



STRÖMUNGS- UND MATERIALSIMULATION



Gerät zur dynamisch-mechanischen Thermo-Analyse (DMTA) für die präzise inhouse Charakterisierung von Materialparametern, die für die Mikrostruktursimulation von porösen Medien und Verbundwerkstoffen benötigt werden. Mithilfe der Stickstoffkühlung und des Hygromators können Messungen in einem großen Temperatur- und Feuchtebereich durchgeführt werden. Schließlich dient das Gerät zur Validierung von Simulationsergebnissen.



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. Die Alleinstellung liegt in Entwicklung, Bereitstellung und spezifischer Anwendung von industriell tauglichen Multiskalen- und Multiphysics-Methoden und firmenspezifischen Softwarelösungen. Die Abteilung unterteilt sich in zwei größere Kompetenzbereiche: »Computergestütztes Materialdesign und Mikrostruktursimulation« ermöglicht die numerische Simulation und Optimierung funktionaler Eigenschaften von porösen Materialien und Verbundwerkstoffen. Intensiv nachgefragt sind unsere hocheffizienten mikromechanischen Methoden zur Materialauslegung faserverstärkter Verbundwerkstoffe und technischer Textilien. Die »simulationsgestützte Auslegung komplexer Strömungsprozesse« befasst sich unter anderem mit den dazugehörigen Herstellungsprozessen wie Mischen, Dispergieren, Einspritzen, Filtrieren, Beschichten und Separieren. Schwerpunkte der industriellen Anwendung sind Filtrations- und Separationsprozesse sowie die Produktauslegung von Filteranlagen oder anderer verfahrenstechnischer Apparate. Die Anwendungsprojekte im Bereich Elektrochemie befassen sich mit verschiedensten Aspekten sowohl bei der Materialauslegung von Batterie- oder Brennstoffzellen wie auch mit deren Herstellung, z. B. dem Befüllen von Batteriezellen.

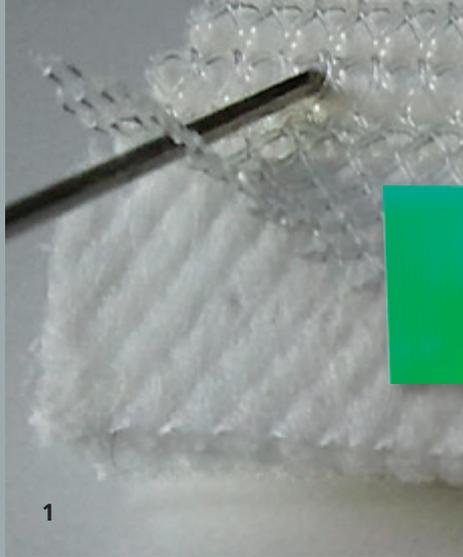
SCHWERPUNKTE

- Computergestütztes Materialdesign und Mikrostruktursimulation
- Simulationsgestützte Auslegung komplexer Strömungsprozesse
- Technische Textilien und Vliesstoffe
- Leichtbau und Dämmstoffe
- Filtration und Separation
- Elektrochemie und Batterien

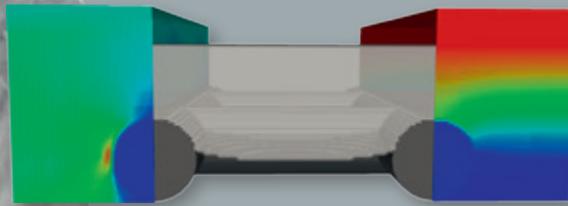
Kontakt

konrad.steiner@itwm.fraunhofer.de
www.itwm.fraunhofer.de/sms

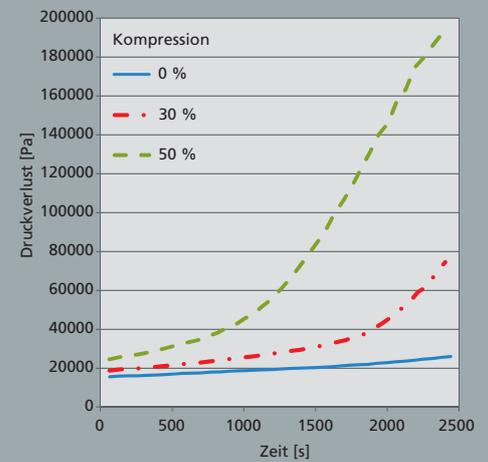




1



2



3

MODELLIERUNG UND SIMULATION ZUR OPTIMIERUNG VON MEHRLAGIGEN FILTERMEDIEN

1 *Abdrücke des Stützgewebes im Filtermaterial im Zuge der Faltenlegung*

2 *Simulierte Verdichtung des Filtermaterials und der damit verbundenen Auswirkungen; links: Strömungsgeschwindigkeit, Mitte: Form des Filtervlieses, rechts: Druckverteilung der Strömung*

