



Prof. Dr. Oleg Iliev, Dr. Aivars Zemitis, Torben Prill, Dr. Stefan Rief, Inga Shklyar, Dr. Sarah Staub, Dr. Matthias Kabel, Dr. Ralf Kirsch, Christine Roth, Jonathan Köbler, Dr. Sebastian Rau, Dr. Konrad Steiner, Tobias Hofmann, Dr. Dariusz Niedziela, Dominik Gilberg, Dr. Heiko Andrae, Dr. Sebastian Schmidt, Dr. Jochen Zausch, Dr. Katherine Leonard, Alexander Leichner, Maxim Taralov, Vassilena Taralova, Sven Linden, Simone da Vita, Rolf Westerteiger, Sebastian Osterroth, Raturaj Deshpande, Petr Zakharov, Dimitar Iliev

STRÖMUNGS- UND MATERIALSIMULATION

▪ MIKROSTRUKTURSIMULATION UND VIRTUELLES MATERIALDESIGN

Struktur-Eigenschaftsbewertung und Auslegung von porösen Materialien und Verbundwerkstoffen mit der Software GeoDict

▪ HYDRODYNAMIK UND CFD

Numerische Strömungssimulation insbesondere in und mit porösen Medien mit Multiskalenmethoden mithilfe der Filterelementsimulations-Toolbox FiltEST

▪ KOMPLEXE FLUIDE

Strömungssimulation rheologisch komplexer Fluide zur Auslegung prozesstechnischer Apparate unter der Softwareplattform CoRheoS

▪ FESTKÖRPERMECHANIK

Multiskalensimulation zur Vorhersage der Deformation, Steifigkeit und Festigkeit sowie des Kompressions- und Ausdehnungsverhaltens von Verbundwerkstoffen mit der Software FeelMath

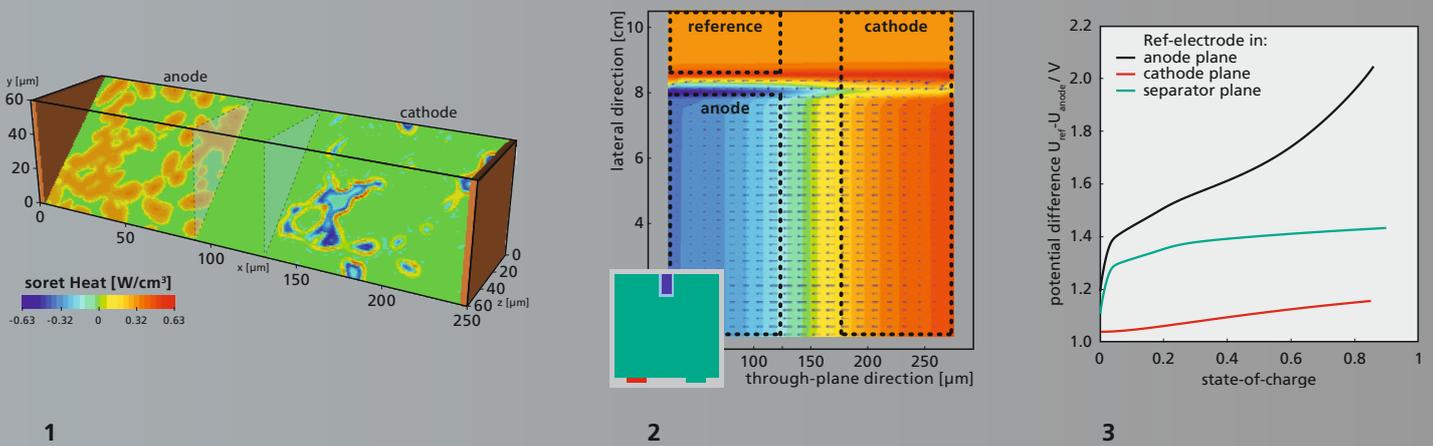




Die Abteilung »Strömungs- und Materialsimulation« beschäftigt sich mit der Multiskalenmodellierung und Entwicklung effizienter und robuster Simulationsmethoden und Softwaretools für ein in die Produktentwicklung und Prozessauslegung integriertes virtuelles Materialdesign mittels Mikrostruktursimulation. Die Alleinstellung der Abteilung ist gekennzeichnet durch die Entwicklung, Bereitstellung und spezifische Anwendung von industriell tauglichen Multiskalen- und Multiphysics-Methoden und firmenspezifischen Softwarelösungen.

