

Lithium-Ionen-Akkus bestehen aus zwei porösen Elektroden, die durch einen elektrolytgetränkten Separator getrennt sind. Beim Laden und Entladen des Akkus werden Lithium-Ionen zwischen diesen beiden Elektroden über den Elektrolyten ausgetauscht. Die Abteilung entwickelt mathematische Modelle auf der Grundlage der physikalischen und elektrochemischen Prozesse, mit denen sich die Transport- und Reaktionsvorgänge in einer Batteriezelle auf zwei verschiedenen Skalen beschreiben lassen.

STRÖMUNGS- UND MATERIALSIMULATION

▪ **COMPUTERGESTÜTZTES MATERIALDESIGN UND MIKROSTRUKTURSIMULATION**

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

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

▪ **SIMULATIONSGESTÜTZTE AUSLEGUNG KOMPLEXER STRÖMUNGSPROZESSE**

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

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

▪ **MODELLGESTÜTZTE AUSLEGUNG ELEKTROCHEMISCHER ENERGIESPEICHER**

Physikalische Modellierung elektrochemischer Prozesse von Li-Ionen-Batterien und PEM-Brennstoffzellen

Anwenderfreundliche Simulationssoftware **BEST** zur 3D-Batteriesimulation auf der Elektroden- und Zellskala

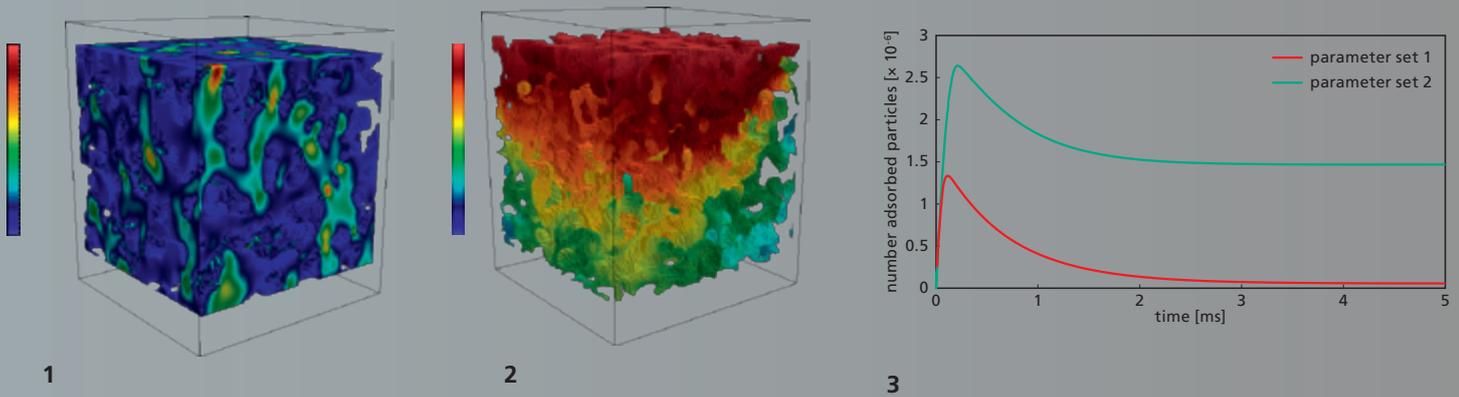




Die Abteilung entwickelt Multiskalenmethoden und Softwaretools für die Produktentwicklung und deren Prozessauslegung. Typisch ist die simulationstechnische Beherrschung der wechselseitigen Beeinflussung von Fertigungsverfahren und -restriktionen mit multifunktionalen lokalen Materialeigenschaften bei dynamischen Beanspruchungen kompletter Bauteile. In industriellen Anwendungsprojekten beschäftigen wir uns u. a. mit der strömungs- und strukturmechanischen Auslegung von Absorptionsmaterialien und Filtersystemen oder dem thermomechanischen Betriebsverhalten von Verbund- und Hybridbauteilen. Die Alleinstellung der Abteilung ist gekennzeichnet durch die Entwicklung, Bereitstellung und spezifische Anwendung von industriell tauglichen Multiskalen- und Multiphysics-Methoden und firmenspezifische Softwarelösungen.

