



DR. DIETMAR HIETEL  
DR. RAIMUND WEGENER  
ABTEILUNGSLEITER



## MATHEMATISCHE MODELLIERUNG, SIMULATION UND OPTIMIERUNG VON TRANSPORTVORGÄNGEN

Unsere Abteilung Transportvorgänge modelliert komplexe industrielle Fragestellungen und entwickelt effiziente Algorithmen zur numerischen Simulation und Optimierung dieser Probleme. Die Aufgabenstellungen liegen im technisch-naturwissenschaftlichen Kontext zum Beispiel in den Bereichen Strömungsdynamik, Strukturmechanik, Strahlungstransport oder Optik. In der Modellierung führen sie auf partielle Differentialgleichungen, die zumeist als Transportgleichungen zu charakterisieren sind.

Aus Sicht der industriellen Unternehmen, mit denen wir gemeinsam arbeiten, geht es typischerweise um das Auslegen von Produktionsprozessen und Optimieren von Produkten. Unser Angebotspektrum erstreckt sich von Kooperationsprojekten mit den ingenieurwissenschaftlich-orientierten Abteilungen für Forschung und Entwicklung der Partnerfirmen über Studien mit Auslegungs- und Optimierungsvorschlägen bis hin zu Softwarelösungen – vom Baustein bis zum kompletten Tool.

Im Jahr 2019 waren wir mit einem ausgeglichenen Haushalt bei sehr guten Industrie-Erträgen wirtschaftlich sehr erfolgreich. Neben einer Reihe hervorragender Dissertationen haben wir eine nochmals gesteigerte Publikationsrate auf hohem Niveau zu verzeichnen. So stammen u. a. allein drei von insgesamt 15 der »Top Ranking Papers« der internationalen Tagungsberichte (Proceedings) der letzten ECMI-Konferenz aus unserer Abteilung (siehe News). Durch die Akquisition einiger großer Projekte haben wir eine gute Grundlage für die kommenden Jahre geschaffen.

### Kontakt

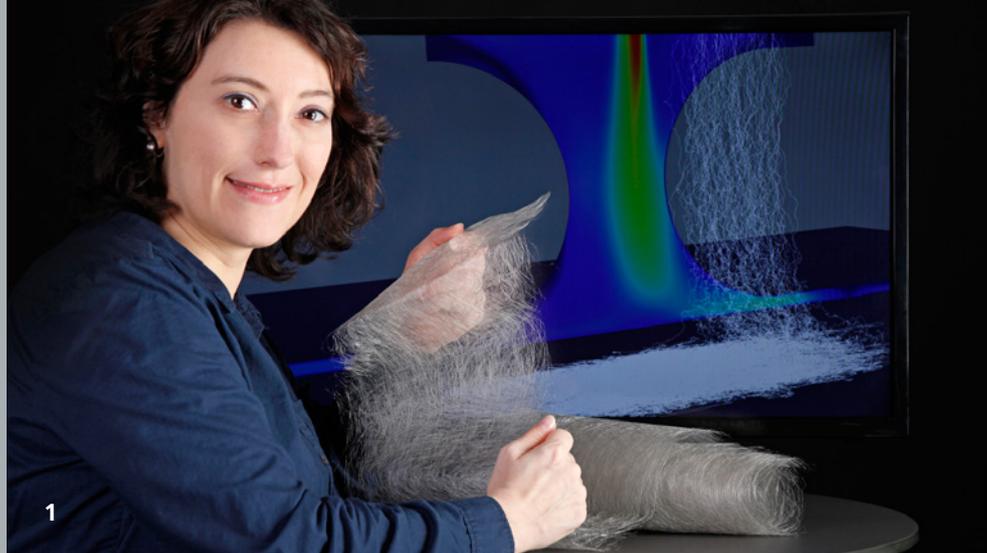
dietmar.hietel@itwm.fraunhofer.de  
raimund.wegener@itwm.fraunhofer.de  
[www.itwm.fraunhofer.de/tv](http://www.itwm.fraunhofer.de/tv)

---

## SCHWERPUNKTE

- Flexible Strukturen
  - Strömungsdynamische Prozessauslegung
  - Gitterfreie Methoden
  - Energienetze und Modellreduktion
- 