Die Modellierung und Simulation der Herstellungsprozesse (Mischen, Dispergieren, Einspritzen, Auffiltrieren, Beschichten) der komplexen Verbund- bzw. Hybridmaterialien wird dabei zusätzlich in den virtuellen Auslegungsprozess mit einbezogen. Die simulationstechnische Beherrschung der wechselseitigen Beeinflussung von Fertigungsverfahren und -restriktionen mit den multifunktionalen lokalen Materialeigenschaften bei dynamischen Beanspruchungen kompletter Bauteile ist für viele Anwendungsbeispiele typisch. Durch die aktuell stattfindende Integration und Kombination der Mikrostruktursimulationstechnologie mittels Multiskalenansätzen mit der klassischen Fertigungs- und Systemsimulation für komplette Bauteile bzw. Apparate eröffnen sich der Abteilung vielfältige Anwendungsprojekte insbesondere bei der Auslegung von technischen Filtern bzw. allgemein von verfahrenstechnischen Apparaten und Maschinen, von innovativen Batterie- bzw. Brennstoffzellensystemen oder dem funktionsgerechten Design von faser- und partikelverstärkten Leichtbauteilen.

Im Jahr 2014 konnten in der Abteilung einige große Forschungsprojekte wie auch fünf Promotionen erfolgreich abgeschlossen und viele industrielle Anschlussprojekte eingeworben werden. Neue BMBF- und AiF-Projekte im Themenbereich der Optimierung poröser Materialstrukturen u. a. für Batterie- und Brennstoffzellen sowie im Bereich des Leichtbaus mit faserverstärkten Kunststoffen und Naturfasern wurden gestartet. Die große Anzahl der Anschlussprojekte bei der industriellen Auftragsforschung ergibt einen hohen Auftragsbestand und lässt für 2015 ein weiteres sehr erfolgreiches Jahr erwarten. Die wissenschaftliche Zusammenarbeit am Standort Kaiserslautern wurde mit dem Start der zweiten Projektphase des Innovationszentrums Applied System Modeling und im Rahmen des weiter laufenden Forschungszentrums (CM)² an der TU Kaiserslautern mit Lehrstühlen aus den Fachbereichen Mathematik sowie Maschinenbau und Verfahrenstechnik deutlich intensiviert. U. a. wurden zukünftige gemeinsame Auftragsarbeiten für die Industrie vereinbart.



BATTERIEZELLEN MIT INTEGRIERTER SENSORIK: SIMULATIONSUNTERSTÜTZTE KONZEPTFINDUNG

Der verstärkte Ausbau der Elektromobilität erfordert eine Weiterentwicklung und Verbesserung der Kernkomponente eines Elektrofahrzeugs: dem elektrischen Energiespeicher. Aktuell wird hierfür hauptsächlich auf Lithium-Ionen-Akkumulatoren gesetzt. Während diese eine hohe spezifische Leistungs- und Energiedichte aufweisen, werden gerade im Automobilbereich hohe Anforderungen an Sicherheit und Lebensdauer gestellt. Hierfür ist ein gutes thermisches und elektrisches Batteriemanagementsystem (BMS) von Nöten. Je genauer der Zustand einzelner Zellen im Akkupack bekannt ist, desto besser kann das BMS für einen sicheren und dauerhaften Betrieb des Packs sorgen. Ein Teilaspekt des Verbundprojekts »Temperaturoptimierte Batteriemodule mit instrumentierten Zellen« (TopBat) ist daher die Konzeptentwicklung und Erprobung von Zellen, die individuell mit Potenzial- und Temperatursensorik ausgestattet werden. Die Instrumentierung soll mit möglichst geringem Einfluss auf den Fertigungsprozess möglich sein.

