

Anforderungen zur Prüffähigkeit numerischer Berechnungen

1. Vorwort, Danksagung

Als Sachverständiger befand ich mich mehrfach in der unangenehmen Situation, dass Parteien widersprüchliche Festigkeitsberechnungen von namhaften Institutionen vorlegten. Mangels prüffähiger Dokumentation musste in der Folge eine von Grund auf neue, kostspielige Berechnung in Auftrag gegeben werden.

Auch für behördliche Einreichprojekte werden heute komplexe Berechnungen (Hochwasserschutz, Emissionsschutz etc) gefordert. Ist die Nachvollziehbarkeit nicht gegeben, dann können zB Amtssachverständige die Richtigkeit der Ergebnisse nicht objektiv beurteilen und müssen sich (sehr fragwürdig) mit der Beurteilung der Plausibilität der Ergebnisse begnügen, da eine unabhängige Neuberechnung sowohl für die Behörde als auch für Parteien in der Regel zu aufwendig ist.

Das Nachvollziehen einer prüffähigen Dokumentation erfordert dagegen deutlich geringere Ressourcen und bietet zusätzlich die Möglichkeit, Ergebnisse nach eigenen Gesichtspunkten aussagekräftig aufzubereiten.

Mein besonderer Dank für die gute Zusammenarbeit, viele Hinweise aus der Praxis und die fachliche Expertise gilt Dipl.-Ing. Dr. *Georg Kandler* und Dipl.-Ing. Dr. *Sebastian Wolff* von der DYNARDO Austria GmbH.

2. Anforderungen an technische Dokumentation

Technische Dokumentation bzw Projektdokumentation ist die Zusammenstellung ausgewählter, wesentlicher Daten über Konfiguration, Organisation, Mitteleinsatz, Lösungswege, Ablauf und erreichte Ziele des Projekts (Quelle: DIN 69901).

Grundsätze für die Ausführung ergeben sich analog zu den Vorgaben für Gerichtsgutachten:

- Der Umfang und gegebenenfalls spezifische Anforderungen ergeben sich aus den anzuwendenden Rechtsvorschriften.
- Alle Aussagen müssen verständlich, nachvollziehbar und überprüfbar sein.
- Die herangezogenen Quellen sind anzugeben (zB Normen, Lehrmeinungen, Praxiserfahrung).
- Wenn einzelne Fragen nicht beantwortet wurden, ist darauf hinzuweisen.

3. Bisherige Standards für analytische Berechnungen

Neben der Richtigkeit ist die Nachvollziehbarkeit bzw Prüffähigkeit eine wesentliche Anforderung für jede technische Berechnung, ohne die diese Berechnung unbrauchbar ist.

Bei einer analytischen Berechnung „am Papier“ kann jeder Rechenschritt nachvollzogen werden.

Um analytische Berechnungen mithilfe von Software in gleicher Qualität zu dokumentieren, können Computeralgebrasysteme (CAS) eingesetzt werden. Diese lösen mathematische Aufgaben nicht nur mit Zahlen (wie ein einfacher Taschenrechner), sondern mit symbolischen Ausdrücken (wie Variablen, Funktionen, Polynomen und Matrizen). Konkrete Beispiele für CAS sind etwa Mathcad oder GeoGebra.

4. Vorgangsweise bei numerischen Berechnungen

Bei numerischen Verfahren fehlt diese objektive Nachvollziehbarkeit *per se*, weil die Rechenschritte „im Programm“ erfolgen. Trotzdem bleibt die Prüffähigkeit ein unabdingbares Kriterium einer seriösen, professionellen Berechnung.

Die globale Geometrie wird durch ein Netz in kleine Teilbereiche (finite Elemente) zerlegt, um ein für die direkte Berechnung zu komplexes Objekt (zB ein Bauteil oder ein strömendes Fluid) auf die bekannten Berechnungsmethoden für diese Elemente zurückzuführen.