Die Abteilung unterteilt sich auch schon namentlich in zwei größere Anwendungsbereiche: »Computergestütztes Materialdesign und Mikrostruktursimulation« ermöglicht die numerische Simulation und Optimierung funktionaler Eigenschaften von porösen Materialien und Verbundwerkstoffen, wie das Projektbeispiel der Multiskalensimulation mitteldicker Holzfaserplatten zeigt. Intensiv nachgefragt sind unsere hocheffizienten, mikromechanischen Methoden basierend auf dem universellen Mikromechaniklöser **FeelMath** zur Auslegung faserverstärkter Verbundwerkstoffe insbesondere im Automobilbau. Die »simulationsgestützte Auslegung komplexer Strömungsprozesse« befasst sich mit den dazugehörigen Herstellungsprozessen wie Mischen, Dispergieren, Einspritzen, Filtrieren, Beschichten und Kompaktieren. Die langjährige Erfahrung in der Modellierung und Simulation von Filtrationsprozessen ist in **FiltEST** (Filter Element Simulation Toolbox) gebündelt. Die Modellierung und Simulation des reaktiven Spritzgießens von Polyurethanschäumen ist eine aktuelle Erweiterung der Simulationsplattform **CoRheoS** (Complex Rheology Solver) für die Strömungsberechnung viskoelastischer Polymerschmelzen, Fasersuspensionen und granularen Strömungen. Die »modellgestützte Auslegung elektrochemischer Energiespeicher«, also insbesondere Projekte zu Li-Ionen-Batterien und PEM-Brennstoffzellen, umfasst verschiedene Simulationsaspekte aus beiden Bereichen, wie beispielsweise die Wärmeausbreitung in einem Batteriepack, die Prozesssimulation bei der Batterieproduktion oder auch Verfahren zur Charakterisierung und Optimierung von Elektrodenstrukturen.

2015 konnte die Abteilung die extrem positiven wirtschaftlichen wie auch wissenschaftlichen Ergebnisse fortschreiben. Insbesondere mit Stammkunden wie z. B. Procter & Gamble wurden Kooperationsaktivitäten ausgebaut bzw. neue initiiert. Die Zusammenarbeit mit unserer Ausgründung **Math2Market** läuft neben dem äußerst erfolgreichen Lizenzverkauf von **GeoDict** hervorragend; u. a. ermöglicht die synergetische Arbeitsteilung den schnellen Marktzugang neuer Simulationstechnologien aus unserem Hause, wie das Beispiel **FeelMath** zeigt.



PORECHEM – SIMULATION DES REAKTIVEN STOFF-TRANSPORTS IN PORÖSEN MEDIEN

Reaktiver Transport von gelösten Stoffen ist hochgradig relevant in vielen Prozessen sowohl in der Umwelt als auch in der Industrie. Funktionalisierte Filtermembranen sowie die Absorption von gelösten reaktiven Stoffen in Gestein oder nanoporösen Reaktoren sind Beispiele hierfür. Für das Studium dieser Prozesse und deren Optimierung im industriellen Bereich sind Kenntnisse über den zeitlichen Verlauf des reaktiven Stofftransports auf Porenebene unerlässlich. Zu diesem Zweck ist am Fraunhofer ITWM **PoreChem** entstanden, ein neues hochentwickeltes Softwarepaket, das dreidimensionale Strömungen, den Stofftransport und die Reaktionen chemisch reaktiver gelöster Stoffe in aufgelösten porösen Medien simulieren kann.

Mit PoreChem kann zunächst die Strömung eines Fluides durch ein poröses Medium (siehe Abbildung 1) simuliert werden. Auf dem daraus resultierenden Geschwindigkeitsfeld wird dann der Transport gelöster Stoffe durch Diffusion und Advektion im Porenraum (siehe Abbildung 2) berechnet. Dabei können Reaktionen zwischen den Spezies mit verschiedenen Reaktionskinetiken mitberücksichtigt werden. Diese Reaktionen können sowohl im Fluidvolumen als auch auf der Oberfläche des porösen Mediums stattfinden.

Aus den Simulationen können mit PoreChem für die Anwendung wichtige Größen abgeleitet werden, wie etwa die Effizienz funktionalisierter Filtermembranen oder die Durchbruchkurven von Schadstoffen in Bodenproben. Für zeitabhängige Probleme kann beispielsweise auch die Konzentration im Fluid oder auf der Oberfläche in Abhängigkeit der Zeit analysiert werden (siehe Abbildung 3).

