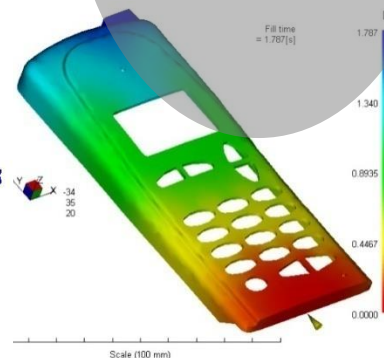
Geometriai modell
Végeselemháló
Elemvastagság



Feldolgozó gép adatai
Max. fröccsnyomás
Max. záróerő

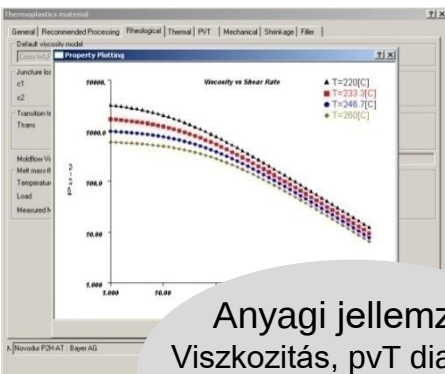
megoldó algoritmus
Kontinuitás egyenlet, Impulzusegyenlet
Energia egyenlet, Reológiai egyenlet

Eredmények
Időfüggvények,
Csomóponti
eredmények,
Elem eredmények,
Vastagság menti
eredmények



Technológiai paraméterek
Anyag- és szerszámhőmérséklet
Fröccs sebesség,
Geometriai peremfeltételek

Anyagi jellemzők
Viszkozitás, pVT diagram,
Hőtani állandók,
Sűrűség



- A valóságos folyamatok nem teljes mértékben ismertek, így a fizikai hátteret sem ismerjük teljes egészében.
- Még az összes ismert folyamat egyidejű modellezése is rettentő bonyolult feladat lenne, így további egyszerűsítéseket teszünk.
- Fontos kérdések:
 - A folyamatok időbelisége, azaz állandósult vagy tranziens folyamatról van szó? Ha tranziens, akkor milyen gyors a folyamat?
 - A vizsgált geometria bonyolultsága mennyire egyszerűsíthető?
 - Az anyagjellemzők függenek-e valamitől? Tekinthetőek-e konstansnak a folyamat során?
 - Anyagmodellek megválasztása? (konstitutív egyenletek, pl.: Maxwell modell.)?
 - Lineáris vagy nemlineáris a modell?
 - Milyen peremfeltételeket alkalmazunk?

- **Egyenletrendszerek megoldása:**
 - **Analitikus úton**
 - **Numerikusan**
- **Analitikus megoldás:** Analitikus megoldásra csak ritkán, jelentősen egyszerűsített esetekben van lehetőségünk a műszaki problémák megoldása során. Ez azt jelenti, hogy az egyenleteket kell annyira leegyszerűsíteni (azaz a mögöttes fizikai tartalmat is le kell egyszerűsíteni), amire már adható analitikus megoldás.
 - **Zárt alakú, szimbolikus, pontos vagy közelítő megoldás**
 - **„Papíron kézzel”...**
- **Numerikus megoldás:** „számszerűsített”, algoritmikus, legtöbbször közelítő megoldást ad
 - **Faragó István, Horváth Róbert: Numerikus módszerek. Typotex, 2013.**

- Sokszor alulértékelik a jelentőségüket a modellek megalkotása során
- Alapvetően befolyásolják egy rendszer viselkedését.
 - ➔ Teljesen rossz, fizikát meghazudtoló eredmények
 - ➔ numerikus instabilitásokat is eredményezhet.
 - ➔ körültekintő használat esetén akár jelentősen is csökkenthető a feladat erőforrás igénye (pl. szimmetriák).
- A peremfeltételek besorolása:
 - elsőfajú (Dirichlet-típusú): a mező változójának értéke adott.
 - másodfajú (Neumann-típusú): mezőváltozó gradiense adott,
 - harmadfajú: az első és másodfajú esetek közötti arányosság definiált.
- Vagy:
 - Hőtani: Hőmérséklet megadása, hőátadási tényező stb.
 - Áramlástan: Fal menti sebesség, térfogatáram stb.
 - Mechanikai: Kényszerek, kontakt paraméterek, terhelések stb.

- A numerikus módszerek gyakorlatilag az ODE és PDE rendszereket alakítják át algebrai egyenletekké.
- Lineáris és nemlineáris egyenletek is lehetnek
- Algebrai egyenletrendszerek megoldási módszerei
- Lineáris algebrai egyenletrendszer:

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}, \mathbf{x}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^n, \det \mathbf{A} \neq 0 \Rightarrow \text{invertálható},$$

- Ha $\det \mathbf{A} = 0$, szinguláris, nem invertálható
- Reguláris, ha invertálható és $\mathbf{A}$ és $\mathbf{b}$ is adott
- Direkt megoldási módok
- Iteratív megoldási módok

- Ekkor A-t felső háromszögmátrix formára hozzuk.
- A következő műveletek megengedettek:
 - egy egyenlethez hozzáadhatjuk egy másik egyenlet skalár szorosát,
 - egy egyenlet szorozható egy nem nulla skalárral,
 - egyenletek felcserélhetőek.

- A Gauss-elimináció során az alábbi lépéseket kell követni:

- Kibővített mátrix felírása:

$$\left(\begin{array}{cccc} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} & b_1 \\ \vdots & & \vdots & \vdots \\ a_{n,1} & \cdots & a_{n,n} & b_n \end{array} \right)$$



	1	2	.	.	.	.	n
1	x	x	x	x	x	x	x
2	0	x	x	x	x	x	x
.	0	0	x	x	x	x	x
.	0	0	0	x	x	x	x
.	0	0	0	0	x	x	x
.	0	0	0	0	0	x	x
n	0	0	0	0	0	0	x

- $\{a_{2,1}, \dots, a_{n,1}\}$ elemek eliminálása, a transzformációkat a b elemekre is haddatni kell.
- Balról jobbra haladva a többi, főátló alatti elemek oszloponkénti eliminálása.
- Az n-ik elem egzaktul kiadódik, folytonos visszahelyettesítéssel az ismeretlen x elemeket megkapjuk.