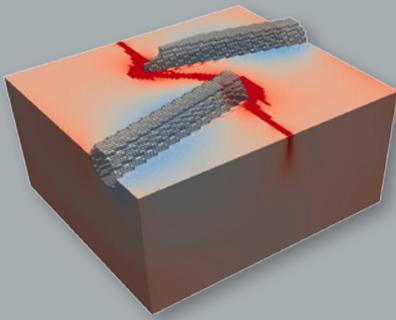
Potenzialmessungen dienen zur Beurteilung des sog. Platingrisikos – einem Degradationsprozess, bei dem sich metallisches Lithium abscheidet und zu einem gefährlichen Kurzschluss innerhalb der Zelle führen kann. Zusätzlich zu den beiden Batterieelektroden (Anode und Kathode) wird hierfür noch eine Referenzelektrode in die Zelle eingebracht, durch die kein Strom fließt und die lediglich der Potenzialmessung dient. Die Idee des Projektpartners Fraunhofer ISIT ist, diese Elektrode mit einem Referenzmaterial genauso als poröse Elektrode auszuführen wie Anode oder Kathode, was eine leichte Integration in bestehende Fertigungsprozesse gewährleistet. Wie die Geometrie einer solchen instrumentierten Zelle aussehen muss (Position und Größe der Referenzelektrode), um sinnvolle Messergebnisse zu erhalten, wird in diesem Projekt durch Computersimulationen untersucht. Hierfür wurde das ITWM-Simulationswerkzeug BEST (Battery and Electrochemistry Simulation Tool) entsprechend erweitert und für Simulationsstudien eingesetzt. BEST basiert auf einem Satz partieller Differentialgleichungen zur Beschreibung der Prozesse innerhalb einer Lithium-Ionen Batterie. Diese werden für eine realistische Zelle voll dreidimensional gelöst. Somit lassen sich Referenzpotenziale berechnen und im Detail untersuchen, wie diese im Hinblick auf das Platingrisiko zu bewerten sind.

Die Berechnung der Wärmeentwicklung und ihre Wechselwirkung mit dem Batterieverhalten ist ein weiterer wichtiger Fokus des Projekts. Hierfür wurde ein thermisch-elektrochemisches Batteriemodell in BEST integriert, so dass eine lokal aufgelöste Temperaturverteilung ermittelt werden kann, was im Zusammenhang mit der Interpretation von Messungen zellinterner Temperatursensoren sehr wertvoll ist.

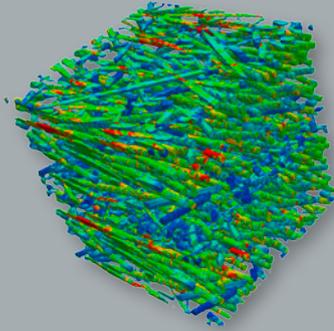
1 Der Schnitt durch die mikroskopische Elektrodenstruktur zeigt die sehr inhomogene Verteilung der Wärmeproduktion.

2 Der Querschnitt durch die Pouchzelle zeigt die Lithium-Konzentration im Elektrolyten (Pfeile stellen den Ionenstrom dar). Der Inset zeigt die Zelle in der Aufsicht.

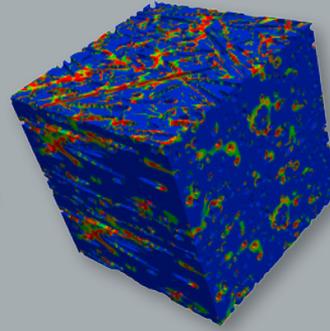
3 Berechnete Spannungsdifferenz zwischen Referenz und Anode für verschiedene Positionen der Referenz innerhalb des Folienstapels



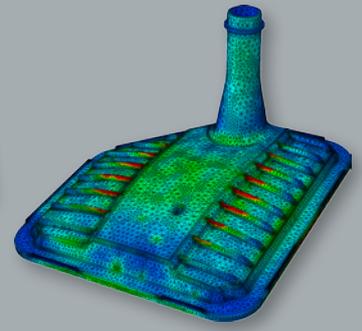
1



2



3



4

ADAPTIVE APPROXIMATIONSVERFAHREN ZUR MULTISKALENSIMULATION DES NICHTLINEAREN VERHALTENS VON KOMPOSITEN

1 *Simulation des lokalen Schädigungsverhaltens, Matrixschädigung verursacht durch Mikrorisse: hohe Schädigung im roten Bereich, niedrige Schädigung im blauen Bereich*

2 *Virtuelle Mikrostruktur (Strukturgenerierung mit der Software GeoDict) eines kurzfaserverstärkten Kunststoffes mit 30% Glasfasergehalt: Spannungsverteilung in Fasern*

3 *Matrixschädigung: hohe Schädigung in roten Bereichen und niedrige im blauen Bereichen*

