

Zusammenfassung der Promotionschrift

**Isogeometrische und CAD-basierte Methoden
zur Form- und Topologieoptimierung:
Sensitivitätsanalyse, Bézier-Elemente und
Phasenfeldeanwendungen**

DISSERTATION

zur Erlangung des akademisches Grades
Doktor-Ingenieur (Dr.-Ing.)

an der Fakultät Bauingenieurwesen
der Bauhaus-Universität Weimar

vorgelegt von

Jorge Alberto López Zermeño

Geboren am 24. Oktober 1988 in Morelia, Mexiko

Mentor: Prof. Dr.-Ing. Timon Rabczuk

Status der Doktorand: Intern

Weimar, Juli 2021

Problemstellung und Zielsetzung der Arbeit

1. Die Finite-Elemente Methode (FEM) wird zur Lösung von partiellen Differentialgleichungen (PDG) im Kontext von komplexer Geometrien verwendet. Dazu muss ein geometrisches Modell in die FEM-Software importiert werden. Dieses Modell wird typischerweise in einer Computer-Aided Design (CAD) Software erstellt. FEM und CAD verwenden jedoch unterschiedliche Ansätze für die mathematische Beschreibung der Geometrie. Daher muss ein Netz erstellt werden, das für die Analyse geeignet ist. Die Vernetzungserstellung ist eine komplexe Aufgabe und somit sehr zeitaufwendig. Besonders bei iterativer Lösungsansätze, wie bei Problemen der Form- und Topologieoptimierung, ist der Zeitaufwand signifikant hoch.
2. In dieser Arbeit wird die Integration von CAD-Modellierungen und Analysen zur Form- und Topologieoptimierung untersucht. Die Integration von Design-Anwendungen in die Analysephase hat zwei entscheidende Vorteile. Erstens wird dadurch die Analysephase exakter, da die PDG nicht mit einer angenäherten Geometrie, sondern mit einem präzisen CAD-Modell berechnet wird. Darüber hinaus wird die Genauigkeit der Optimierung durch die direkte Verbindung zwischen dem Design- und dem Analysemodell erhöht. Zweitens wird die Rechenzeit deutlich reduziert, da die Gittererzeugung vermieden wird.
3. Das Hauptziel dieser Arbeit ist die Entwicklung von numerischen Werkzeugen, die die CAD- und Analyseprozess vereinen. Diese Werkzeuge sollen bei der Form- und Topologieoptimierung eingesetzt werden. Dabei werden drei unterschiedliche Probleme untersucht. Die spezifischen Zielsetzung der einzelnen Arbeitsschritte werden nachstehend näher erläutert:
 - a. Das erste spezifische Ziel ist die Automatisierung der Sensitivitätsanalyse im Rahmen einer isogeometrischen Strukturformoptimierung.
 - b. Desweiteren galt die Zielsetzung der Entwicklung eines CAD-Begrenzungsflächenmodells mit unstrukturierten Elementen, welche die komplexen Geometrien nur mithilfe von Gittererstellung diskretisieren können. Dieser Ansatz soll eine direkte Verbindung mit dem CAD-Modell herstellen, um in einer CAD-basierten Formoptimierung eingesetzt werden zu können.
 - c. Abschließend wird die Entwicklung einer isogeometrischen Topologie-Optimierungsmethode untersucht. Diese Methode soll die hohe Stetigkeit der NURBS- Ansatzfunktionen ausschöpfen.

Stand der Wissenschaft

4. Die Isogeometrische Analyse (IGA) ist ein Framework zur Integration von CAD und FEM Anwendungen. Die Grundidee der IGA ist es, dieselben Ansatzfunktionen zur Modellierung der Geometrie, üblicherweise NURBS, für die Approximation der Lösungsfelder der partiellen Differentialgleichungen zu verwenden.
5. Wenn gradientenbasierte Optimierungsalgorithmen verwendet werden, ist die Sensitivitätsanalyse für die Lösung von Optimierungsproblemen unerlässlich. Dafür kann Automatisches Differenzieren (AD) exakte Gradienten berechnen. Dabei wird der Berechnungsgraf von den algebraischen Operationen gespeichert und die Ableitungen nach den Variablen der Zielfunktion mithilfe der Kettenregel für Ableitung berechnet.