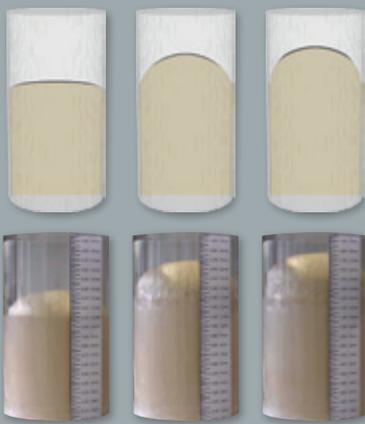
Des Weiteren können mit dem voxelbasierten Löser von PoreChem numerische Simulationen direkt auf Volumenbildern aus mikrobildgebenden Verfahren – wie etwa μ CT – oder auf virtuellen, mit der Software **GeoDict** generierten Strukturen durchgeführt werden. Somit kann die Abhängigkeit des Transportes und der Reaktivität in einer Porengeometrie schnell untersucht und gegebenenfalls mit geeigneten Strukturmodellen optimiert werden.

PoreChem kann für verschiedene physikalische Fragestellungen die zu erwartenden experimentellen Ergebnisse für reaktiven Transport in porösen Medien numerisch simulieren, was den Bedarf an teuren und zeitaufwändigen Experimenten drastisch reduziert, da diese besser im Voraus geplant oder ganz durch Simulationen ersetzt werden können.

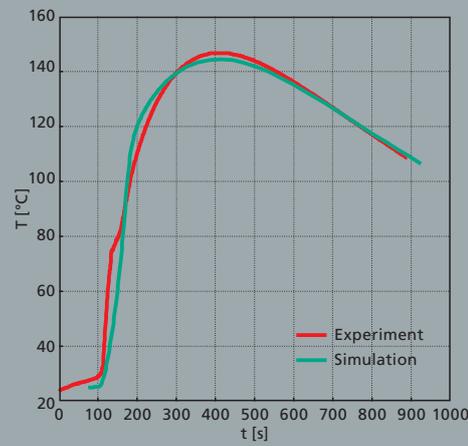
1 Geschwindigkeitsverteilung im Porenraum einer Mikrofiltrationsmembran

2 Verteilung eines Schadstoffes im Porenraum einer Mikrofiltrationsmembran

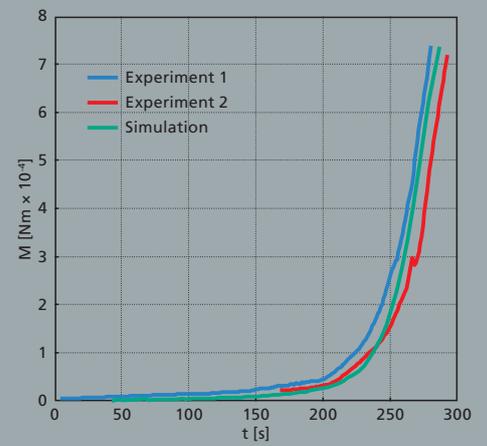
3 Änderung der adsorbierten Partikelzahl über die Zeit für zwei verschiedene Simulationen



1



2



3

SIMULATION DES REAKTIVEN SPRITZGIEßENS VON EXPANDIERENDEN POLYURETHANSCHÄUMEN

1 Entwicklung der Fließfront des Schaummaterials im Zylinder nach 100 s, 150 s und 200 s: Ergebnisse aus Simulation (oben) und praktischen Versuchen (unten)

