Fraunhofer INT

Methoden für Multiskalensimulationen

Dr. Marcus John, Stefan Reschke, Dr. Matthias Grüne, Jürgen Kohlhoff

Der Wunsch, Werkstoffe für bestimmte Anwendungen gezielt am Rechner zu entwickeln, um den Rückgriff auf zeitaufwendige und kostspielige Experimente zu reduzieren, ist seit jeher ein wichtiger Grund für die Nutzung und Weiterentwicklung numerischer Methoden im Bereich der Werkstoffwissenschaften. Zwar wäre es prinzipiell möglich, Materialeigenschaften allein mit Hilfe quantenmechanischer Methoden zu berechnen. Allerdings sind solche Simulationen so aufwendig, dass sie nur für relativ kleine Systeme von einigen hundert Atomen in Frage kommen. Hinzu kommt, dass die meisten Werkstoffe eine hierarchische Struktur aufweisen. So werden die mechanischen Eigenschaften eines Materials nicht allein durch die Wechselwirkungen auf atomarer Ebene bestimmt, sondern insbesondere durch größere Strukturen wie beispielsweise Kristallite, Korngrenzen oder Poren, die Ausdehnungen von einigen hundert Nanometern bis in den Mikrometerbereich haben können. Die realistische Beschreibung eines Werkstücks muss sich also über viele Größenordnungen erstrecken. Man spricht daher von einer Multiskalenproblematik. Derartige Fragestellungen spielen nicht nur in den Werkstoffwissenschaften eine Rolle, sondern z.B. auch im Bereich der Protein-Faltung oder bei der Simulation von Sternatmosphären.

Für die Lösung der geschilderten Probleme greift man auf Multiskalensimulationen zurück. Hierbei handelt es sich allerdings nicht um eine einheitliche Methode, sondern um einen Strauß sehr unterschiedlicher Ansätze, die alle darauf abzielen, Multiskalenprobleme numerisch handhabbar zu machen. Die meisten Ansätze machen sich dabei jene bereits etablierten Methoden zunutze, die für jede der betrachteten Skalen einzeln entwickelt wurden. Auf Ebene der einzelnen Atome ist dies beispielsweise die Dichtefunktionaltheorie. Auf der makroskopischen Ebene des Werkstücks, das mittels der Kontinuumsmechanik beschrieben werden kann (Kontinuumsebene), ist dies die Methode der finiten Elemente. die größte Herausforderung bei der Entwicklung geeigneter Multiskalenmethoden liegt also in einer akkuraten und numerisch stabilen Kopplung der Modellierungsansätze, die für die unterschiedlichen Ebenen verwendet werden.

Die verwendeten Konzepte für diese Kopplung lassen sich in zwei Kategorien unterteilen, je nachdem ob die Skalen sequenziell oder parallel behandelt werden. Im ersten Fall werden die Simulationsergebnisse einer feinen Skala als Eingangsgrößen für die nächst gröbere Skala benutzt. Ein Beispiel hierfür ist die Entwicklung von Kraftfeldern, die auf den Ergebnissen quantenmechanischer Rechnungen einiger weniger Atome beruhen und dann für molekulardynamische Simulationen benutzt werden, die einige Millionen Atome umfassen können. Gegenüber klassischen Verfahren, die für die Kopplung experimentelle Daten benutzen, hat dieser Ansatz den Vorteil, dass die Kraftfelder genauer sind und einen größeren Gültigkeitsbereich besitzen.

Eine solche molekulardynamische Simulation kann in einem weiterführenden Schritt an eine Beschreibung des Werkstoffs mit Hilfe der Kontinuumsmechanik angekoppelt werden. Hierfür ist ein aufwendiger mathematischer Formalismus nötig, der zu einem System gekoppelter Differentialgleichungen führt. Diese können dann mittels der Methode der finiten Elemente (FEM) gelöst werden. Sequenzielle Methoden eigenen sich vor allem dann, wenn man an den gemittelten Beobachtungsgrößen eines Systems interessiert ist und nur eine schwache Kopplung zwischen den unterschiedlichen Skalen besteht.