- Gauss elimináció → nagy műveletigény $\sim n^3$
- LU felbontás:
 - Ez a fajta felbontás és megoldás változó b esetén lényegesen gyorsabb, ugyanis ebben az esetben A háromszögmátrixszá való alakítása b-től független
 - $\sim 2n^2$ műveletigény
- Cholesky felbontás
 - Ez csak A egy speciális esetére működik → A szimmetrikus és pozitív definit
 - A gyakorlatban sokszor előfordul
 - A műveletigény az LU felbontáshoz képest fele akkora

- Az iterációs módszerek általában olyan konvergens sorozatokat konstruálnak, melyek határértéke az egyenlet megoldása.
- Általában a ritka mátrixokra (amelyekben a nemnulla elemek száma n nagyságrendű) alkalmazzák. Pl. differenciálegyenletek numerikus megoldása...
- Az iterációs módszereket főleg olyan ritka mátrixok esetén érdemes alkalmazni, melyekben a nemnulla elemek elhelyezkedése nem jól strukturált.
- Általános alak:

$$\bar{\mathbf{x}}^{(k+1)} = \mathbf{B}\bar{\mathbf{x}}^{(k)} + \bar{\mathbf{f}}, \quad k = 0, 1, \dots,$$

- Az iterációs megoldások esetén a következő kérdések merülnek fel:
 - Mikor konvergál a megoldáshoz a sorozat?
 - Mekkora lesz a konvergencia sebessége?
 - Honnét tudjuk, hogy mikor álljunk le az iterációval?
 - Hogyan válasszuk meg a $\mathbf{B}$ mátrixot és az $\mathbf{f}$, $\mathbf{x}^{(0)}$ vektorokat?

- **Konvergencia: tetszőleges $\mathbf{x}^{(0)}$ vektorból indulva közelítünk-e a megoldáshoz?**
 - **Spektrálsugár:** a mátrix sajátértékei közül a legnagyobb abszolútértékű.
 - **Tetszőleges $\mathbf{x}^{(0)}$ kezdővektor esetén akkor konvergens az iteráció, ha a B iterációs mátrixra igaz, hogy spektrálsugara <1 . Ekkor az eljárás globálisan is konvergens.**
- **Konvergencia sebesség:** a konvergencia annál gyorsabb, minél kisebb a B mátrix spektrálsugara.
- **Leállási kritérium:** tetszőleges, például az alábbi alakot öltheti:

$$\|\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{x}^{(k-1)}\| \leq \varepsilon,$$

- Bontsuk fel A -t két részre, S legyen reguláris,

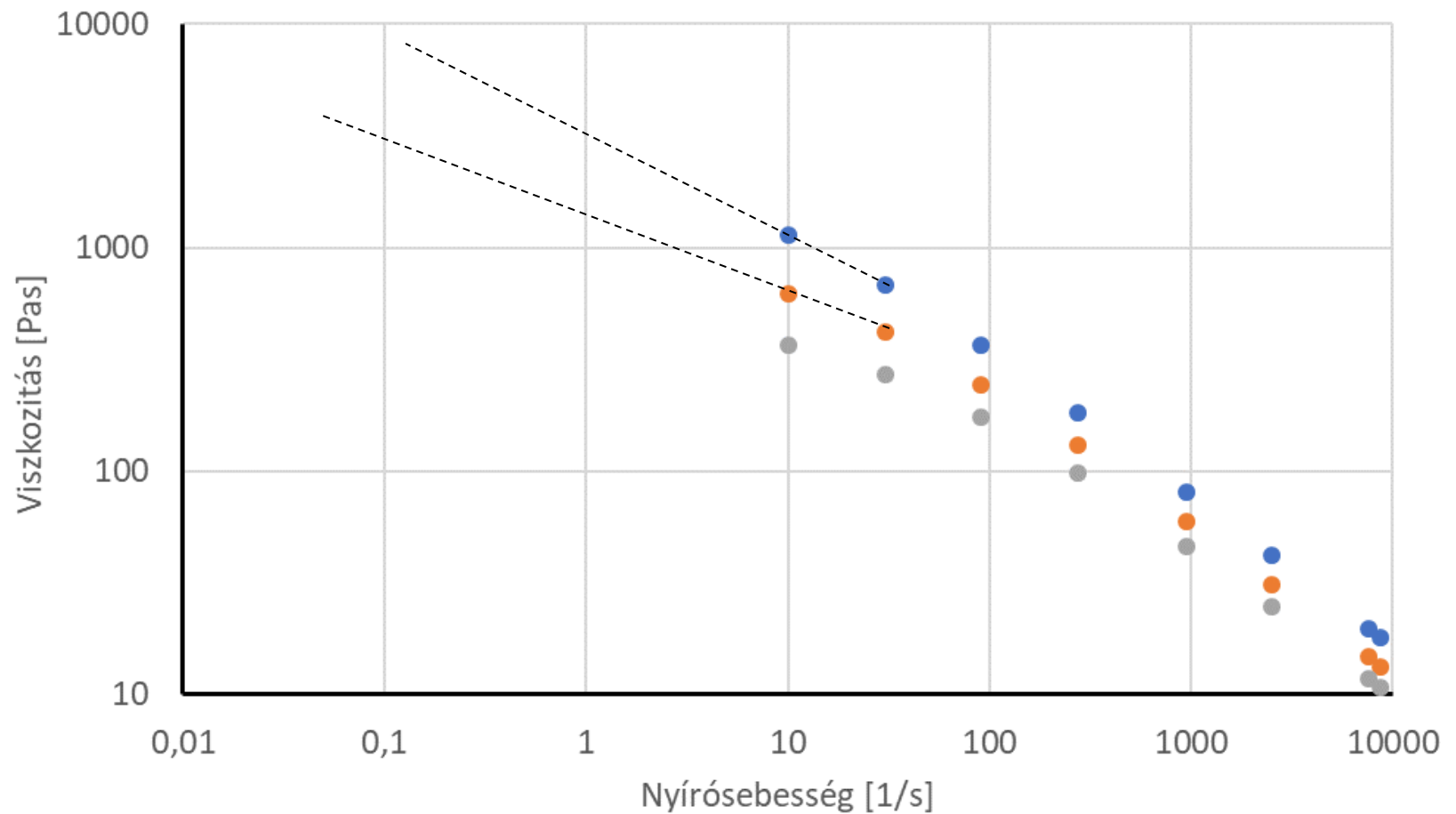
$$\mathbf{A} = \mathbf{S} - \mathbf{T} \quad \mathbf{b} = \mathbf{Ax} = (\mathbf{S} - \mathbf{T})\mathbf{x}$$