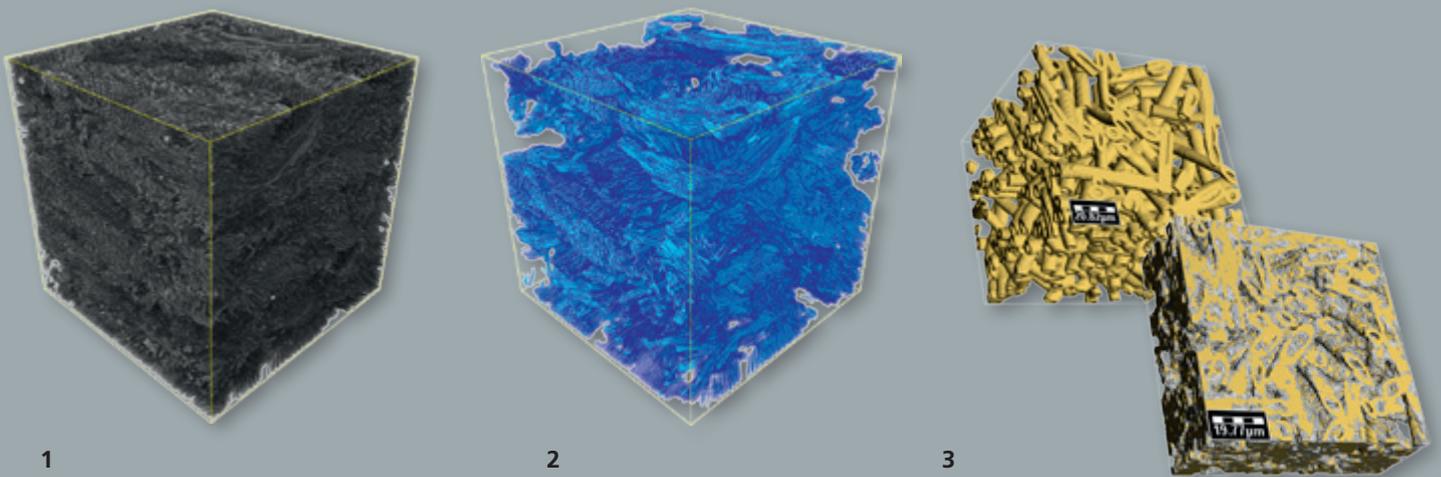
2 Zeitentwicklung der Temperatur im Zylinder

3 Vergleich der Drehmomentmessung (M) des Versuches mit dem Ergebnis unserer Simulation

Die vielfältig auftretenden Strömungsphänomene komplexer Fluide in industriellen Prozessen begründen die Durchführung verschiedener theoretischer und experimenteller Studien mit dem Ziel, das komplexe Kräftespiel in solchen Fluiden zu verstehen und vorherzusagen. Inspiriert durch das große Anwendungspotenzial von Polyurethanschäumen (PU) in der Luft- und Raumfahrtindustrie, Automobil-, Bau- und Verpackungsindustrie sowie der kühlttechnischen Industrie und in Haushaltsgeräten befasst sich die Abteilung kontinuierlich mit Forschungsaktivitäten, die einige physikalische Feinheiten des reaktiven Spritzgießens (RIM Prozess) expandierender Polyurethanschäume verstehen wollen. Dieses Verständnis wird die gezielte Anwendung dieser Schäume in der Praxis erleichtern und die Kosteneffizienz im Entwurfsverfahren sowie im Materialfertigungsstadium erhöhen.

Im RIM-Prozess von PU-Schäumen wird ein strukturviskos reagierendes Polymergemisch von geeigneten Isocyanaten und Polyolgruppen in eine Form eingepresst, wo das Material sich nach wenigen Sekunden von einer Emulsion mit niedrigem Molekulargewicht durch Polymerisation unter Entwicklung von Hitze und Kohlendioxid zu einem komplexen Polymerschäum entwickelt. Im Allgemeinen hängen die finale Struktur und die Merkmale expandierender PU-Schäume stark von sich entwickelnden Materialeigenschaften der Reaktionspartner ab, die zur Herstellung dieser Schäume verwendet wurden. Beispielsweise weist die Mischungsviskosität chemo-rheologisches Materialverhalten auf, d. h. es ändert sich diese in Verteilung und Zeit je nach Aushärtungsgrad und Temperatur des Schaumsystems. Im mathematischen Sinne bewirkt dieses Verhalten eine Kopplung zwischen Viskosität, Polymerisierungsgrad und Temperatur. Mit dieser Form der Kopplung ist es sehr schwierig, zugehörige Modellparameter analytisch zu bewerten. Obwohl die chemischen Eigenschaften der reaktiven PU-Schäume gut dokumentiert sind, ist eine adäquate mathematische Beschreibung der komplexen Dynamiken im RIM-Verfahren immer noch Ziel der heutigen Forschung.

Zusammen mit unseren Kooperationspartnern vom FB Maschinenbau der TU Chemnitz, die alle relevanten experimentellen Versuche im MERGE-Projekt über Leichtbaustrukturen durchführten, haben wir ein geeignetes Modell entwickelt, um die komplexen Dynamiken expandierender PU-Schäume vorherzusagen. Außerdem können wir mit unserer eigenen numerischen Simulationsplattform **CoRheoS** das Strömungsverhalten und andere physikalisch relevante Strömungsvariablen vorhersagen, die zur Beschreibung des Ausdehnungsprozesses nötig sind. Die Ergebnisse unserer Simulationen liefern eine genaue Beschreibung des Massen- und Wärmetransports beim Aufschäumen im Experiment. Der Vergleich mit den experimentell ermittelten Daten zeigt eine sehr gute qualitative sowie quantitative Übereinstimmung.



