

Inhaltsverzeichnis

1	Einführung	1
1.1	Modell und Simulation	1
1.2	Das Nahwirkungsprinzip	3
1.3	Warum Simulation?	4
1.4	Simulationen und Längenskalen in der Materialwissenschaft	5
1.5	Überblick über das Buch	7

I Kontinuumsmechanik

2	Einführung in die Finite-Element-Methode	11
2.1	Partielle Differentialgleichungen	11
2.2	Die Finite-Element-Methode im Beispiel	12
2.3	Verschiebung und Dehnung	16
2.4	Das Kräftegleichgewicht im Kontinuum	20
2.4.1	Kraft und Spannung	20
2.4.2	Spannung und Dehnung	21
2.5	Diskretisierung	22
2.6	Das Prinzip der virtuellen Arbeit	24
2.6.1	Konzept der virtuellen Arbeit	24
2.6.2	Die virtuelle Arbeit im Kontinuum	26
2.6.3	Die schwache Form der Gleichgewichtsgleichung	28
2.7	Die Finite-Element-Methode	30
2.7.1	Formfunktionen	30
2.7.2	Zwei Beispielprobleme	30
2.7.3	Elemente	35
2.7.4	Die Grundgleichung der Finite-Element-Methode	37
2.8	Thermische Analysen	39
2.9	Überblick über die folgenden Kapitel	40
3	Wahl der Elemente	43
3.1	Ordnung von Elementen	43
3.1.1	Formfunktionen	43
3.1.2	Eigenschaften der Elemente	47
3.2	Numerische Integration und Integrationspunkte	49
3.2.1	Integrationspunkte und Konturplots	52
3.2.2	Vollständige Integration	52
3.2.3	Shear locking	56
3.2.4	Reduzierte Integration	58

3.3	☞ Inkompatible Moden	60
3.4	☞ Hybrid-Elemente	61
3.5	☞ Die erweiterte Finite-Element-Methode (XFEM)	62
3.6	Faustregeln zur Auswahl des Elementtyps	64
3.7	Zweidimensionale Volumenelemente	66
3.7.1	Ebener Spannungszustand	66
3.7.2	Ebener Dehnungszustand	67
3.7.3	Axialsymmetrische Elemente	67
3.8	Stäbe, Balken, Membranen und Schalen	68
3.8.1	Stäbe und Balken	68
3.8.2	Membranen und Schalen	68
3.9	Elementformen	69
3.9.1	Verzerrte Elemente	69
3.9.2	Dreiecks- und Tetraeder-Elemente	71
3.10	Netzgenerierung	72
3.10.1	Regeln für die Vernetzung	73
3.10.2	Geometrierzeugung	74
3.10.3	Netzerstellung	75
3.10.4	Adaptive Vernetzung	75
3.10.5	☞ Andere Lösungsansätze	78
4	Nichtlineare Probleme	79
4.1	Was sind Nichtlinearitäten?	79
4.1.1	Geometrische Nichtlinearitäten	79
4.1.2	Material-Nichtlinearitäten	80
4.2	Lösung der nichtlinearen Grundgleichung	80
4.2.1	Das Newton-Raphson-Verfahren	81
4.2.2	Zeitschritte	85
4.2.3	Konvergenzkriterien	88
4.2.4	Der Lösungsalgorithmus	89
4.2.5	☞ Weiteres zu den Lösungsalgorithmen	91
4.3	Dynamische Probleme und explizite Verfahren	93
4.3.1	Dynamische Probleme	93
4.3.2	Diskretisierung der Zeitableitung und implizite Verfahren	94
4.3.3	Explizite Verfahren	98
5	Materialgesetze	103
5.1	Einführung	103
5.2	Elastizität	104
5.3	Plastizität	105
5.3.1	Plastizitätsberechnung in einer Dimension	106
5.3.2	Ein ausführliches Beispiel	107
5.3.3	Isotrope Plastizität nach von Mises	112
5.3.4	Grundlagen der Plastizitätstheorie	113
5.3.5	Lösung der Materialgleichung	115

5.3.6	⊗ Kinematische Verfestigung	118
5.3.7	⊗ Andere Plastizitätsmodelle	119
5.3.8	⊗ Ratenabhängige Plastizität und Kriechen	120
5.3.9	⊗ Kristallplastizität	121
5.4	⊗ Schädigungsmodelle	123
5.5	⊗ Hyperelastizität	126
6	Geometrische Nichtlinearitäten	129
6.1	Einfache geometrische Nichtlinearitäten	129
6.2	Kontaktprobleme	130
6.2.1	Modellierung des Kontakts	131
6.2.2	Kontaktalgorithmen	133
6.2.3	Implementierung von Zwangsbedingungen	135
6.2.4	Reibung	137
6.3	⊗ Risswachstum und Materialversagen	138
6.3.1	⊗ Stationäre Risse	138
6.3.2	⊗ Materialversagen	139
II	Phasen und Gefüge	
7	Zelluläre Automaten	145
7.1	Einführung	145
7.1.1	Ein einfacher Zellulärer Automat	145
7.2	Definition eines Zellulären Automaten	146
7.3	Anwendungen	150
7.3.1	Simulation der Rekristallisation	150
7.3.2	Simulation des Dendritenwachstums	153
8	Monte-Carlo-Algorithmen	155
8.1	Einführung	155
8.1.1	Monte-Carlo-Integration	155
8.1.2	Zufällige Teilchenbewegung	157
8.2	Simulation thermodynamischer Systeme	158
8.2.1	Ein Schnellkurs in Thermodynamik	158
8.2.2	Thermodynamik von Legierungen	160
8.2.3	Importance sampling	162
8.2.4	Der Metropolis-Algorithmus	166
8.2.5	Auswertung von Monte-Carlo-Simulationen	168
8.2.6	⊗ Der Metropolis-Algorithmus im Detail	170
8.3	Anwendungen	173
8.3.1	Cluster-Entwicklung	173
8.3.2	Das Ising-Modell	176
8.3.3	Simulation der Rekristallisation	182
8.4	Die kinetische Monte-Carlo-Methode	182