## FIDYST – SIMULATIONSTOOL FÜR EINE OPTIMIERTE PRODUKTION VON VLIESTOFFEN

1 *Reales Vlies und Simulation im Hintergrund*

Unser Fiber Dynamics Simulation Tool FIDYST ermöglicht es, die Prozesse bei der Herstellung von Vlies zu prognostizieren. Somit simulieren und optimieren die Textilherstellenden die Qualitätseigenschaften ihrer Produkte anstatt auf kosten- und energieaufwendige Methoden von Versuch und Irrtum zurückzugreifen.

Vliesstoffe durchdringen unseren Alltag. Sie werden für Hygieneprodukte eingesetzt, finden Verwendung als Feuchttücher für die Körperpflege und sind von großer Bedeutung für Medizinprodukte. Aber auch als Werkstoffe für den Leichtbau oder in der Automobilindustrie werden Vliesstoffe eingesetzt.

### **Jährliche Wachstumsraten für Vliesstoffproduktion bei 5,7 Prozent**

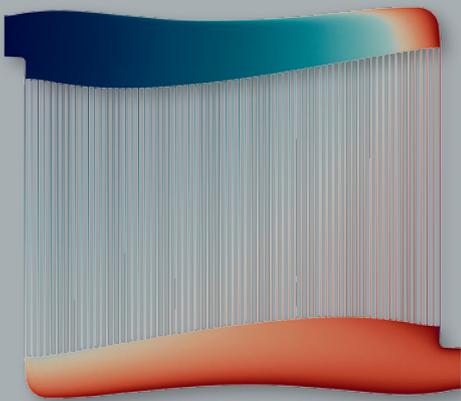
In Europa wurden im Jahr 2018 ca. 2,8 Millionen Tonnen Vliesstoff produziert. Die jährliche Wachstumsrate lag 2018 bei 5,7 Prozent. Ein Treiber für dieses Wachstum ist die steigende Nachfrage nach Hygieneprodukten. Aber auch der Einsatz von Vliesstoffen für neue Produkte und die damit verbundenen unterschiedlichen Anwendungen treiben das Wachstum an.

### **FIDYST verbessert die Qualität von Vliesstoffen**

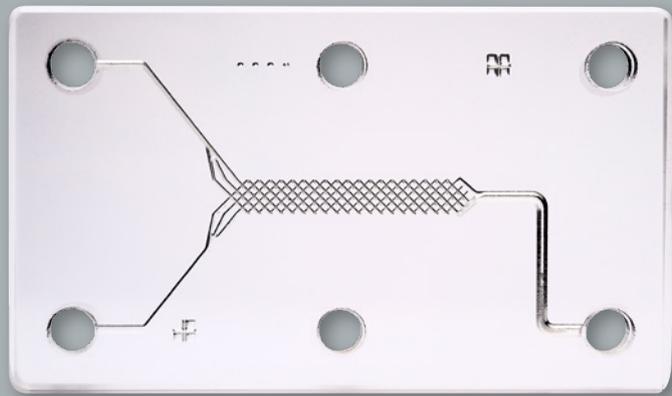
Werden Vliesstoffe für neue Produkte entwickelt, spezifizieren Textilingenieurinnen und -ingenieure zunächst die Materialeigenschaften, die dafür benötigt werden. Danach konstruieren sie einen Produktionsprozess, mit dem Vliesstoffe mit den gewünschten Eigenschaften hergestellt werden. Beim Design und der Auslegung von aerodynamisch getriebenen Produktionsprozessen spielt unser Simulationstool FIDYST eine wichtige Rolle. Die Simulation des Prozesses und der Mikrostruktur des Vliesstoffes zeigt bereits vor dem Bau oder Umbau der Produktionsanlage, welche Qualitätseigenschaften der Vliesstoff haben wird. Damit bewerten Ingenieurinnen und Ingenieure vorab ihre Modifikationen und optimieren so die Qualitätseigenschaften der Vliesstoffe.