Dazu sind Annahmen zu treffen:

- ausreichend feines Netz in kritischen Bereichen (zB Gewinde, Gegenströmungen),
- Bewertung des Netzes durch Netzstudien (hierzu wird die Elementgröße schrittweise angepasst [verkleinert oder vergrößert], bis keine wesentliche Veränderung mehr in den Simulationsergebnissen erkannt wird [*h-refinement*]),
- Auswahl geeigneter Elementtypen,
- Überprüfung der Elementformulierungen (das umfasst in der Regel lineare Elementformulierung und quadratische Elementformulierung [*p-refinement*]),
- passende Materialeigenschaften und Materialmodelle (zB Gusseisen),

- passende Anfangsbedingungen (unter anderem Annahmen zur thermischen und mechanischen Belastung),
- passende Randbedingungen (Spannungs-Dehnungsverlauf, Kontaktbedingungen von Baugruppen, etc).

Für die Erstellung der Netze und die Wahl der Elemente sind fundiertes Wissen über die Problemstellung und genaue Kenntnis der eingesetzten Software (zB ANSYS, Abaqus, Nastran, Autodesk CFD, HYDRO_AS-2D, BASEMENT) erforderlich.

Für Anfangs- und Randbedingungen sind einerseits die Feststellung und Beschreibung von Tatsachen (zB Messung des Spannungs-Dehnungsverlaufs), andererseits Abschätzungen aus dem Erfahrungsbereich und Annahmen aus der praktischen Handhabung (zB Vorspannung der Schrauben) notwendig.

Leider werden bei größeren Projekten gerade wegen ihrer numerischen Komplexität selten ausführliche Netzstudien durchgeführt. Die Problematik kann mittlerweile aber mittels Submodellierung (Globalmodell eher grob vernetzt, Submodell für den kritischen Bereich fein vernetzt) stark entschärft werden.

Durch diese subjektiven Einflüsse kann eine FE-Berechnung nicht als Befund qualifiziert werden, sondern stellt ein Gutachten dar, bei dem die Zusammenarbeit mit dem Adressaten der Dokumentation (zB einem Gerichts- oder Amtssachverständigen) wichtig ist.

5. Einfluss der Modellbildung

5.1. Allgemeines

Die Software erledigt viele einfache Rechenschritte, die natürlich für sich „richtig“ sind. Ob das gesamte Modell brauchbar ist, entscheidet sich aber an der Art, wie diese Rechenschritte kombiniert werden (der Modellbildung) und den gewählten Anfangs- und Randbedingungen.

Für numerische Berechnungen ist daher sicherzustellen und zu dokumentieren,

- dass die Gültigkeitsgrenzen der Werte und Formeln bekannt sind und eingehalten werden (zB zulässige Messfehler) und
- dass die Signifikanz der Ergebnisse beschrieben bzw die statistische Unsicherheit angegeben wird.

Immer wieder besteht die Gefahr, dass Genauigkeit über die Zahl der Nachkommastellen definiert wird und die Freude an bunten Bildern über gravierende Fehler im Modell hinwegtäuschen.

5.2. Kalibrierung des numerischen Modells

Bei der Modellkalibrierung werden die Ergebnisse von Simulationsmodellen an reale Messdaten angepasst. Simulations- und Modellparameter werden so eingestellt, dass

das Nachrechnen eines Versuchs nach Möglichkeit optimal die Versuchsergebnisse wiedergibt.

Eine gemessene Antwortkurve (zB Lastverschiebungen) wird als Referenz angenommen und die Parameter des Simulationsmodells werden so lange modifiziert, bis zwischen Referenz und Simulation eine bestmögliche Übereinstimmung erzielt wird. Diese Vorgehensweise wird auch als „*reverse engineering*“ bezeichnet.

Mithilfe dieser Methodik kann man nicht direkt messbare Modellgrößen (wie zB Materialparameter) identifizieren. Aus diesem Grund ist auch die Bezeichnung „*Parameteridentifikation*“ gebräuchlich.

In der Regel nimmt man mehrere Versuche vor (mit etwas anderen Einstellungen), sodass man auch statistische Unsicherheiten identifizieren kann. Die kalibrierten Parameter müssen an mindestens einem weiteren Versuch validieren werden. Wenn diese Versuchsdaten nicht zur Verfügung stehen, kann keine Validierung durchgeführt werden. Bei speziellen Materialien kann man gegebenenfalls auch auf Literaturwerte zwecks Plausibilitätsprüfung der Ergebnisse der Kalibrierung zurückgreifen.