SIMULATIONSGESTÜTZTE ENTWICKLUNG MITTEL- DICHTER FASERPLATTEN FÜR DEN LEICHTBAU

Die Eigenschaften von Holzpartikelwerkstoffen (z. B. Spanplatten, Oriented Strandboards – OSB, mitteldichte Faserplatten – MDF) werden wesentlich durch Größe und Orientierung der Partikel geprägt. Spanplatten und OSB bestehen im Wesentlichen aus gezielt zerkleinerten Holzspänen. Im Gegensatz dazu werden bei Holzfaserplatten Holzhackschnitzel zunächst bis auf die Größe einzelner Holzzellen aufgeschlossen (Refining) und diese Fasern dann beleimt und heiß verpresst. Dadurch entstehen homogenere Platten mit einer damit verbundenen verbesserten Zug- und Biegefestigkeit, z. B. für Laminatfußböden.

Ziel vieler Entwicklungen ist es, Platten mit geringerer Dichte, aber gleichwertigen Festigkeitseigenschaften zu erzeugen. Nur durch eine genaue Werkstoffcharakterisierung lassen sich aber solche optimierten Platten gleichzeitig sicher und ressourcenschonend auslegen. In einem vom BMWi sowie mit EFRE-Mitteln geförderten Projekt wurden gemeinsam mit dem Fraunhofer-Institut für Holzforschung WKI in Braunschweig die Grundlagen zur Herstellung und zur Festigkeitsberechnung von leichten MDF-Platten aus Schichten mit orientierten Fasern entwickelt.

Als Grundlage der Festigkeitsberechnung dienen Mikro-Computertomographie-Aufnahmen (μ CT-Aufnahmen) der Faserplatten mit einer Auflösung von $4 \mu\text{m}$, aus welchen die lokalen Faserorientierungen sowie Dichteprofile ermittelt wurden. Zusätzlich wurden mit anderen Methoden die Faserlängen- und Faserdurchmesser-Verteilungen bestimmt. Aufbauend auf diesen Mikrostrukturcharakteristika erzeugt man ein geeignetes Mikrostrukturmodell im Computer. Um die notwendige mittlere Holzfaserdichte zu erreichen, wird die Kompression des Faservlieses danach simuliert. Mithilfe der am ITWM entwickelten Software **FeelMath** können für mechanische Belastungen die Verformungen der einzelnen Holzfasern in einem kleinen Ausschnitt der Faserplatte berechnet werden. Die Behandlung derart komplexer Mikrostrukturen sucht weltweit ihresgleichen. Versieht man das entstandene Mikrostrukturmodell mit den mechanischen Parametern der Holzfasern und des Klebers, die neben dem elastischen auch das Bruchverhalten widerspiegeln, kann man die gemessene Festigkeit für Zug und Biegung der MDF-Platten mit hoher Genauigkeit vorhersagen.

Holzfasern separieren sich beim Refining nur unvollständig voneinander. Die verbleibenden Faserbündel sind ein Maß für die Refininggüte und schmälern die mechanischen Eigenschaften – intensiveres Mahlen hingegen ist mit einem höheren Energie- und Kostenaufwand verbunden und kann zudem die Fasern schädigen. Im Projekt gelang es, Faserbündel durch μ CT-Aufnahmen zu charakterisieren und deren Einfluss anschließend mechanisch abzubilden. So können Verbesserungen des Produktionsprozesses wesentlich besser beschrieben werden als durch Augenschein.

1 Computertomographie-Aufnahme einer MDF-Mikrostruktur

2 Segmentierte Fasern und Faserbündel für die μ CT-Aufnahme aus Bild 1

3 Virtuelle Mikrostrukturen, links: Mikrostruktur vor der Verpressung, rechts: Mikrostruktur nach der Verpressung

Wir bedauern zutiefst, dass unsere WKI-Kollegin Dr. Brigitte Dix, die das Projekt exzellent leitete, völlig unerwartet gestorben ist. Wir werden die gemeinsame Zeit in guter Erinnerung behalten.