8.5	Pseudo-Zufallszahlen	186
9	Phasensfeldmethoden	189
9.1	Entropie und Freie Energie	189
9.2	Die Phasensfeldmethode	192
9.2.1	Physik von Grenzflächen	192
9.2.2	Diskretisierung der Grenzfläche	193
9.2.3	Das Phasensfeld	194
9.2.4	Phasensfeldvariablen	198
9.2.5	Zeitabhängigkeit und treibende Kraft	199
9.3	Numerische Aspekte	200
9.3.1	Räumliche Diskretisierung	200
9.3.2	Lösen der Bewegungsgleichung	202
9.4	Beispiele für die Phasensfeldmethode	203
9.4.1	Simulation von Gefügeumwandlungen	203
9.4.2	Erstarrungssimulation	206
9.4.3	Rissausbreitung	210
10	Berechnung von Phasendiagrammen	213
10.1	Einführung	213
10.2	Berechnung binärer Systeme	214
10.2.1	Die Entropie einer Mischung	214
10.2.2	Bindungsenthalpie	215
10.2.3	Systeme mit einer kristallographischen Phase	216
10.2.4	Systeme mit zwei unterschiedlichen Phasen	219
10.2.5	Beispiele für binäre Phasendiagramme	221
10.3	Realistische Beschreibung der Freien Enthalpie	223
10.3.1	Temperaturabhängigkeit	223
10.3.2	⊗ Nicht-reguläre Wechselwirkungen	224
10.3.3	⊗ Intermetallische Phasen	224
10.3.4	Mehrkomponentige Systeme	227
10.3.5	Bestimmung der Eingangsgrößen	227
10.4	Numerische Berechnung binärer Phasendiagramme	228

III Mikroskopische Simulationen

11	Versetzungssimulation	233
11.1	Versetzungen	233
11.1.1	Versetzungen und Verformung	233
11.1.2	Spannungsfelder von Versetzungen	234
11.2	Simulation von Versetzungen	235
11.2.1	Modellierung der Versetzungen	235
11.2.2	Die Bewegungsgleichung	236
11.2.3	Kräfte auf Versetzungen	237

11.3 Lösen der Bewegungsgleichung	239
11.3.1 Das Euler-Verfahren	239
11.3.2 Das Runge-Kutta-Verfahren	244
11.4 Beispiele	247
11.4.1 Plastische Verformung eines Einkristalls	247
11.4.2 Versetzungswechselwirkung mit Hindernisfeldern	247
12 Klassische atomistische Simulationen	251
12.1 Einführung	251
12.2 Integration der Bewegungsgleichungen	252
12.2.1 Die Bewegungsgleichung	252
12.2.2 Noch einmal das Euler-Verfahren	253
12.2.3 Der Verlet-Algorithmus	255
12.2.4 Wechselwirkung mehrerer Teilchen	258
12.3 Anfangszustand und Randbedingungen	259
12.3.1 Anfangszustand	259
12.3.2 Periodische Randbedingungen	260
12.4 Potentialfunktionen	262
12.4.1 Das Lennard-Jones-Potential	263
12.4.2 Das Morse-Potential	265
12.4.3 Realistischere Potentiale	265
12.5 Energieminimierung und Monte-Carlo-Methoden	267
12.6 ☞ Messung physikalischer Größen	268
12.6.1 ☞ Druck	268
12.6.2 ☞ Strukturfunktionen	269
12.6.3 ☞ Diffusionskoeffizienten	270
12.6.4 ☞ Korrelationsfunktionen	271
12.7 ☞ Konstanter Druck und konstante Temperatur	271
12.7.1 ☞ Konstanter Druck	271
12.7.2 ☞ Konstante Temperatur	273
12.8 Beispiele für die Molekulardynamik-Methode	274
12.8.1 Rissausbreitung	274
12.8.2 Versetzungsbewegung	274
12.8.3 Deformation eines nanokristallinen Materials	277
13 Dichtefunktionaltheorie	279
13.1 Grundlagen der Dichtefunktionaltheorie	279
13.1.1 Die quantenmechanische Beschreibung von Elektronen	279
13.1.2 Mehrere Elektronen	281
13.1.3 Prinzip der Dichtefunktionaltheorie	283
13.2 Berechnungen mit der Dichtefunktionaltheorie	284
13.2.1 Austauschwechselwirkung	284
13.2.2 Basisfunktionen und Pseudopotentiale	285
13.2.3 Selbstkonsistente Berechnung und Konvergenz	288
13.3 Dichtefunktionaltheorie in der Praxis	290