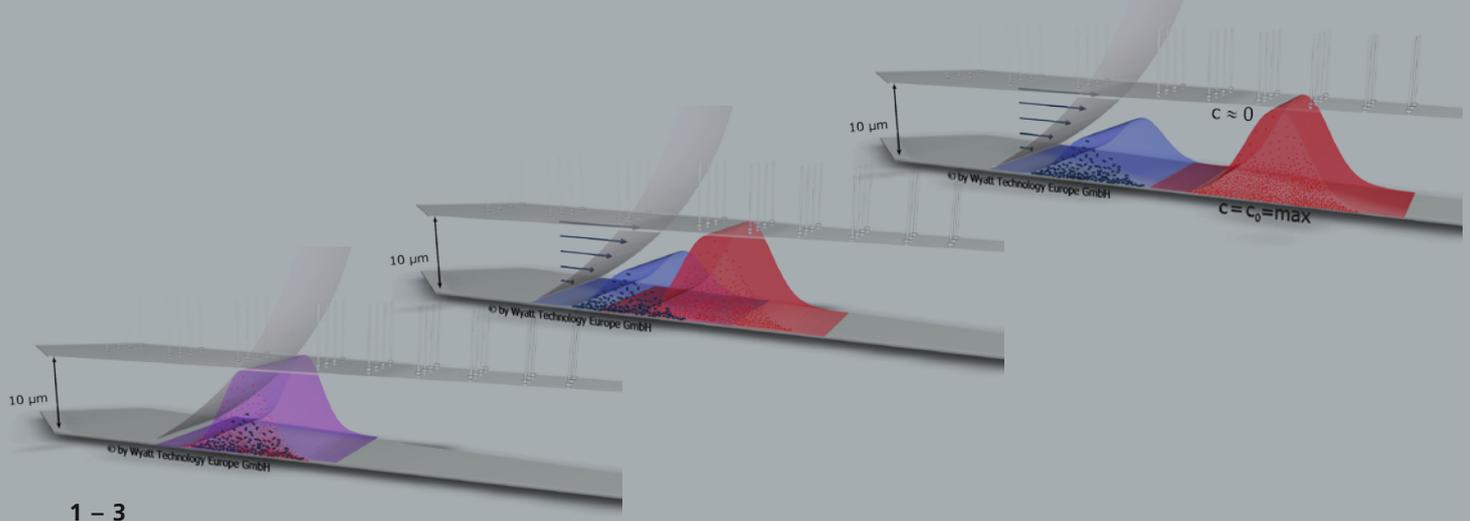
4 *Spannungsverteilung in Filtergehäuse der Firma Filtran unter Innendruck, hohe Spannung im roten Bereich, niedrige Spannung im blauen Bereich*

Im Leichtbau – sowohl im Automobil- als auch im Consumer-Bereich (z. B. Bohrmaschinengehäuse) – ersetzen faserverstärkte Kunststoffe immer mehr Metalle als Werkstoff. Die Vorhersage der Festigkeit und des Schädigungsverhaltens dieser Bauteile ist aufgrund der Richtungsabhängigkeit des mechanischen Werkstoffverhaltens kompliziert, weshalb aufwendige Mehrskalensimulationen für präzise Vorhersagen notwendig sind. Hierbei stellt vor allem der hohe Bedarf an Rechenzeit und Speicher ein Problem dar.

Am ITWM werden zur Reduktion dieses hohen Aufwands Methoden entwickelt, um basierend auf sogenannten Konfigurationskräften makroskopische Indikatoren zu definieren, mit denen die Mikrostruktur im Bauteil adaptiv nur an den notwendigen Stellen berücksichtigt wird.

Standardkräfte beschreiben die äußere Einwirkung, die einen festgehaltenen Körper verformen. Im Gegensatz zu diesen Kräften erfassen Konfigurationskräfte die Wirkung der mikrostrukturellen Inhomogenität auf die Verformung. In Bereichen eines Bauteils ohne großen Einfluss der Mikrostruktur wird auf einfache und schnelle Homogenisierungsmethoden zurückgegriffen, während in den Bereichen mit größerem Einfluss der Mikrostruktur auf die Festigkeit aufwendigere und genauere Methoden verwendet werden. Hierbei kommen je nach Bereich Randelementmethoden, Finite Element-Methoden oder die Fast-Fourier-Transformation der Lippmann-Schwinger-Gleichungen zum Einsatz. Durch diese adaptive Wahl des Mikrostrukturlösers wird eine sehr hohe Genauigkeit bei reduziertem Speicher- und CPU-Bedarf erzielt.