### **FIDYST spart Energie im Produktionsprozess**

Aerodynamische Produktionsprozesse für Vliesstoffe sind energie-intensiv. Gebläse sind häufig überdimensioniert, um sicher den Transport der Fasern leisten zu können, die den Vliesstoff formen. Um die stochastische Struktur zu erzeugen, die charakteristisch für Vliesstoffe ist, werden stark turbulente Luftströmungen eingesetzt. FIDYST simuliert die Dynamik der Fasern in der turbulenten Luftströmung. Damit bietet FIDYST als einziges Simulationstool die Möglichkeit, die Wirkung der Luftströmung auf die Fasern zu analysieren. So optimieren die Textilherstellenden gezielt die Luftströmung in aerodynamischen Produktionsprozessen und senken die Energiekosten.



1



2

© Little Things Factory GmbH (www.ltf-gmbh.de)

## SIMULIEREN UND OPTIMIEREN VON CHEMISCHEN MIKROREAKTOREN

Die chemische Produktion in kleinen Reaktoren gilt in der Verfahrenstechnik als effektiv und sicher. Der Einsatz von Mikroreaktoren verspricht außerdem eine schnellere Verfahrensentwicklung. Am Fraunhofer ITWM entwickeln wir Methoden zur Simulation und Auslegung solcher Mikroreaktoren.

Mikroreaktoren sind bei der Herstellung von chemischen Komponenten im Einsatz. Das Grundprinzip ist einfach: Zwei Ausgangsstoffe werden in einem feinen Kanal zusammengeführt. Sie fließen durch den Kanal und reagieren miteinander. Je nach Art der Reaktion muss entweder Wärme hinzu- oder abgeführt werden. Am Ende des Kanals ist aus den Ausgangsstoffen das gewünschte Endprodukt entstanden.

Aber ganz so einfach ist die Realität natürlich nicht: Zur Erhöhung der Produktivität verlaufen meist viele Kanäle parallel. Durch komplizierte Kanalstrukturen laufen mehrere Reaktionen hintereinander ab. Die Kanäle sind in Platten eingepreßt und durch Stapelung entsteht ein ganzer Reaktorblock.

### Passendes Simulationsmodell ermöglicht Prozessoptimierung

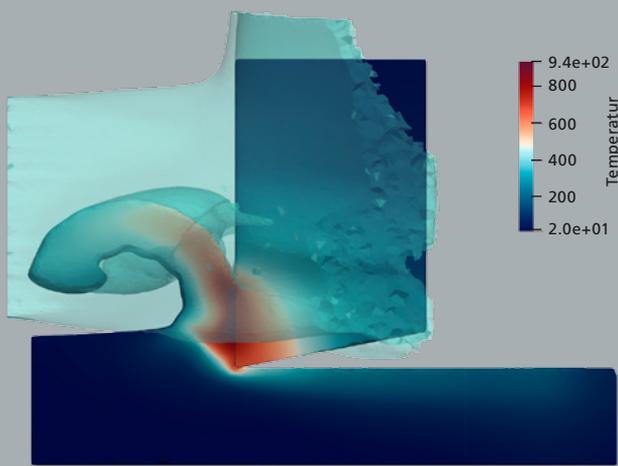
Wir simulieren den Mikroreaktor mit einem Modell, das die relevanten physikalischen Effekte miteinander koppelt. Innerhalb der Kanäle beschreiben wir Wärme- und Stofftransport sowie die Durchmischung. Aus der Temperatur und den Stoffkonzentrationen ergibt sich die Reaktionsgeschwindigkeit, mit der Ausgangsstoffe in Endprodukte umgewandelt werden. Die Reaktion verbraucht bzw. erzeugt Wärme, die über die Platten ausgetauscht wird. Auch ein eventuell vorhandener Kühlmittelkreislauf zur Regulierung der Reaktortemperatur berücksichtigen wir im Modell.

Durch die Simulation kann der Zustand des Reaktors überwacht und gesteuert werden. Aus wenigen optimal platzierten Messsonden berechnet die Simulation den Zustand des Systems. Sie dient dann als virtuelle Sonde und liefert verlässliche Temperatur- und Konzentrationsdaten für nahezu jede Position. Basierend auf dem Simulationsmodell entwickeln wir Methoden zur Formauslegung der Kanalstruktur. Durch eine geschickte Wahl der Form von Zuführgeometrien lassen sich beispielsweise gleiche Bedingungen hinsichtlich Durchfluss und Temperaturniveau zwischen den Kanälen herstellen – Produktivität und Stabilität des Prozesses werden optimiert.