13.3.1	Relaxation der Ionen und Zellen	290
13.3.2	Magnetismus	292
13.3.3	Simulationen bei endlicher Temperatur	294
13.3.4	Langreichweitige Korrelationen und die van-der-Waals-Kraft	295
13.4	Anwendungsbeispiele	296
13.4.1	Simulation eines Wassermoleküls	296
13.4.2	Stabilität der γ' -Phase in Nickel	297

IV Weitere Verfahren

14	Bildbearbeitung und -analyse	301
14.1	Einführung	301
14.2	Was ist ein Bild?	301
14.3	Filterverfahren	303
14.3.1	Lokale Filter	303
14.3.2	Nicht-lokale Filter	303
14.4	Bildanalyse	309
15	Maschinelles Lernen	311
15.1	Einführung	311
15.2	Regression	313
15.2.1	Regression einer bekannten Funktion	313
15.2.2	Lineare Regression	315
15.2.3	Nichtlineare Regression	319
15.2.4	Regression mit unbekannter Zielfunktion	323
15.2.5	Inverse Parameterbestimmung	325
15.3	Hauptkomponentenanalyse	326
15.4	Neuronale Netze	329
15.4.1	Das Neuron	331
15.4.2	Das Feed-Forward-Netzwerk	333
15.4.3	Lernen: Der Backpropagation-Algorithmus	334
15.4.4	Training	338
15.4.5	Design eines Neuronalen Netzwerks	339
15.4.6	Spezielle Netzwerkarchitekturen und -typen	339
15.5	Data-Mining und Ontologien	343
15.6	Anwendungen	344
15.6.1	Machine-Learning-Potentiale für die Molekulardynamik	345
16	Kopplung von Simulationen	347
16.1	Einführung	347
16.2	Das Repräsentative Volumenelement (RVE)	349
16.2.1	Anforderungen	349
16.2.2	Erzeugung eines Repräsentativen Volumenelements	350
16.2.3	Randbedingungen für Repräsentative Volumenelemente	352

16.3 Sequentielle Kopplung 353

16.3.1 Aufstellen von Materialgesetzen für die Methode der Finiten Elemente . 354

16.3.2 Clusterentwicklung für Monte-Carlo-Simulationen 355

16.3.3 Kopplung über Randbedingungen 355

16.4 Direkte Kopplung 356

16.4.1 Die FE²-Methode 356

16.4.2 Direkte Kopplung unterschiedlicher Simulationsmethoden 357

16.4.3 Multiphysik 359

V Numerische Methoden

17 Numerische Verfahren 365

17.1 Rundungsfehler 365

17.2 Diskretisierung von Funktionen 366

17.2.1 Das Kontinuum 366

17.2.2 Diskretisierung auf einem regelmäßigen Gitter 367

17.2.3 Diskretisierung auf einem unregelmäßigen Gitter 367

17.2.4 Fourier-Transformation 368

17.3 Diskretisierung von Ableitungen 370

17.3.1 Finite Differenzen 370

17.3.2 Finite Elemente 372

17.3.3 Fourier-Transformation und Ableitungen 372

17.4 Integrationsverfahren 373

17.4.1 Gauß-Integration 373

17.4.2 Monte-Carlo-Integration 374

17.5 Gleichungslöser und Minimierungsverfahren 374

17.5.1 Lösen linearer Gleichungen 374

17.5.2 Lösen nichtlinearer Gleichungen 376

17.5.3 Minimierungsverfahren 377

17.5.4 Lösen gewöhnlicher Differentialgleichungen 384

17.5.5 Lösen partieller Differentialgleichungen 386

17.6 Allgemeine Hinweise zu Simulationen 387

17.6.1 Grundlagen der Modellerstellung 387

17.6.2 Symmetrien und Randbedingungen 388

17.6.3 Einfluss der Eingangsparameter 388

17.6.4 Wahl der Diskretisierung 389

17.6.5 Konvergenzprobleme 389

17.6.6 Verifikation und Validierung 391

Anhang 393

A Vektoren und Tensoren 395

A.1 Was ist ein Tensor? 395

A.1.1	Skalare	395
A.1.2	Vektoren	395
A.1.3	Tensoren	398
A.1.4	Tensoroperationen	399
A.1.5	Tensoren höherer Stufe	402
A.1.6	Eigenwerte und Eigenvektoren	403
A.1.7	Tensorinvarianten	404
A.2	Felder und ihre Ableitungen	405
B	Funktionale und funktionale Ableitungen	407
B.1	Funktionale	407
B.2	Funktionale Ableitung	407
	Literaturverzeichnis	411
	Stichwortverzeichnis	423