In Zusammenarbeit mit dem Lehrstuhl für Technische Mechanik der TU Kaiserslautern werden am Fraunhofer ITWM Indikatoren für die Auswahl des Mikrolösers, basierend auf den Konfigurationskräften, sowie die Schnittstellen für die Skalenkopplung entwickelt. Für Bereiche, in denen die hohe Auflösung einer komplexen Mikrostruktur erforderlich ist, kommt der am ITWM entwickelte schnelle Mikrostrukturlöser FeelMath zum Einsatz. Das vom BMBF geförderte Verbundforschungsvorhaben MuSiKo wird gemeinsam mit dem Institut für Angewandte Mathematik und dem Lehrstuhl für Technische Mechanik der Universität des Saarlandes, sowie des Instituts für Angewandte und Numerische Mathematik des Karlsruher Institutes für Technologie durchgeführt. Zudem unterstützen die Industriepartner Robert Bosch GmbH und Siemens PLM Software das Projekt.



MODELLIERUNG UND SIMULATION ASYMMETRISCHER FLUSS-FELDFLUSS-FRAKTIONIERUNG

Die asymmetrische Fluss-Feldfluss-Fraktionierung (AFFFF) und die elektrische Feldfluss-Fraktionierung (EFFF) sind einfache und robuste Methoden zur Separierung von Nano- und Mikropartikeln in Lösungen und Dispersionen. AFFFF ist eine ausgereifte und häufig von der pharmazeutischen Industrie und an Hochschulen eingesetzte Technologie. Sie macht sich die Interaktion von Diffusion und Strömungsfeld auf Partikeln mit unterschiedlichen Radien zunutze. Die führenden Produkte in diesem Bereich werden von der Superon GmbH entwickelt.

Die Konzeption des Trennsystems beruht auf einer sorgfältigen analytischen Studie der Strömungsverhältnisse und der Trennung in einem Mikrokanal. Eine weitere Verbesserung der Leistung dieser Geräte ist mithilfe mathematischer Modelle und Computersimulationen möglich. Dreidimensionale Strömungssimulationen liefern eine detaillierte Ansicht der Strömungen und der Partikelbewegung im Inneren des Spacers. Im Vergleich zu analytischen Verfahren liefern Strömungssimulationen (CFD, Computational Fluid Dynamics) bei komplexen Geometrien detailliertere Informationen. Diese Informationen ergänzen den analytischen Ansatz bei der Optimierung der Strömungsverhältnisse und helfen bei der weiteren Entwicklung des Geräts.

Insbesondere erlauben es Simulationen mit verschiedenen Größen und Anordnungen des Injektionsrohrs und mit verschiedener Anzahl bzw. Größe der Auslässe, die Wirkung dieser Parameter auf die wichtigsten Komponenten des Prozesses zu untersuchen. Zu diesen Komponenten zählen die Größe und Form des Fokussierungsbereichs, die Symmetrie und die Trennung von Maximalwerten in dem Fraktogramm. In diesem Fall ermöglichen die CFD-Simulationen die Untersuchung der Position der Fokussierungszone bei allen praktikablen Verhältnissen der Durchsatzraten und den verschiedenen Formen und Größen des Spacers. Größe und Form der Fokussierungszone beeinflussen wesentlich die Trennung der Partikel in der Elutionsphase. Ihre Untersuchung ist daher für die weitere konstruktive Verbesserung der Fraktionierungseinrichtung von besonderer Bedeutung. Die Kombination der Simulation mit optimalen Flusssteuerungsalgorithmen macht es möglich, die Dichte der Probe in dem Fokussierungsbereich zu optimieren. Dies ist sehr wichtig für die Hohlfasern-FFF, bei welcher der kleine Fokussierungsbereich zu hohen Konzentrationen der Probe führen kann (ungewünschte Agglomeration von Partikeln bzw. Molekülen).

Die EFFF-Technologie ist sehr hilfreich für die Separation von Partikeln gleicher Größe mit unterschiedlichen elektrischen Eigenschaften. Eine Kombination von EFFF und AFFFF erlaubt die Separierung eines breiteren Spektrums von Partikeln und somit die Reduzierung der notwendigen Anlagen. CFD-Simulationen ermöglichen die Bewertung und Vorauswahl verschiedener neuer Konstruktionsvarianten, ohne dass hierzu teure Prototypen gebaut werden müssen.

Schematische Darstellung der AFFFF: Die Partikel werden separiert wegen der Interaktion von parabolischer Strömung nach rechts und vertikaler Querströmung mit unterschiedlicher Diffusion.

1 *Anfangsstadium: Die Partikel sind gemischt (Verteilungsfunktionen liegen aufeinander).*

2 *Mit der Zeit verschieben sich die Verteilungsfunktionen, da die kleineren Partikel (höhere Diffusion) schneller nach rechts transportiert werden.*

3 *Das Ziel ist erreicht, wenn beide Typen von Partikeln getrennt sind.*