1 *Formoptimierte Kanalstruktur!*

2 *Mikroreaktor mit Kanalstruktur zur Durchmischung von zwei Ausgangsstoffen*





1

© istockphoto/Phuchit

## ZERSPANEN MIT MESHFREE

1 *Simulation der Spanabhebung unter Berücksichtigung der Kühlwirkung durch KSS*

Zerspanen ist Grundlage vieler Industrieprozesse und befasst sich in der Praxis mit Form- und Oberflächenveränderungen eines Werkstücks. Mit unserer Software MESHFREE setzen wir die gitterfreie Finite-Pointset-Methode (FPM) für die hochkomplexe Simulation dieser Zerspanprozesse ein.

In spanabhebenden Fertigungsverfahren, wie beispielsweise Drehprozessen, werden Werkzeuge und Werkstücke durch Wärme geschädigt, die durch Reibung und plastische Deformation entsteht. Zur Minimierung des Werkzeugverschleißes setzen Unternehmen in der Praxis daher häufig Kühlschmiermittel (KSS) ein. Das führt zu stärker gebogenen Spänen und damit zu kürzeren Kontaktzeiten von Werkzeug und Werkstück. Die Interaktion von KSS, Werkstück und Werkzeug ist komplex und die Zusammenhänge sind noch nicht vollständig verstanden – das Thema ist sowohl unter Anwendungsaspekten, als auch aus Sicht der Grundlagenforschung spannend.

### Kopplungen und Zusammenhänge simulieren

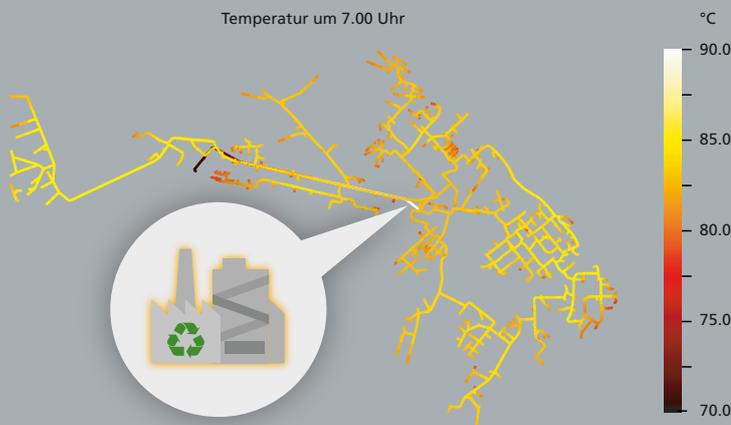
Eine große Herausforderung ist es, den Prozess numerisch abzubilden, denn dabei müssen mehrere komplexe Kopplungen realisiert werden. Es gibt zwar bereits Simulationsmodelle für eine gesamtheitliche Betrachtung von KSS, Werkzeug und Werkstück, diese sind jedoch nicht vollständig gekoppelt. Konkret heißt das, dass das KSS in den bestehenden Simulationsmodellen – anders als in der Realität – keinen Einfluss auf die mechanische Spannbildung hat. Ohne diese Rückkopplung werden jedoch die Zusammenhänge nicht vollständig abgebildet.