- Szorozzunk balról S^{-1} -gyel, átrendezés után

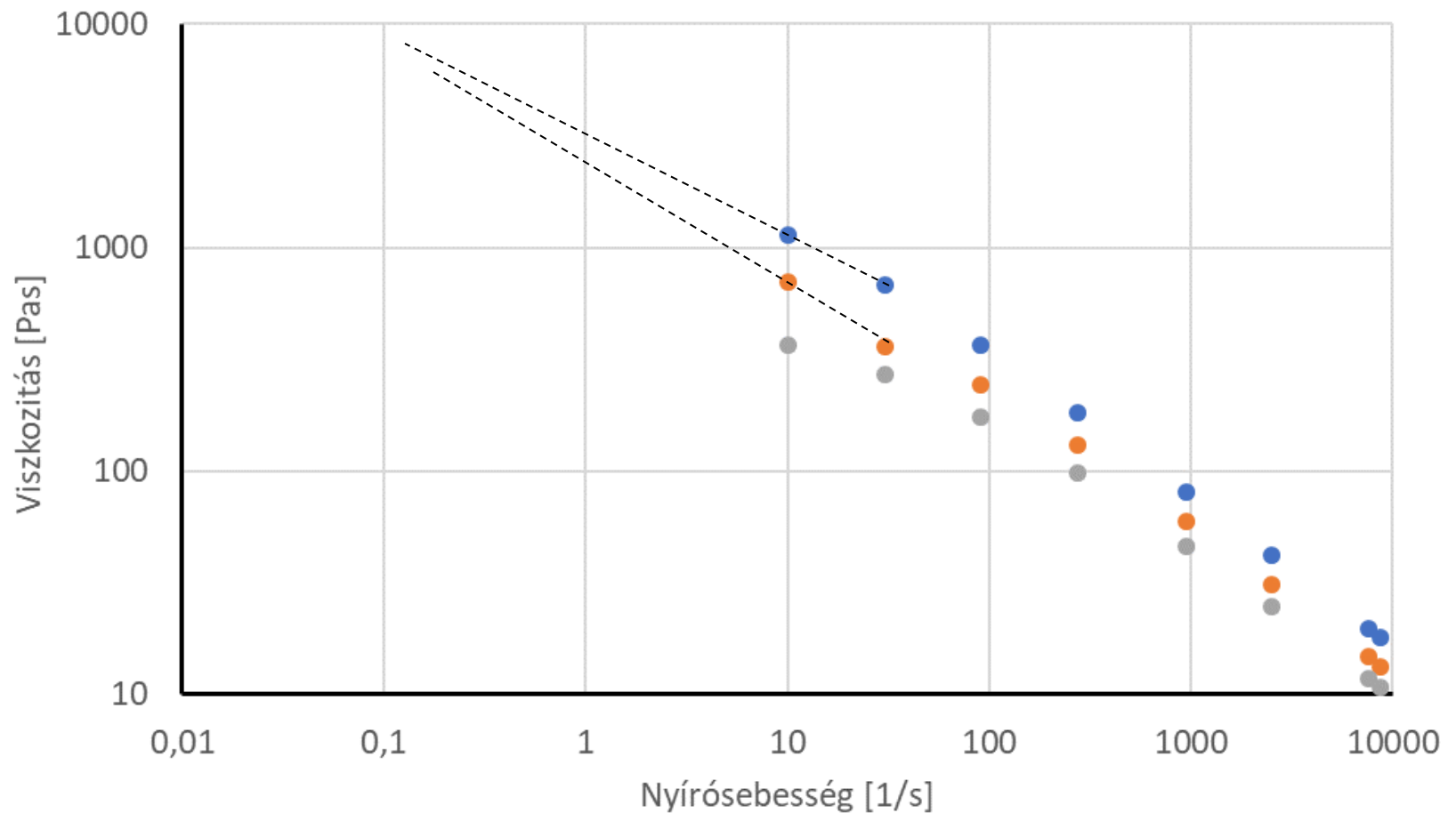
$$\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{S}^{-1}\mathbf{T}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{S}^{-1}\mathbf{b}.$$

- Az iterációt S nagymértékben befolyásolja, éppen emiatt hívják prekondicionálási mátrixnak is, azaz meghatározza, hogy mennyire nehéz vagy éppen könnyű az iteráció végrehajtása.
- Az $A=S-T$ felbontás nem egyértelmű, végtelen sok ilyen lehet találni, ezért rendelkezünk némi szabadsággal, hogy S -t hogyan válasszuk meg. Ennek két egymással ellentmondó szempontja van:
 - Legyen könnyen invertálható, mivel mindenhol ez szerepel,
 - S „legyen közel” A -hoz a gyors konvergencia elérése miatt.

- „Normál” eset



- 10% mérési hiba az utolsó két pont esetében...
- Stabilitási probléma?