6. Tensorprodukt-NURBS sind für die Modellierung komplexer Geometrien mit scharfen Kanten und/oder Löchern nicht geeignet. Die Verwendung von unstrukturierten Netzen stellt hierfür eine adäquate Lösung dar. Im Zuge dessen sind Dreiecke und Tetraeder für zwei bzw. drei Dimensionen besonders nützlich, da sie eine Vielzahl von geometrischen Bereichen automatisch parametrisieren können. Darüber können Bézier-Elemente, die häufig im CAD verwendet werden, eine exakte CAD-Randdarstellung definieren.
7. Um topologische Änderungen in der Geometrie zu berücksichtigen, können explizite und implizite Geometriemodelle verwendet werden. Explizite Methoden mit IGA benutzen Trimming NURBS-Kurven, um die optimale Lösung zu finden. Die Rechenkosten steigen jedoch an, wenn die Anzahl der Trimming Kurven erhöht wird. Im Gegensatz dazu ist die Rechenzeit von implizite Methoden, wie die Phasenfeld-Methode, niedriger. Diese Methoden erhalten durch die Lösung einer zeitabhängigen PDG die optimale Geometrie.

Eingesetzte Methoden

8. Zur Lösung von Formoptimierungsproblemen wird ein mehrstufiger Ansatz verwendet. Dieser besteht zum einen aus der Designebene, indem die Design Variablen der Zielfunktion definiert werden, und zum anderen aus der Analyseebene, in welches die Sensitivitätsanalyse berechnet wird. Beide Diskretisierungen beschreiben jedoch exakt die gleiche Geometrie.
9. Die automatisierte Sensitivitätsanalyse findet im Zuge der isogeometrische Strukturformoptimierung Verwendung. Dabei wird das Analysenetz mithilfe der Einfügung von Knoten und Graderhöhung verfeinert, wohlgleich die grobe Diskretisierung für den Entwurf der Struktur beibehalten wird. Der Code zur Berechnung der Zielfunktion und der Nebenbedingungen wird mit einem AD-Ansatz differenziert. Die Ausgabe ist ein Code, der nicht nur die Zielfunktion und die Nebenbedingungen berechnet, sondern auch deren Ableitungen nach der Variablen.
10. Zur Modellierung komplexer Geometrien in zwei Dimensionen werden Bézier-Dreiecke verwendet. Um ein zweidimensionales CAD-Modell mit Bezier-Dreiecken zu beschreiben, werden zunächst die Kontrollpunkte der NURBS-Randdarstellung verwendet, um eine Triangulation zu erzeugen. Danach wird ein „Bézier extraction“ Ansatz benutzt, damit der Rand des Gebiets, das mit den Bézier-Dreiecke diskretisiert wird, identisch mit der ursprünglichen CAD-Randdarstellung ist. Auf diese Weise wird eine direkte Verbindung zwischen den Diskretisierungen des Entwurfs und der Analyse hergestellt. Daher kann die Sensitivitätsanalyse in die Entwurfsdiskretisierung übertragen werden.
11. In drei Dimensionen wird die ursprüngliche CAD-Randdarstellung als eine Ansammlung von NURBS-Flächen dargestellt, die ein Volumen umschließen. Mit einem Gittergenerator (Gmsh) wird ein tetraedrisches Netz erzeugt, welches in ein Bézier-Tetraedernetz umgewandelt wird. Mit Hilfe von einem Punktversionsalgorithmus werden die Koordinaten der Tetraederelemente verändert und die exakte CAD-Geometrie definiert. Diese Methode bietet eine Möglichkeit, um die Sensitivitäten in das ursprünglichen CAD-Modell zu übertragen. Daneben wird eine verformbare Netz-Anwendung erstellt, damit die Gittererstellung bei jeder Iteration vermieden werden kann.
12. Die „Method of Moving Asymptotes“ (MMA) wird als Optimierungsalgorithmus für die Lösung der Formoptimierungsprobleme gewählt. In dieser Arbeit

werden Ansätze zur Formoptimierung entwickelt und mit adäquaten Benchmarks verifiziert.