### Gitterfreier Ansatz als entscheidender Vorteil von MESHFREE

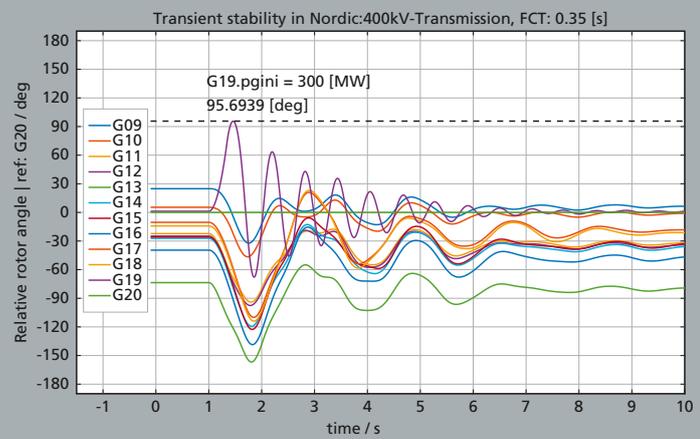
In Kooperation mit dem Institut für Werkzeugmaschinen und Fabrikbetrieb der TU Berlin haben wir ein rückgekoppeltes Modell in unserer Software MESHFREE entwickelt. MESHFREE basiert auf der FPM. Unser gitterfreier Ansatz bietet den entscheidenden Vorteil gegenüber klassischen Finite-Elemente-Methoden (FEM), dass Bestandteile eines Gitters nicht mehr Ausgangspunkt von Berechnungen der Vorgänge sind. Wir nutzen eine Punktwolke, in der jeder Punkt frei positionierbar ist. MESHFREE kommt somit auch in sich verformenden Simulationsdomänen zum Einsatz, wie den sich abhebenden Span – ohne zeitintensive Neuvernetzung.

Simulation und Experiment zeigen sehr gute Übereinstimmung. Aufgezeigte Diskrepanzen führen wir darauf zurück, dass das Simulationsmodell für KSS weder Schmierung noch Verdampfung abbildet. Die gewonnenen Erkenntnisse liefern uns neue Impulse für zukünftige Forschung.





1



2

## DYNAMISCHE OPTIMIERUNG VON ENERGIENETZEN

Viele der an uns herangetragenen Aufgabenstellungen betreffen den optimalen Betrieb von Netzwerken wie Stromübertragungs-, chemische Prozess- oder Fernwärmenetze. Um hier unabhängig von Lizenzbeschränkungen nicht nur Studien, sondern auch Software anzubieten, haben wir in den letzten Jahren die Simulations- und Optimierungsumgebung AD-Net entwickelt.

Im Rahmen des BMWi-Verbundprojekts MathEnergy haben wir unsere AD-Net Softwareplattform so erweitert, dass sie in der Lage ist, transiente Stabilitätsanalysen für Stromnetze durchzuführen. D.h. für eine Liste kritischer Netzkomponenten simulieren wir, wie viel Zeit maximal verstreichen darf, bis die Komponente nach einem Schaden vom Netz genommen wird – ohne den Rest des Netzes in einem unkontrollierbaren Zustand zurückzulassen. Zusammen mit der Abteilung »Optimierung« entwickeln wir für das Unternehmen Bayer das Modul AD-Net Distillation, welches Dauer und Ausbeute von Batch-Destillationsprozessen optimiert und unbekannte Übergangsparameter identifiziert.

### Mit AD-Net-Modulen Energienetze simulieren und optimieren

Im Bereich Fernwärme haben wir u.a. das Netz der Technischen Werke Ludwigshafen untersucht. Eine Müllverbrennungsanlage (MVA) liefert hier ein konstantes Wärmedargebot, während der Verbrauch über den Tag stark schwankt. Deshalb mussten bisher an kälteren Tagen Gaskessel zugeschaltet werden, obwohl die Leistung der MVA im Mittel ausgereicht hätte. Mit AD-Net Fernwärme werden nun Einspeisestrategien bestimmt, die eine Zusatzfeuerung vermeiden, ohne vertraglich garantierte Anschlussbedingungen zu verletzen. Mit herkömmlichen quasistationären Simulatoren sind die zugrundeliegenden Laufzeiteffekte prinzipiell nicht zu erfassen.

Den Kern von AD-Net bildet eine C++-Template-Bibliothek, die allgemeine Funktionalität wie die Definition von Variablen, das Zusammenschalten von Komponenten, adaptive Zeitintegration oder die Anbindung an Optimierungssoftware bereitstellt. Die jeweiligen Anwendungsmodule werden dann durch Ableitung spezieller Komponentenmodelle, Events etc. erzeugt. Dabei reicht es, die jeweiligen differential-algebraischen Gleichungen in lokalen Größen zu formulieren. Das Besondere an AD-Net ist die Verwendung von automatischem Differenzieren. Dies liefert linearisierte Beziehung zwischen Stell- und zu optimierenden Größen, die dann iterativ vom angebotenen Optimierungstool wie IPOPT angefordert werden. In Zukunft werden wir verstärkt Sektorkopplung in den Fokus nehmen.