5.3. Ein Negativbeispiel aus der Praxis

Ein britisches Sachverständigenbüro (*expert witnesses in commercial court cases*) stellte im Jahr 2008 fest, dass sich sein FE-Modell eines Trockenzylinders etwa dreimal so schnell erwärmte, wie es den Zeugenaussagen der Maschinenbediener entsprach. Zur Korrektur dieses Missverhältnisses wurden die Wärmeübergangskoeffizienten ($HTC = \text{heat transfer coefficient}$) von kondensierendem Dampf auf Stahlguss auf ein Viertel (!) reduziert.

Die Rechtfertigung war in eine Randnotiz verpackt: „*The second case assumed HTC's that were 25% of those above. This is because the rate of heating with full HTC's appears to be fast.*“

Die Berechnung ergab praxisferne Temperatur- und Belastungsverläufe, alle Schlussfolgerungen waren unbrauchbar.

Der wahre Grund für die zu rasche Erwärmung, dass nämlich die Dampfzufuhr technisch limitiert war, blieb in diesem Fall auch anderen Experten und Sachverständigen verborgen, weil die Modellbildung, speziell die Wärmebilanz der Gesamtanlage, nicht transparent dargestellt war und man sich auf die Interpretation der Ergebnisse konzentrierte.

5.4. Virtuelle Elemente zur realistischen Modellierung

Die Kalibrierung kann auch Hinweise darauf liefern, wo die Modellbildung angepasst werden muss. ZB muss man des Öfteren auch „numerische Effekte“ künstlich ins Simulationsmodell einbauen, da es Effekte in den Versuchsaufbauten gibt, die von den Labortechnikern nicht berücksichtigt oder als nicht relevant eingestuft werden.

Ein klassischer Fehler am Versuchsstand ist, ein Lager bei Biege- oder Zugversuchen als starr einzustufen. In der Simulation muss man dann künstliche Federn für die Nachgiebigkeit der Lager und Klemmen einfügen und deren Steifigkeitsparameter in der Kalibrierung mitabschätzen (da diese messtechnisch nicht erfasst wurden bzw nicht ohne Weiteres messbar sind), um auf sinnvolle Ergebnisse zu kommen.

Allerdings fügt man solche zusätzlichen Parameter oftmals erst ein, wenn die Ergebnisse der ersten Kalibrierung aufgrund der Erfahrung oder einer Validierung anhand der Literatur nicht sinnvoll erschienen.

5.5. Modellierung von „harten“ Nebenbedingungen

Eine weitere klassische Abweichung ist, dass man zur Erhöhung der numerischen Stabilität manchmal gezielt von den realen Parametern abweichen muss, zB indem eine Kontaktsteifigkeit extrem überhöht im Modell umgesetzt wird, um bei hohen Aufprallgeschwindigkeiten die geometrische Nebenbedingung (keine Penetration) einzuhalten. Eine solche Maßnahme ergibt sich ausschließlich aus dem Wunsch nach numerischer Stabilität.

6. Ablauf einer numerischen Berechnung

- Arbeitsschritte:
 - *Preprocessing* (Modellaufbereitung):
 - Vernetzung bzw *meshing* (Erstellung der Geometrie in einem CAD-Programm oder Aufbereitung von Daten aus Laserscans),
 - Zuweisung von Volumen- oder Oberflächendaten (zB Material, Reibung, Rauigkeit),
 - Definition von Randbedingungen (zB Kontaktbedingungen),
 - Definition von Anfangsbedingungen (zB Geschwindigkeitsverteilung im Zulauf).
- *Solver* (numerische Berechnung):
 - Die eigentliche Berechnung ist meist der umfangreichste Schritt. Ein simpler Berechnungsschritt kann fehlerhafte Ergebnisse erzielen, sodass oft eine iterative Korrektur des Modells (siehe *preprocessing*) notwendig wird.
 - Insbesondere sind zu überprüfen: korrekte Abbildung nicht linearer Effekte aus Kontakt bzw *impact*, Reibung bzw Gleiten, korrekte Abarbeitung von Skripten (diese sind oft notwendig, aber eine große Fehlerquelle in Programmausführung), Auftreten lokaler Singularitäten, *locking* von Elementen, Kontakten und Materialgesetzen uvm.
 - Auch der *solver* selbst kann bei der Berechnung des Modelles versagen, zB nicht konvergieren oder „verrauschte“ Ergebnisse liefern.