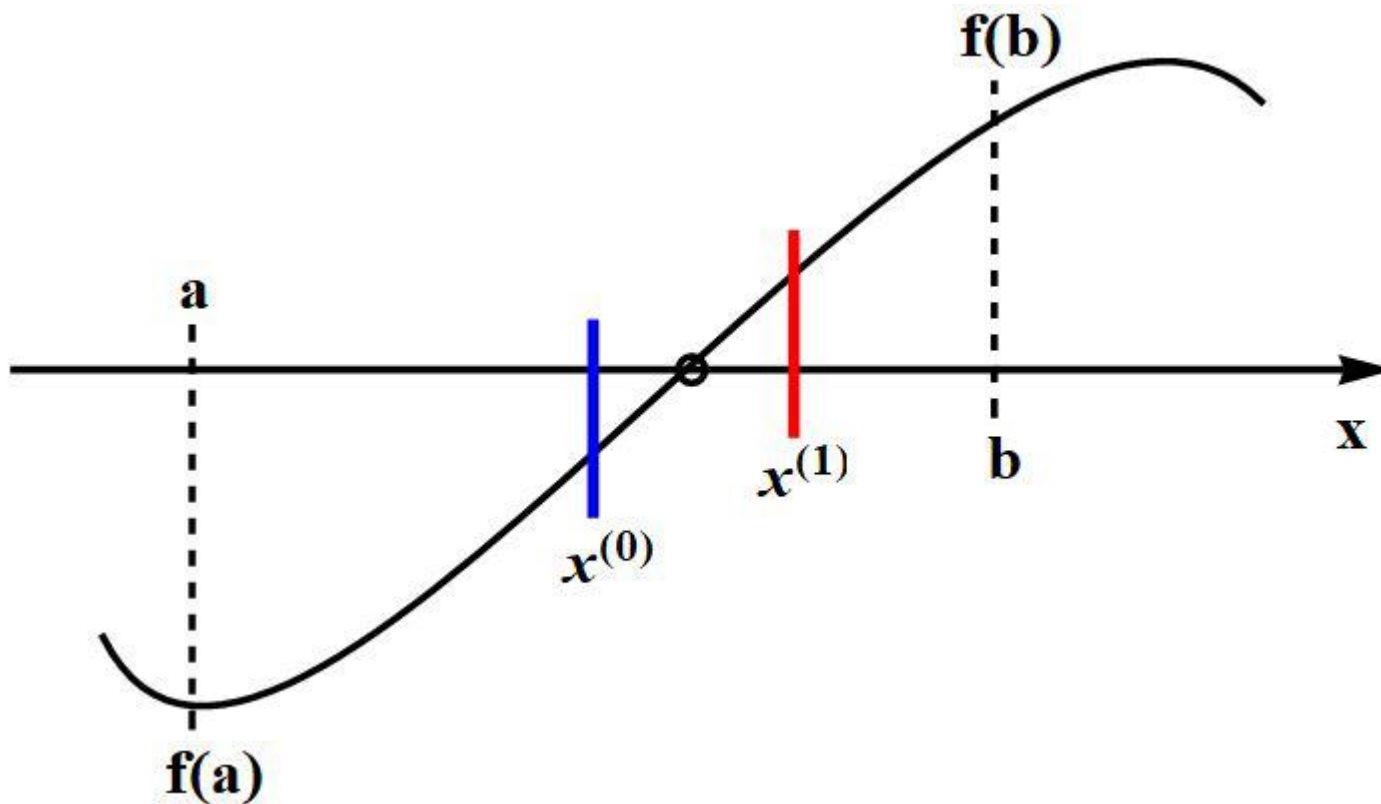


- A jelentősége az úgynevezett implicit módszerek használatában mutatkozik meg. Ez azt jelenti, hogy a nemlineáris egyenletekben nem lehet kifejezni egyenletrendezéssel az ismeretlent és ezáltal zárt alakú megoldást adni rá.
- Fontos általános jellemzőjük, hogy több megoldás is létezik, a legegyszerűbb példa a másodfokú egyenlet és a trigonometrikus függvények. (minimum ötödfokú polinomra már nem létezik megoldó képlet!)
- Egy nemlineáris egyenlet általános alakja:

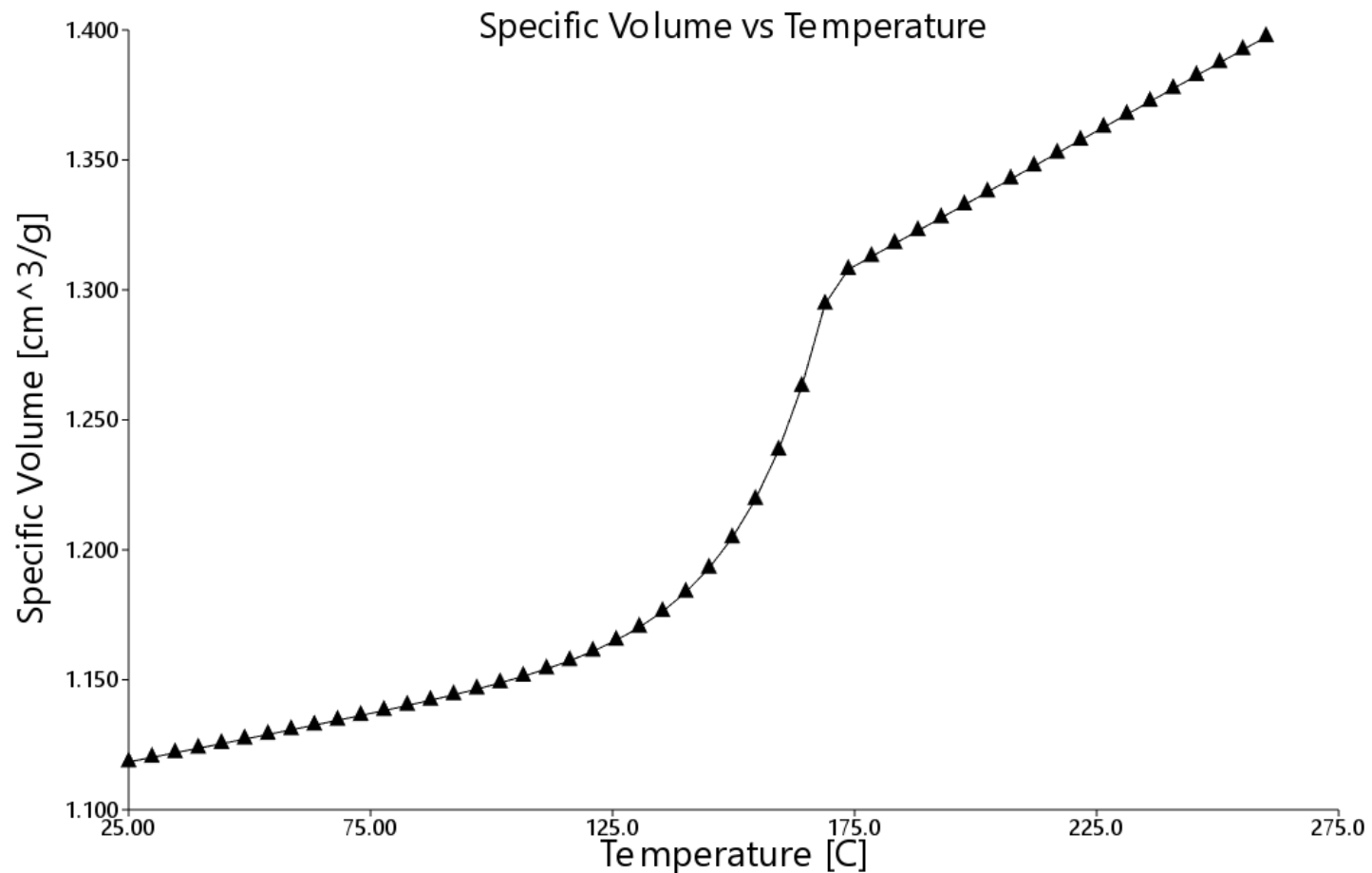
$$f(x) = 0,$$

- Legyen x^* egy megoldás, azaz teljesül rá, hogy $f(x^*)=0$
- Bolzano-tétel: Ha egy folytonos függvény esetén $f(a) \cdot f(b) < 0$ és $a < b$ akkor van olyan $c \in (a, b)$, amire $f(c)=0$