1 Temperaturverteilung im Fernwärmenetz der Technischen Werke Ludwigshafen während morgendlicher Leistungsspitze bei optimierter Einspeisung

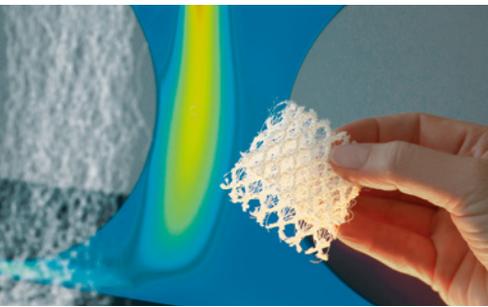
2 Nordic32 Benchmark-Netz: Stabilisierung der Rotorwinkel nach einer Störung





### VIRTUELLES SPINNEN IM PROJEKT VISPI

Im Spinnprozess wird geschmolzene Spinnmasse durch feine Düsen gepresst und danach durch Verzug und Abkühlung durch einen Luftstrom zu Fasern versponnen. In den letzten Jahren haben eine Reihe von Forschungsaktivitäten bei uns am Fraunhofer ITWM die Grundlage für eine umfassende Simulation solcher Prozesse geliefert. Im Projekt VISPI entwickeln wir im Verbund eine Simulationssoftware, mit der wir ein breites Spektrum virtuell abbilden und untersuchen. Der LSP Lehrstuhl für Polymerwerkstoffe des Institutes für Werkstoffwissenschaften der Universität Erlangen-Nürnberg bringt dabei Know-how in Polymerphysik und Werkstoffwissenschaften mit ein. Ziel des Validierungsprojektes ist es, dass Ingenieurinnen und Ingenieure mit einem Simulationstool industrielle Spinnprozesse für High-Tech-Fasern entwickeln, auslegen und optimieren. Mehr Informationen unter [www.itwm.fraunhofer.de/vispi](http://www.itwm.fraunhofer.de/vispi)



### DREI TOP RANKING PAPERS AUF DER LETZTEN ECMI

Die 20. Europäische Konferenz zur Industrie-Mathematik (European Conference on Mathematics for Industry, ECMI) fand in Budapest statt. Drei Papers aus unserer Abteilung von insgesamt 15 wissenschaftlichen, internationalen Publikationen wurden beim »Top Ranking Papers« der Konferenz ausgewählt. Thematisch im Fokus standen hier Trockenspinnprozesse und laserinduzierte Thermo-therapie. Die Forschungsbeiträge werden im »Journal of Mathematics in Industry« veröffentlicht.

### TV GOES YOUTUBE – VIDEOS MACHEN FORSCHUNG GREIFBAR

Unsere Abteilung »Transportvorgänge« hat im vergangenen Jahr verschiedene Videos auf Youtube sowie der Website veröffentlicht. Sie zeigen auf einfache und informative Art, was Projektarbeit bei uns heißt, lassen Kunden zu Wort kommen und machen komplexe Themen greifbarer. Unter dem Titel »Simulieren und Optimieren von Trockenspinnprozessen« beleuchten wir z. B. unsere Arbeit rund um Simulationstools, die bei der Herstellung von Polymerfäden unterstützen – komplette Spinnprozesse lassen sich erstmalig simulieren, besser verstehen und deutlich leichter optimieren. Entstanden ist das Video gemeinsam mit unserem Industriepartner, dem Keramikunternehmen BJS Ceramics und Composites, und der Universität Trier. In einem weiteren Video zeigen wir, wie vielfältig unser Simulationstool MESHFREE ist. Porsche macht u. a. als Partner aus der Automobilbranche deutlich, wie sie bereits mehrere Jahre erfolgreich MESHFREE für ihr virtuelles Wassermanagement einsetzen.