- *Postprocessing* („bunte Bilder“):
 - Darstellung als absolute, relative oder Differenzdaten;
 - lineare oder nicht lineare Skalierung;
 - Zeitverlauf von ausgewählten Werten;
 - Wahl einer aussagekräftigen Klasseneinteilung von Eigenschaften (zB Spannung, Verschiebung, Wassertiefe, Fließgeschwindigkeit).

Die im Postprozessor visualisierten „bunten Bilder“ geben eine erste gute und anschauliche Ergebnisdarstellung.

Um die Simulationsergebnisse richtig zu deuten und auszuwerten, empfiehlt es sich, die Ausgabedateien, die meistens als Report- oder Textdateien vorliegen, näher zu betrachten. Ergebnisse (wie Verschiebungen, Kräfte oder Spannungen) können zB in ein Tabellenkalkulationsprogramm importiert und bearbeitet werden.

7. Datenaufbereitung, Plausibilität, Portierbarkeit

Digitale Dokumente (Befunde, Gutachten, Projektunterlagen) müssen den bisherigen Standards für analytische Berechnungen in gleicher Weise genügen.

Das stellt hohe Anforderungen an die Aufbereitung der Daten:

- umfassende Dokumentation (Quellenangaben, Annahmen, Zwischenergebnisse wie zB Berechnungsnetze),
- verständliche Darstellung der Daten (standardisierte Dateiformate),
- Nachvollziehen expliziter und impliziter Eigenschaften des numerischen Modells, zB:
 - die Vernetzung inkl. Qualitätsmaßen der FEM- und CFD-Netze (zB Elementverzerrung, Elementgrößenverteilung),
 - Darstellung von Kontaktflächen, aktiven Kontaktregionen und Durchdringungen,
 - Prüfung der Erhaltungssätze (Kraft bzw Impuls, Energie, Symplektizität),
 - Darstellung von Hysteresen und *History*-Daten für einzelne kritische Punkte,
- prüfbare Berechnungen mit
 - Einflussanalyse aller Parameter (Nachweis der Konvergenz) und
 - Plausibilitätskontrolle
 - durch Kalibrierung anhand von tatsächlichen Messwerten und/oder
 - vereinfachte analytische Berechnung (in der Regel nur bei stationären und eher linearen Modellen möglich) und/oder
 - redundante numerische Berechnung (mit anderer Software).

Die Portierbarkeit wird durch offene, von Menschen und Maschinen lesbare Dateiformate (bevorzugt CSV oder XML) in allen Stufen des Berechnungsablaufs gewährleistet. Dadurch können auch vernetzte und mit Randbedingungen versehene Modelle für Vergleichsrechnungen mit anderen numerischen Programmen (und anderen Berechnungskernen) verifiziert werden.

Sollten die beschriebenen Schnittstellendaten oder alternative Software nicht zur Verfügung stehen, ist unter Umständen die Sicherstellung einer lizenzfreien Betrachtung der Daten ausreichend, sodass Dritte die Dateien öffnen und die Rechnung bewerten können.

Viele Programme liefern mittlerweile sogenannte Viewer-Files, welche mit einem frei erhältlichen Viewer lizenzfrei betrachtet werden können. Weiters gibt es auch offene Datenformate, welche speziell auf FE-Simulationsergebnisse zugeschnitten sind (beispielsweise VTK); zu diesen Formaten gibt es auch offene Viewer (Paraview). Im Gegensatz zum sehr allgemeinen CSV-Format kann der Prüfprozess somit stark vereinfacht werden, weil die Ergebnisse beispielsweise für die kritischen Lastschritte direkt auf dem FE-Netz betrachtet werden können. Der Prüfer kann dann die Daten an den für ihn interessanten Punkten extrahieren.