3 *Zeitliche Entwicklung des Druckverlusts infolge der Beladung für unterschiedlich ausgeprägte Kompressionen des Filtermaterials*

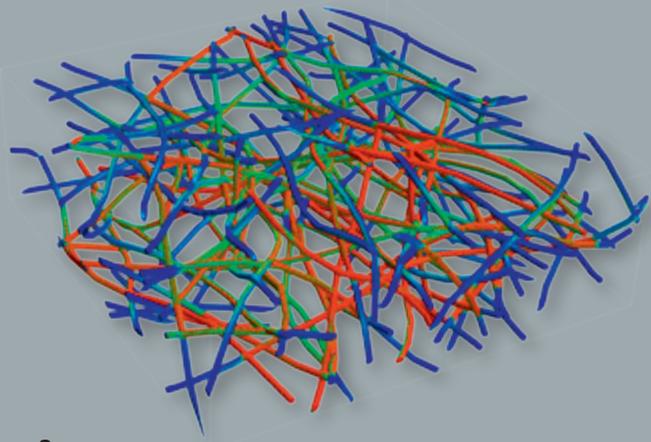
In vielen Filtrationsanwendungen hat sich gezeigt, dass spezialisierte Simulationssoftware die Entwickler von Filtermedien und -elementen bei der Produktinnovation und -optimierung unterstützt. Für die Aussagekraft der Simulationsergebnisse sind hier speziell Materialparameter wie Faservolumenanteil (Porosität), Strömungswiderstand (Permeabilität) und strukturmechanische Eigenschaften entscheidend für eine möglichst zuverlässige rechnergestützte Vorhersage.

Die Entwicklung von Filtermaterialien, welche eine hohe Schmutzaufnahmekapazität und Filtereffizienz bei gleichzeitig möglichst geringem Druckverlust bieten, ist eine große Herausforderung und entsprechend selten können homogene Filtermaterialien alle diese Ansprüche erfüllen. In vielen Fällen bestehen Filtermedien aus mehreren Lagen, wobei die Filtervliese mit Stützgeweben kombiniert werden, um auch bei hohen Volumenströmen die erforderliche mechanische Stabilität zu besitzen. Bei der Verarbeitung der einzelnen Lagen zu einem Medium (z. B. beim Plissieren) kommt es zu einer Kompression des mehrlagigen Aufbaus, und das Stützgewebe wird in die weicherer Vliesstoffschichten gedrückt. Dies führt lokal zu teilweise erheblichen Materialverdichtungen, die sich auf den Strömungswiderstand und die Filtrationseigenschaften auswirken. Rein empirische Herangehensweisen bei der Identifizierung geeigneter Materialkombinationen, optimaler Lagendicken und des geeigneten Fertigungsprozesses auf das Produkt sind mit erheblichem Aufwand verbunden.

Im Projekt »Virtuelle Werkbank zur Optimierung von Filtermedien« (ViWOFiM) werden Modelle und Algorithmen entwickelt, die die Entwicklung für solche Filtermaterialien erheblich beschleunigen können. Grundlage hierfür ist die Kopplung der Softwarepakete FeelMath und FiltEST, die in der Abteilung entwickelt werden. Unter Verwendung bekannter mechanischer Eigenschaften der Ausgangsmaterialien und Vorgabe eines Kompressionsgrades für den gesamten Lagenaufbau berechnet FeelMath die lokalen Deformationen in den einzelnen Komponenten. Die so gewonnenen lokalen Materialverdichtungen werden mithilfe geeigneter Modelle in eine Permeabilitätsverteilung des komprimierten Lagenaufbaus übersetzt. Das Strömungsmodul der Software FiltEST verwendet dies, um die Geschwindigkeits- und Druckverteilung zu berechnen und einen effektiven Strömungswiderstand abzuleiten. In ähnlicher Weise lassen sich die lokalen Filtrationseigenschaften in Abhängigkeit der lokalen Materialverdichtung bestimmen. Eine anschließende Filtrationssimulation liefert zusätzlich die effektive Filtereffizienz des komprimierten mehrlagigen Mediums.