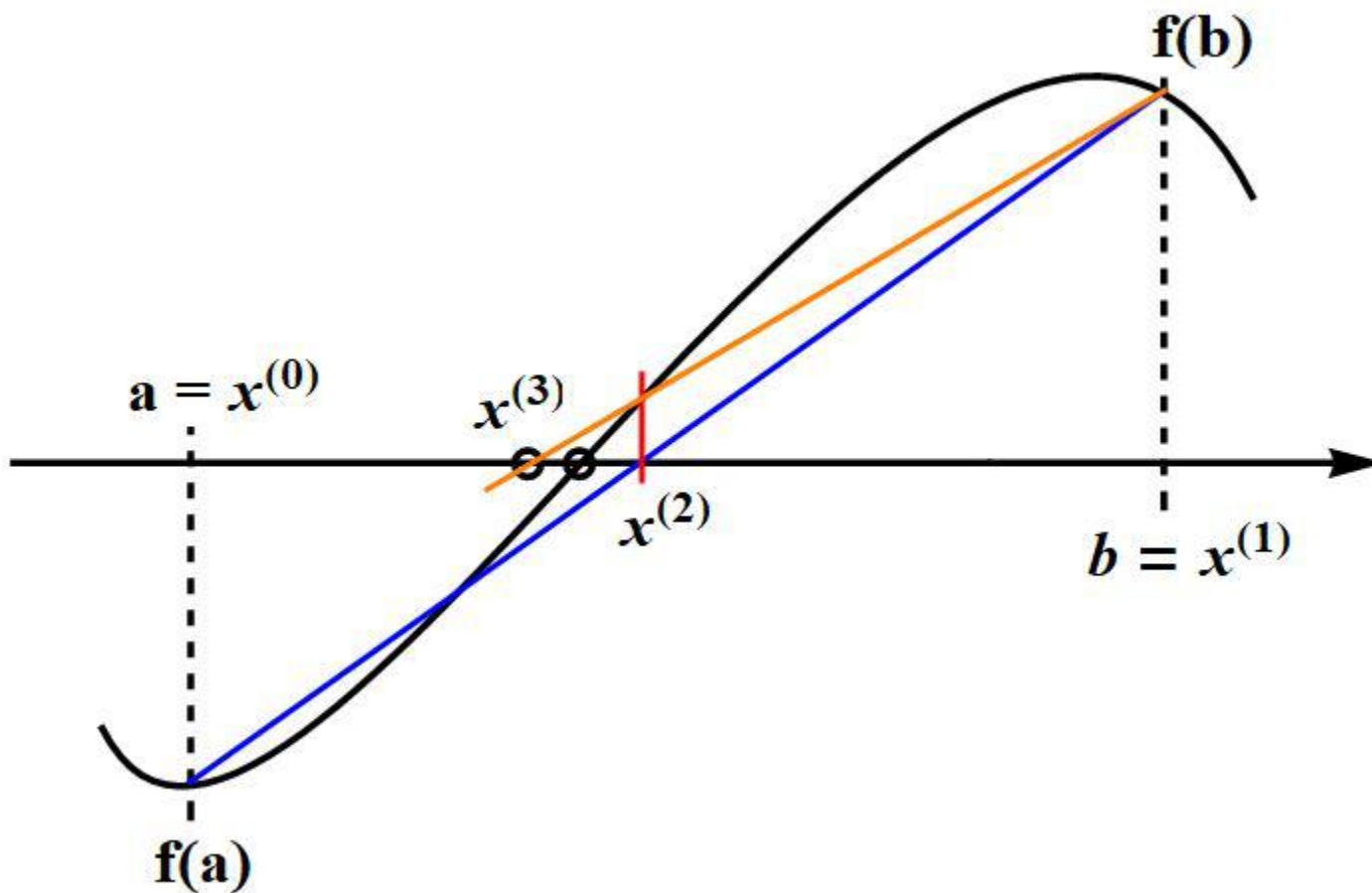
- Intervallum felezési eljárás



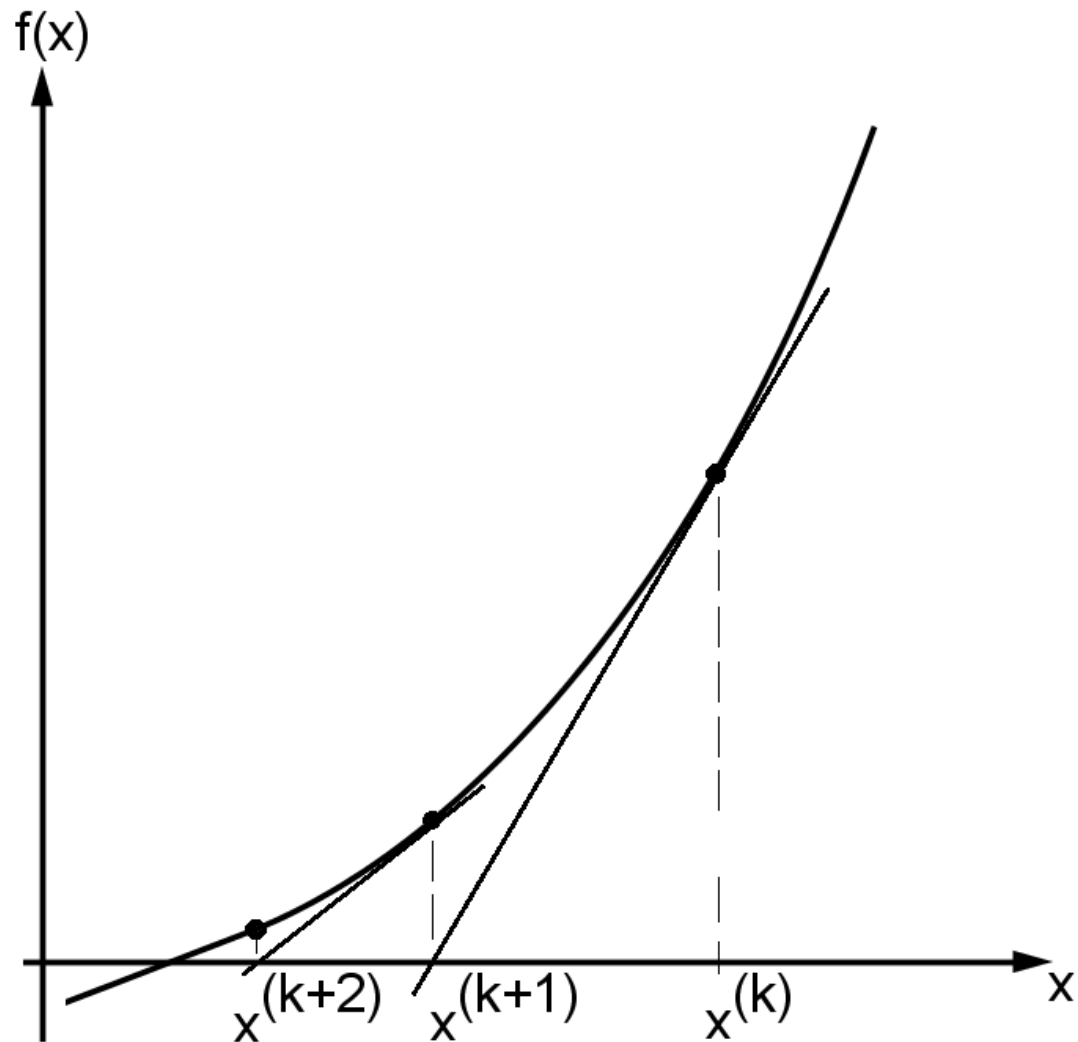
- Intervallum felezési eljárás
- Moldflow → Egyedi viszkozitás vagy pvT megadása



- Húrmódszer



- Érintőmódszer



- Két tételt fontos megemlíteni az ODE-k kapcsán:
- Cauchy–Peano: az $x'=f(t,x)$, $x(t_0)=x_0$ egyenletnek létezik megoldása, ha f folytonos a $[0,T]$ intervallumon. (Ez a tétel nem garantál egyértelműséget!)
- Unicitás: Ha $f(t,x)$ folytonos a $[0,T]$ intervallumon és kielégíti a Lipschitz-feltételt a második változójában

$$\|f(t, x_1) - f(t, x_2)\| \leq L \cdot \|x_1 - x_2\|, \quad L \leq \infty$$

minden x_1, x_2 és L Lipschitz-konstans esetén, akkor az $x'=f(t,x)$, $x(t_0)=x_0$ egyenletnek létezik egyértelmű megoldása.