8. Sensitivitätsanalyse zur Steigerung der Nachvollziehbarkeit des Modells

Hängt das Modell stark von den *Solver*-Einstellungen ab, die durch einen externen Prüfer in der Regel nicht einsehbar sind, sollte das dokumentiert werden.

Eine standardisierte Herangehensweise dazu ist die Angabe von Sensitivitäten: Die Angabe der Sensitivitäten der Ausgangsgrößen in Hinsicht auf Modellparameter kann die Nachvollziehbarkeit eines Simulationsmodells stark verbessern. So kann beispielsweise nachvollzogen werden, ob die Vergleichsspannung im kritischen Punkt maßgeblich abhängt von

- Materialparametern,
- Geometrieparametern,
- Randbedingungen oder aber
- *Solver*-Einstellungen (!).

In der Regel wird hier ein *design of experiments* (DOE) berechnet. Dies dient nicht nur der Nachvollziehbarkeit des Modells, sondern auch der Prüfung der Robustheit des Modells bezüglich kleinen Änderungen seiner Parameter.

9. Metamodelle bzw Digitaler Zwilling

Als Erweiterung zum vorigen Punkt (Dateiformate) ist es auch möglich, die FE-Simulationsergebnisse auf einem sogenannten Metamodell bzw einem Digitalen Zwilling darzustellen.

Dieses Metamodell wird am Simulationsmodell trainiert und reduziert die Zusammenhänge auf mathematische

Beziehungen, welche mit niedrigem Rechenaufwand ausgewertet werden können (man führt sozusagen die numerische Lösung wieder auf eine analytische Lösung zurück).

Es gibt Softwarelösungen, die diese Art der Analyse relativ einfach implementieren, das heißt, die Rückführung auf ein mathematisches Modell sowie die interaktive Auswertung durch den User erlauben.

Dieser Prozess kann für einzelne Punkte im Modell durchgeführt werden. Er kann auch für Feldgrößen gemacht werden.

10. Planung und Aufwandsschätzung einer Simulation

Ein wichtiger Aspekt ist die Zeitaufteilung bei der Bearbeitung von Simulationen.

Bei analytischen Herangehensweisen (zB auch eine Berechnung nach Norm) nimmt die Modellbildung die meiste Zeit in Anspruch. Die Berechnung selbst ist eher kurz und dafür gibt es mehr Zeitaufwand bei der Erstellung des Berichts, wo auch die Berechnung nachvollzogen werden muss.

Bei Simulationen ist dies oft anders. Hier nimmt die eigentliche Modellbildung etwas weniger Zeit in Anspruch (da vieles vom Simulationsprogramm vorgegeben und abgenommen wird). Die Lösung an sich nimmt die größte Zeit in Anspruch, während sich der Bericht auf ein absolutes Minimum von vielleicht 10 % des Aufwands für den Berechner reduziert.

Darin besteht im täglichen Arbeiten eine Gefahr, dass der Bearbeiter sich oftmals auf die Lösung selbst konzentriert und dazu tendiert, dem Bericht wenig Mühe und Liebe zum Detail zu widmen. Umgekehrt muss die verschiedene Aufwandsverteilung auch vom Auftraggeber der Berechnung akzeptiert werden.

11. Zusammenfassung

Ohne angemessene Nachvollziehbarkeit bzw Prüffähigkeit ist jede technische Berechnung, also auch eine numerische, unbrauchbar.

Aktuell hält die Dokumentation numerischer Berechnungen mit den guten Standards bei analytischen Berechnungen nicht mit und beschränkt sich oft auf bloßes *postprocessing* („bunte Bilder“).

Mit einer prüffähigen numerischen Dokumentation werden Gerichts- oder Amtssachverständige genauso wie Parteien erst in die Lage versetzt, unabhängige Einflussanalysen oder Plausibilitätskontrollen durchzuführen.

Das Nachvollziehen einer prüffähigen Dokumentation erfordert deutlich geringere Ressourcen als eine Neuberechnung.

Korrespondenz:

Dipl.-Ing. Roland Hillinger

E-Mail: roland.hillinger@gerichts-sv.at