1



2

MIKROMECHANISCHE SIMULATION DER RESILIENZ VON VLIESTOFFEN

Vliesstoffe sind ein wichtiger Bestandteil in diversen Produkten mit verschiedenen Anwendungsgebieten, z. B. Hygieneprodukte, Dämmstoffe oder Filter. In der Regel werden sie auf einer Reihe großer Anlagen hergestellt; daher gestalteten sich experimentelle Designstudien zur Optimierung dieser Vliesstoffstrukturen aufwändig. Es gibt sehr viele Designparameter, wie z. B. Fasern, Flächengewicht oder Vliesverfestigungstyp, welche die Vliesstoffeigenschaften beeinflussen. Zum Austausch eines einzelnen Parameters, beispielsweise des Fasermaterials, muss der vollständige Produktionsprozess vom Faserspinnen über die Faserablage bis hin zur Vliesverfestigung umgestellt werden. Im Anschluss an die Produktion eines solchen Prototyps wird eine aufwändige experimentelle Charakterisierung der Vliesstoffeigenschaften benötigt. Aufgrund dieser kostenintensiven Produktion und Charakterisierung sind detaillierte Studien mit mehreren Designparametern unwirtschaftlich.

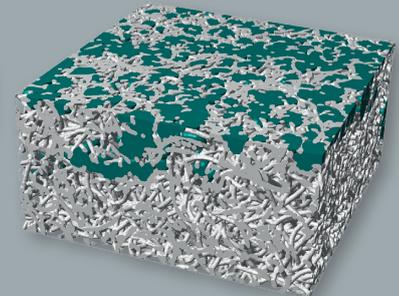
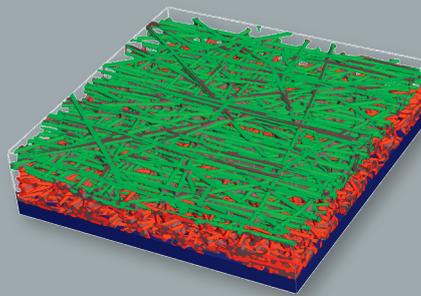
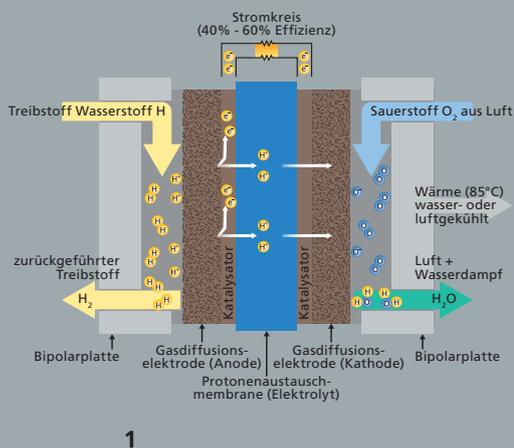
Daher werden am Fraunhofer ITWM in Kooperation mit der Procter & Gamble Service GmbH mikromechanische Simulationsmodelle entwickelt. Mithilfe dieser Modelle können die effektiven Vliesstoffeigenschaften numerisch für verschiedenste Designparameter vorhergesagt werden. Zum virtuellen Austausch einzelner Parameter werden in diesem Ansatz lediglich die entsprechenden Eingangsgrößen im Modell angepasst.

Der Fokus der numerischen Vorhersagen liegt hierbei vor allem auf dem zeitabhängigen Verhalten der Vliesstoffe. Die dynamischen Eigenschaften können durch numerische Nachbildung von zyklischen Messungen bestimmt werden. Dabei wird eine gute Übereinstimmung von Simulation und Messungen erzielt. Im Gegensatz zu Experimenten verlängert sich die benötigte Simulationszeit für das Verhalten bei niedrigen Frequenzen nicht. Somit sind durch die numerischen Modelle schnelle Vorhersagen für das Langzeitverhalten (Monate bis Jahre) und die entsprechende Resilienz von Vliesstoffen möglich. Sehr viele Varianten können innerhalb weniger Stunden simuliert und studiert werden. Ein weiterer Vorteil des mikromechanischen Ansatzes besteht darin, dass nicht nur effektive (makroskopische) Vliesstoffeigenschaften berechnet werden, sondern auch lokale Größen wie Spannungsverteilungen in Binder und Fasern bestimmt werden. Somit trägt die Simulation zum besseren Verständnis von Vliesstoffeigenschaften bei.