- A mérnöki gyakorlatban sokszor megelégednek egy megoldással, nem szokott célkitűzés lenni a megoldás egyértelműségének a vizsgálata, de egyedi feladatokban szükséges lehet.

- Az

$$\mathbf{x}' = \mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{x}(t_0) = \mathbf{x}_0, \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{d \times d}$$

egyenlet általános megoldása a

$$\mathbf{x}(t) = e^{\mathbf{A}t} \mathbf{x}_0.$$

- Stabilitási lehetőségek:
 - A megoldás pontosan akkor stabil, ha $\mathbf{A}$ minden λ_i ($i=1, \dots, d$) sajátértékére igaz, hogy $\text{Re}(\lambda_i) \leq 0$, azaz λ_i valós része nem pozitív.
 - A megoldás aszimptotikusan stabil, ha $\mathbf{A}$ minden sajátértékére igaz, hogy $\text{Re}(\lambda_i) < 0$, azaz λ_i valós része negatív.
 - A megoldás instabil, ha van legalább egy olyan λ_i sajátérték, amire $\text{Re}(\lambda_i) > 0$.
- A fenti állítást kihasználva úgyis vizsgálható egy rendszer, egy fizikai folyamat, hogy megoldanánk az ODE rendszert. Ehhez elég ismerni az $\mathbf{A}$ együttható mátrixot, illetve annak sajátértékeit.
 ➔ PDE-k esetén nem ilyen egyszerű a helyzet...

- Explicit Euler módszer:**

- A módszer a deriváltaknak az előrelépő közelítését alkalmazza, azaz

$$x'(t_n) \approx \frac{x(t_n+h) - x(t_n)}{h}, \quad h > 0,$$

ahol t_n jelöli az n -edik időlépést, h lépésközzel és $n=0$ esetén $x(t_0)=x_0$ a kezdeti feltétel. Az egyenletet felhasználva kapjuk az ODE következő időpontbeli megoldását:

$$x_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n)$$

- Explicit $\rightarrow$ az $n+1$ -edik x érték egyértelműen kifejezhető a korábbi időpontbeli értékekkel

- **Implicit Euler módszer:**

- Ekkor a deriváltat hátralépő módon közelítjük, és az alábbi formulát kapjuk:

$$x_{n+1} = x_n + hf(t_{n+1}, x_{n+1})$$

- Az f függvény értékének meghatározásához szükség van az x_{n+1} értékére is. Ekkor tehát az x_{n+1} nem fejezhető ki egyértelműen és a nemlineáris egyenletek megoldásai során bemutatott módszerekkel lehet minden időlépésben meghatározni x_{n+1} értékét.
- ez nyilvánvalóan számításigényesebb
- fontos előny numerikus stabilitás szempontjából

- Azért beszélünk numerikus stabilitásról és numerikus instabilitásról, mert ezeket a fogalmakat élesen el kell különíteni a valós folyamatok stabilitásától és instabilitásától
→ pl. ömledék kihülése a szerszámban egy stabil folyamat, de ettől a feladat numerikus megoldása nem feltétlenül az
- A numerikus instabilitás tisztán a felhasznált numerikus módszer sajátja, mint matematikai eredetű tulajdonság
- Általánosságban véve a numerikus eljárásokkal közelítve, bizonyos hibával számolunk ki valamit, például egy deriváltat.
→ Akkor beszélünk numerikusan stabil eljárásról, ha ez a hiba a számítások során mindvégig korlátos marad és egyben „kontroll alatt tartható”. (Ennek ellentéte a numerikus instabilitás.)
- Ebből a szempontból elkülöníthetjük egymástól az explicit és implicit módszereket, előbbi ugyanis feltételesen stabil, az utóbbi pedig sok esetben feltétel nélkül stabil.

- Tekintsük a következő elsőrendű ODE rendszert:

$$\mathbf{x}' = \mathbf{A}\mathbf{f}(t, \mathbf{x}), \quad \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

- Az ODE rendszer merev, ha az $\mathbf{A}$ mátrix λ_k ($k=1, \dots, m$) sajátértékei rendelkeznek az alábbi tulajdonságokkal:
 - $\text{Re}(\lambda_k) < 0, \forall k=1, \dots, m$ esetén. (A fizikai folyamat stabilitása.)
 - $S = \max\{\text{Re}(\lambda_k), k=1, \dots, m\} / \min\{\text{Re}(\lambda_k), k=1, \dots, m\}$ merevségi mutatóra igaz, hogy $S \gg 1$
- ODE rendszer általános megoldásában pont a sajátértékek szerepelnek az exponenciális tagok kitevőjében ezért:
 - Lesznek olyan tagok, amik nagyon gyorsan tartanak nullához, ezek a legnagyobb abszolútértékű sajátértékekhez tartoznak
 - Lesznek olyan tagok, amik nagyon lassan, ezt fejezi ki a merevségi mutató.
- Explicit módszerek numerikus stabilitása:
 - A nagyon gyorsan lecsengő tagokat is nyomon kell követnünk, kis időlépés
 - A fizikai folyamat lényegi részéhez (ami hosszú időskálán zajlik) szükségtelen, de másképp nem tudnánk megoldani.

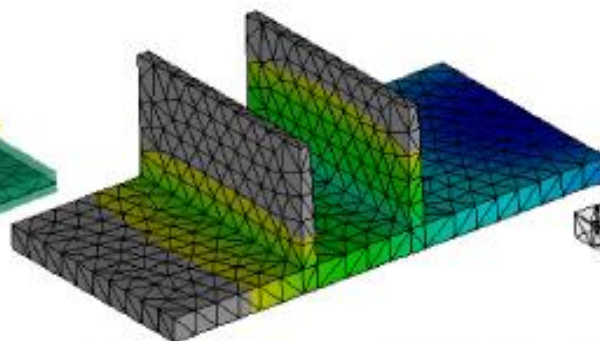
- Az adott geometriát véges darabszámú elemre felbontva (hálózási folyamat), ezzel közelítve nem csak a geometriát modellezzük, hanem ezzel együtt végrehajtjuk az egyenletek diszkretizálását is. Éppen emiatt a hálózásnak kiemelt jelentősége van a végeselem modell felállítása során.
- A probléma, amivel tisztában kell lenni, a következő: nem látjuk, hogy egy kereskedelmi szoftverbe épített kód milyen módon és egyáltalán milyen egyenleteket old meg. Éppen emiatt „fekete doboz” hatása van ...
- A kereskedelemben többféle végeselemes szoftver kapható, mindegyiknek megvannak a maga előnyei és hátrányai. Olyan szempontok érvényesülnek, mint például:
 - hatékony erőforrás-felhasználás (több szálon futtatás, GPU-k kihasználása),
 - felhasználói beavatkozás lehetősége (tetszőleges egyenletek megoldása),
 - kapcsolt feladatok matematikai és fizikai kezelése, megoldása (specializált elemtípusok, stb.).