Für nicht-lineare Phänomene mit einer starken Kopplung der Skalen, wie die Rissausbreitung in einem Kompositwerkstoff, sind sie ungeeignet. In solchen Fällen muss auf eine simultane Beschreibung der betrachteten Skalen zurückgegriffen und die Kopplung der skalenspezifischen Modelle entsprechend gestaltet werden. Ein Nachteil dieser Ansätze ist allerdings, dass sie deutlich rechenintensiver sind.

Eine weit verbreitete Methode dieses Typs ist die Quasikontinuumsmethode. Deren Grundannahme ist, dass die Einflusszone atomarer Prozesse selten größer ist als wenige Nanometer, während der Rest des Festkörpers gut durch die Gesetze der Kontinuumsmechanik beschrieben wird. Somit muss eine Beschreibung auf atomarer Ebene nur in jenem begrenzten Bereich benutzt werden, wo seine Belastung besonders groß ist und Störungen der Kristallstruktur auftreten. Der große Rest des Werkstückvolumens kann mittels der Methode der finiten Elemente simuliert werden.

Ursprünglich wurde für die atomistische Beschreibung des Werkstoffs auf Kraftfelder zurückgegriffen. Diese sind jedoch für die Beschreibung von Fremdatomen oder Prozessen, bei denen chemische Bindungen verändert werden, ungeeignet. Daher ist man mittlerweile dazu übergangen, diesen Bereich mittels Dichtefunktionaltheorie zu beschreiben und den Einfluss der Elektronen explizit zu berücksichtigen. Im umliegenden Bereich bleiben diese unberücksichtigt und man beschreibt die Wechselwirkungen zwischen den Atomen mittels eines Potentialmodells. Eine solche schrittweise Reduzierung der berücksichtigten Freiheitsgrade des Systems stellt den Kern jeder Multiskalenmethode dar.

Bei der Anbindung des atomistisch beschriebenen Bereichs an den des Kontinuums ist besondere Vorsicht walten zu lassen. Beim Übergang von einer diskreten zu einer kontinuierlichen Beschreibung des Bauteils ist zu vermeiden, dass die rechnergestützte Simulation in diesem Bereich zu einem unphysikalischen Verhalten des Werkstoffs führt. Hierfür steht eine Reihe aufwendiger und komplizierter Ansätze zur Verfügung, die alle spezifische Vor- und Nachteile haben. Eine Stärke der Quasikontinuumsmethode ist ihre Fähigkeit, die benutzte Auflösung den lokalen Gegebenheiten innerhalb des Werkstücks anzupassen. Momentan lassen sich hiermit allerdings keine dynamischen Simulationen durchführen.

Die hier vorgestellten Methoden behandeln vor allem räumliche Multiskalenprobleme. Die Entwicklung entsprechender Methoden für die Behandlung unterschiedlicher Zeitskalen, die in einem Prozess von Bedeutung sein können, ist noch nicht so weit fortgeschritten wie im Falle der räumlichen Skalen. Allerdings ermöglicht die Simulation von Systemen mit einer größeren räumlichen Ausdehnung meist auch die Betrachtung längerer Zeitskalen.

Noch steht die Entwicklung von Multiskalenmethoden am Anfang. Es ist aber davon auszugehen, dass es diese Methoden künftig nicht nur ermöglichen werden, die interessierenden Eigenschaften bekannter Werkstoffe numerisch zu berechnen, sondern auch die Eigenschaften bisher unbekannter Werkstoffe vorherzusagen. Auf diese Weise wäre dann das gezielte, computergestützte Design von Werkstoffen für spezielle Anwendungen möglich.

***Das Fraunhofer INT Appelsgarten 2, 53879 Euskirchen berichtet in jeder Ausgabe exklusiv über Werkstofftrends**