13. Im Rahmen der CAD-basierten Topologieoptimierung wird eine isogeometrische phasenfeldbasierte Anwendung entwickelt. Dabei beschreiben die Grenzen zwischen zwei Phasen (Festphase und Leerphase) den Rand der Geometrie und lokale diskrete Werte der Phasenfeldvariablen dienen als Parameter der Zielfunktion. Die Gradienten dieser Parameter werden als Funktionsargument von der potentiellen Energie des Phasenfeldes benutzt, um das Phasenfeld in die Abstiegsrichtung zu verändern. Für den Verlauf der Zeit des Phasenfeldes wird die Allen-Cahn Gleichung verwendet.
14. Um die Vorteile von NURBS zur Diskretisierung der Geometrie und der Lösungsfelder zu nutzen, wird der Phasenfeldansatz zur Optimierung flexoelektrischer Strukturen verwendet. In diesem Zusammenhang finden sowohl kubische NURBS als Ansatzfunktionen als auch die adjungierte Methode zur Berechnung der Sensitivitätsanalyse Anwendung. Abschließend werden die Ergebnisse der optimalen flexoelektrischer Geometrien mit den optimalen piezoelektrischen Geometrien verglichen.

Ergebnisse

15. Die Rechenzeit von AD in Rückwärtsmodus ist vergleichbar mit den analytischen Methoden. Dabei ist die Auslastung des Arbeitsspeichers bei der Anwendung von AD sehr hoch. Nichtsdestotrotz kann der AD-Ansatz unter Berücksichtigung der RAM Leistungsfähigkeit den gewöhnlichen numerischen Methoden vorgezogen werden, da er automatisiert ist.
16. In zwei Dimensionen wurden die durch eine Bézier-Diskreditierung ermittelten Sensitivitäten mit den analytischen Gradienten, welche durch den Standard isogeometrischen Ansatz berechnet wurden, verglichen. Da die Ergebnisse dieser Gegenüberstellung präzise sind, konnte die Sensitivitätsanalyse mit Bézier-Dreiecken verifiziert werden. Entsprechende optimale Geometrien wurden entwickelt, auch wenn für jede Iteration ein Bézier-Netz generiert werden muss.
17. Die Verwendung der verformbaren Netz-Anwendung in drei Dimensionen hat die Berechnungsgeschwindigkeiten des Optimierungsprozesses reduziert. Im Vergleich zu einem „Mesh regeneration“ Ansatz ist die Zeit, die für eine optimale Lösung benötigt wird deutlich geringer, wenn das Gitter für jede Iteration verformbar ist. Dieser Berechnungseffizienz ist mit verfeinerten Netzen höher und kann doppelt so schnell durchgeführt werden.
18. Unterschiedliche Geometrien, Randbedingungen und Werkstoffparameter wurden zur Bestätigung der numerischen Robustheit des Topologieoptimierungsansatzes berücksichtigt. Im Vergleich zur Piezoelektrizität ist der elektrische Output von optimalen flexoelektrischen Geometrien besser geeignet für auf Biegung beanspruchte Mikroträger. In Gegensatz dazu ist der Output für piezoelektrischen Werkstoffe größer, wenn die Geometrie durch Druckspannungen belastet ist. Im Allgemeinen hebt die Flexoelektrizität den Umwandlungsenergiefaktor des optimalen Ergebnisses hervor, wenn diese zusammen mit der Piezoelektrizität in das numerische Modell integriert wird. Darüber hinaus zeigen die Ergebnisse die Relevanz von Flexoelektrizität in dem Mikromaßstab ($3\sim 5\ \mu\text{m}$).