- **Moldflowban:**

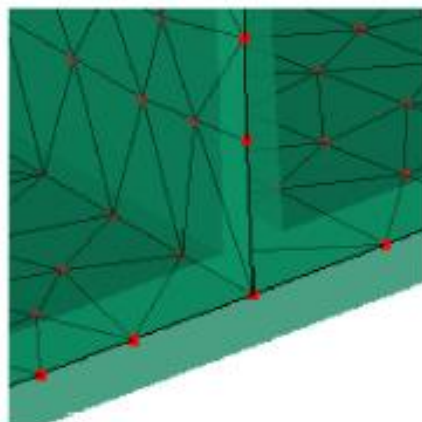
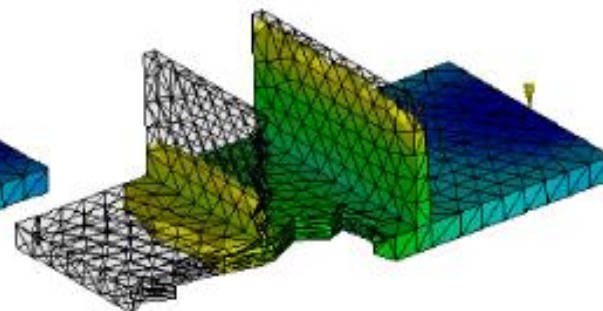
Midplane



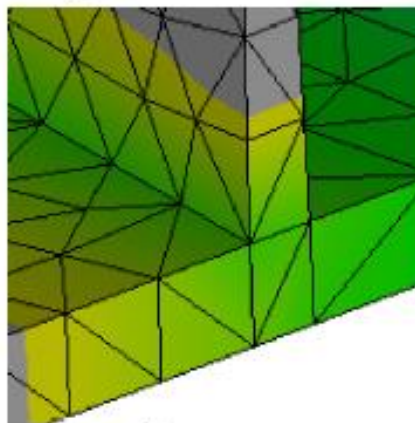
Dual Domain



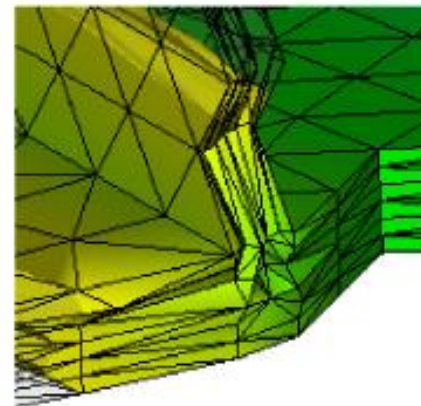
3D



A



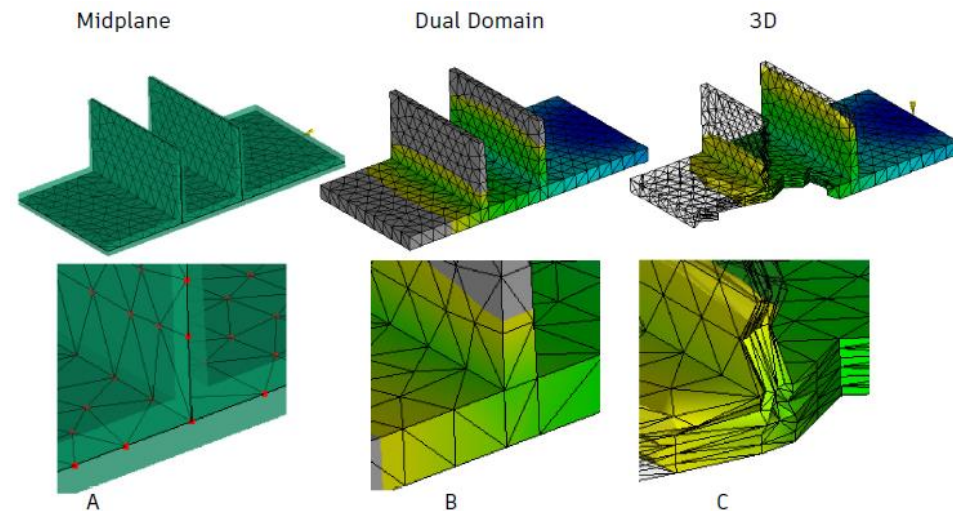
B



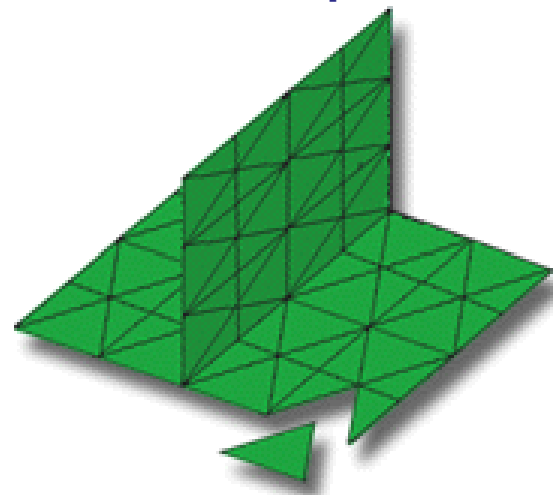
C

- Mi a szimuláció célja?
- Egy termék, vagy több szimulációja?
- Szükség van a kis méretű letörésekre és lekerekítésekre?
- Szükség van a feliratokra, időbélyegekre stb. ?
- Mekkora a folyási út?
- Mekkora a falvastagság?
- Egyenletes a falvastagság?
- Ha 3D háló, akkor elég-e a strukturálatlan, vagy strukturált kell

