

Zelluläre Automaten als Modellbildungswerkzeug für Fragestellungen aus der Technischen Mechanik

Von der
Fakultät für Maschinenbau
der Technischen Universität Carolo-Wilhelmina zu Braunschweig

von
Dr.-Ing. Michael Müller
aus Hoyerswerda

angenommene Habilitationsschrift

zur Erlangung der Venia legendi
für das Lehrgebiet
„Numerische Methoden der Tribologie“

Braunschweig, 25. November 2015

Schriftenreihe Institut für Dynamik und Schwingungen
TU Braunschweig

Michael Müller

**Zelluläre Automaten als Modellbildungswerkzeug
für Fragestellungen aus der Technischen Mechanik**

Shaker Verlag
Aachen 2016

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Braunschweig, Techn. Univ., Habil.-Schr., 2016

Copyright Shaker Verlag 2016

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-4838-4

ISSN 1865-9101

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Vorwort

Die vorliegende Habilitationsschrift entstand während meiner Tätigkeit als Akademischer Rat auf Zeit am Institut für Dynamik und Schwingungen der Technischen Universität Braunschweig.

Mein größter Dank gilt meinem Mentor, Herrn Prof. Dr. Georg-Peter Ostermeyer, für das entgegengebrachte Vertrauen, die Förderung meiner wissenschaftlichen Laufbahn sowie viele fachliche Diskussionen zu Themen der vorliegenden Arbeit aber auch zu darüber hinaus gehenden Fragestellungen.

Ich möchte mich sehr herzlich bei den Koreferenten dieser Arbeit, Herrn Prof. Dr. Peter Wriggers und Herrn Prof. Dr. Jörn Ihlemann, für die Übernahme der Begutachtung sowie die damit verbundene Zeit bedanken. In die Durchführung des Habilitationsverfahrens mit all seinen Bestandteilen waren viele Hochschullehrer der Fakultät für Maschinenbau involviert, ihnen gilt mein Dank für die Begleitung des Verfahrens und den damit verbundenen Aufwand.

Meinen Kollegen am Institut für Dynamik und Schwingungen danke ich für die ausgesprochen motivierende und kollegiale Arbeitsatmosphäre. Insbesondere gilt mein Dank meinem langjährigen Freund und Bürokollegen Herrn Dr. Frank Schiefer für den angenehmen Arbeitsalltag sowie Frau Katja Hentrich für jedwede Unterstützung in IT-Belangen. Herrn Florian Bubser danke ich für die intensive Zusammenarbeit im Bereich der Mangelgeschmierten Systeme. Mein persönlicher Dank gilt Herrn Mathias Tergeist und Frau Annette Struckmann für das Korrekturlesen der Schrift. Herrn Joshua Merlis möchte ich für die Hilfe beim Korrekturlesen von in Englisch publizierten Texten herzlich danken.

Zum Gelingen der Arbeit haben sehr viele studentische Arbeiten einen substantiellen Beitrag geleistet, was auch das Literaturverzeichnis widerspiegelt. Den Bearbeitern gebührt mein Dank für viele kreative Ideen und gewissenhaft durchgeführte und dokumentierte Studien.

Ohne entsprechenden familiären Halt hätte diese Arbeit nicht entstehen können. Meinen Eltern danke ich für jegliche Unterstützung, die sie mir in allen Lebensphasen haben zuteil kommen lassen. Nicht zuletzt gilt mein besonderer Dank meiner Frau Kathrin sowie meinen Kindern Annalena, Mariella und Nicolas für den großen Rückhalt und die zeitlichen Entbehrungen, die mit der Anfertigung einer solchen Schrift verbunden sind.

Inhaltsverzeichnis

Symbolverzeichnis	III
1 Einleitung	1
2 Grundlagen und klassische Anwendungsfelder	3
2.1 Definition und Bestandteile eines Zellulären Automaten	4
2.2 Anwendungen in der Systemtheorie	5
2.3 Anwendungen in der Soziologie	8
2.4 Anwendungen in der Biologie, Ökologie und Chemie	13
2.5 Anwendungen in der Physik und der Mechanik	18
3 Vergleich mit herkömmlichen Verfahren am Beispiel der Diffusion	30
3.1 Zelluläre Automaten-Modelle	32
3.1.1 Ein <i>random walk</i> -Modell	32
3.1.2 Ein Modell mit Wärmeaustausch zwischen benachbarten Zellen . .	41
3.2 Vorbemerkungen zur Vergleichbarkeit	43
3.3 Finite Differenzen Methode	45
3.4 Finite Volumen Methode	51
3.5 Finite Elemente Methode	53
3.5.1 Lineares Hexaederelement	55
3.5.2 Lineares Viereckelement	61
3.6 Netzfremde Methoden	63
3.7 Diskrete Elemente Methode	66
3.8 Randelemente Methode	67
3.9 Einfluss der Methode zur Zeitintegration	68
3.9.1 Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung	68
3.9.2 Implizites Euler-Verfahren	70
3.10 Bemerkungen zum Vergleich der Verfahren für die Gleichungen der Kontinuumsmechanik	70
3.11 Schlussfolgerungen zum Vergleich zwischen Zellulären Automaten und den erläuterten herkömmlichen Methoden	72
4 Einordnung ausgewählter Modelle	75
4.1 Reaktions-Diffusions-Systeme	75
4.2 Modelle zur Wellenausbreitung	82
4.3 Die Methode der Movable Cellular Automata	87
4.4 Ein Materialgesetz für Polymere unter Verwendung binärer Bindungseigenschaften	90

5	Systemtheoretische Betrachtungsweise	95
5.1	Modellbildungskonzepte	95
5.2	Selbstorganisation	102
5.3	Empfehlungen zur Anwendung Zellulärer Automaten	105
6	Ausgewählte weitergehende Zelluläre Automaten-Modelle	107
6.1	Verschleißdynamik bei tribologischen Prozessen	107
6.2	Silizierungsprozess bei Kohlenstofffaser-verstärkten Keramiken	114
6.3	Ein erweitertes <i>random-walk</i> -Modell zum Auffinden von Minima bei diskreten Systemen	122
6.4	Neuartige Modelle zur Mangelschmierung	130
7	Zusammenfassung und Ausblick	139
	Literaturverzeichnis	141
	Anhang	151
A.1	Anhang: Häufig verwendete 2D-Diskretisierungen und Nachbarschaften . . .	151
	Bildnachweise	153

Symbolverzeichnis

Häufig verwendete Formelzeichen

Formelzeichen	Bedeutung	Einheit
a	Temperaturleitfähigkeit	m^2/s
c	Stoffmenge	mol/m^3
D	Diffusionskoeffizient	m^2/s
N	Anzahl der Nachbarn	/
T	Temperatur	K
t	Zeit	s
Δt	Zeitinkrement	s
$\underline{\underline{C}}$	System-Kapazitätsmatrix	
$\underline{\underline{K}}$	System-Wärmeleitmatrix	

Häufig verwendete Indizes

Index	Bedeutung
$()^t$	die Konfiguration zu Schritt t betreffend
$()^{t+1}$	die Konfiguration zu Schritt $t + 1$ betreffend
$()^{ZA}$	die Methode der Zellulären Automaten betreffend
$()^{FD}$	die Methode der Finiten Differenzen betreffend
$()^{FE}$	die Methode der Finiten Elemente betreffend
$()^{NFSt}$	die Netzfremde Methode in der starken Formulierung betreffend
$()^{NFSc}$	die Netzfremde Methode in der schwachen Formulierung betreffend
$()^{DEM}$	die Diskrete Elemente Methode betreffend
$()^{RE}$	die Randelementemethode betreffend
$()_n$	den Nachbarn einer Zelle betreffend