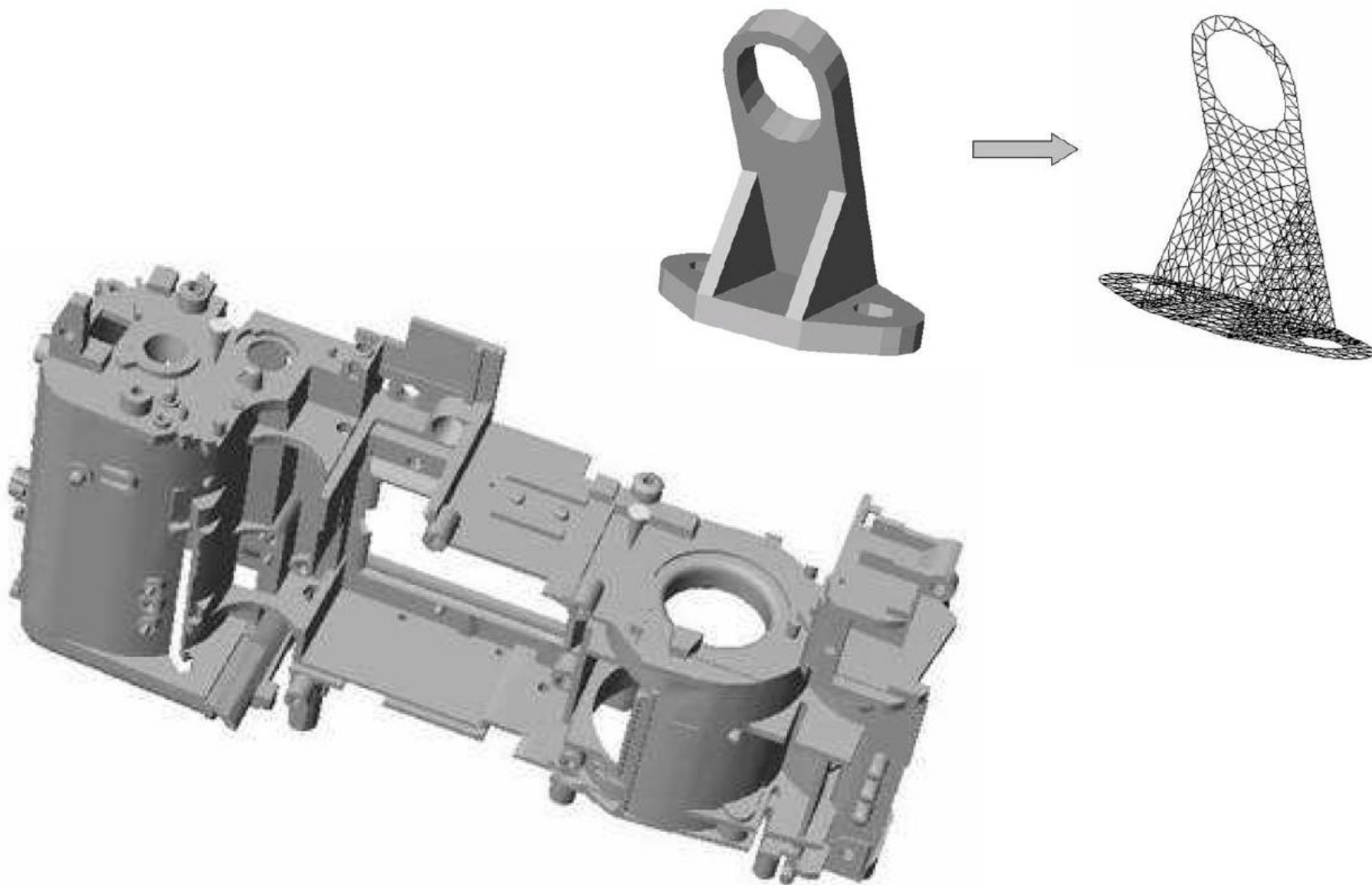
- **Kerülendő források:**
 - Felületmodellezett alkatrészek
 - 3D szkennelt alkatrészek



- A darab jellemzése a falvastagság közepén felvett síkokkal történik
- A középsík hálózása háromszög elemekkel történik, amelyek az éleik mentén és a sarokpontokban kapcsolódnak egymással
- A darab (helyi) falvastagsága az egyes háromszög elemekhez kapcsolatosan tárolódik



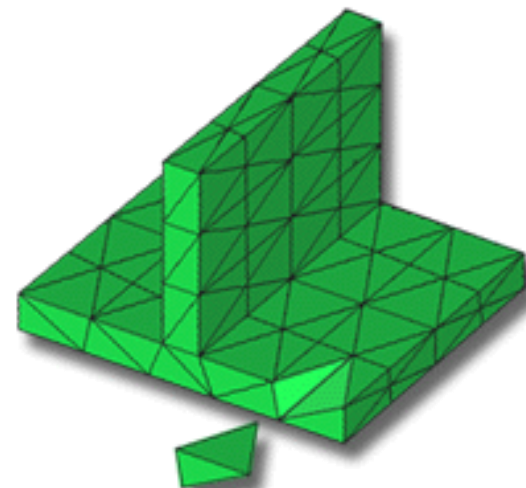
- "Klasszikus" vékonyfalú termékek esetében
- Egyszerű geometriai kialakítás esetében
- Egyenletes falvastagság szükséges
- "Vékonyfalú" termékek esetén → Folyási úthossz $> 6 \cdot$ falvastagság
- A középsík generálás CAD program segítségével történik, időigényes lehet



- A vizsgált darab felületét az algoritmus háromszögekkel borítja be
- A darab megjelenését tekintve üreges test
 ➔ A számítás során a felületek közötti teret a program további elemekkel tölti fel (laminates)
- A termék szemközti oldalain az elemeket egymással fedésbe kell hozni (megfeleltetés)
- A számítások pontosságát a megfeleltetés mértéke direkt módon befolyásolja
- A vastagság információ az elemekben tárolódik, a számítás alapja az elem megfeleltetés és orientáció
- **Megfeleltetés:**
 - Megfeleltetett
 - Él
 - Meg nem feleltetett



- A 3D hálózás során a hálózó algoritmus a test térfogatát négycsomópontos tetraéder elemekkel tölti ki
- Ez a módszer valós 3D-s reprezentációja a modellnek, a vastagság kezelése natív
- Bonyolult geometriák esetében is alkalmazható
- Nincs korlátozás a falvastagság tekintetében (vékonyfalú, vastagfalú, egyenetlen falvastagságok ...)
- Jellemzően a legnagyobb számítási igénnyel rendelkezik
- Nem alkalmazható minden analízis típushoz
pl. gátkeresés, MW, runner balance
- Az elemszám és az elemméret között köbös összefüggés van
- A 3D háló generálásához hibamentes 2D háló szükséges



- 2 csomópont, plusz laminátok
- Csak előre definiált keresztmetszetű geometriákhoz (kör, félkör, U, trapéz, téglalap)
- A körtől eltérő keresztmetszetek számítása egyenértékű kör keresztmetszet segítségével történik (Egyenértékű cső átmérő...)
- Tengelyszimmetria feltételezése
- Elosztórendszer, hűtőrendszer, darab eleme is lehet
- Elosztórendszer és hűtőrendszer:
 - 2,5D modell → Beam
 - 3D modell → Beam / 3D