Zukünftige Entwicklungen beschäftigen sich mit der Erweiterung der Modelle in Richtung der Simulation des Herstellungsprozesses. Dies ermöglicht eine vollständige digitalisierte Auslegung von Vliesstoffen vom Herstellungsprozess bis hin zur Optimierung der Funktionalität.

1 *Im Computer generiertes Mikrostrukturmodell eines Vliesstoffes mit einer typischen anisotropen Faserorientierungsverteilung*

2 *Berechnete lokale Spannungen in den Fasern (rot: hohe Spannung, blau: niedrige Spannung), wenn der Vliesstoff zusammengedrückt wird. Diese Spannungen beeinflussen wesentlich die Vliesstoffeigenschaften.*



OPTIMIERUNG DER GASDIFFUSIONSSCHICHT ZUM EINSATZ IN PEM-BRENNSTOFFZELLEN

1 *Schematischer Aufbau einer PEM-Brennstoffzelle*

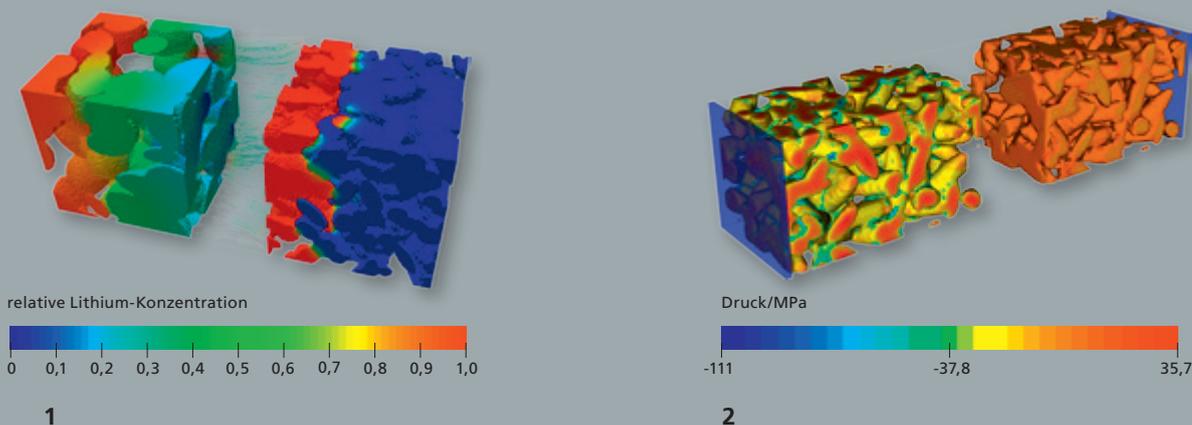
2 *Modell einer Gasdiffusionsschicht mit mikroporöser Schicht*

3 *Porosimetrie – Simulation des Eindringens von Wasser in die Gasdiffusionsschicht*

Wasserstoff als alternativer Energieträger wird bei zunehmend dezentraler Energieversorgung und schwindenden Ölreserven in Zukunft eine immer größere Rolle spielen. Die im Wasserstoff gespeicherte Energie kann mithilfe von Brennstoffzellen in nutzbare elektrische Energie umgewandelt werden. Vereinfacht gesprochen funktioniert eine solche Zelle wie folgt: Der zur Anode geführte molekulare Wasserstoff spaltet sich unter Abgabe von zwei Elektronen in H^+ -Ionen auf. Während die Elektronen über einen externen Stromkreislauf zur Energiegewinnung genutzt werden, diffundieren die H^+ -Protonen durch eine elektrolytische Membran zur Kathode. Dort reagieren die Protonen und die rücklaufenden Elektronen mit dem Sauerstoff der Luft zu Wasser.

Um die optimale Zufuhr von Sauerstoff zur Kathode und gleichzeitig den Abtransport des entstehenden Wassers zu garantieren, befindet sich zwischen Kathode und Luftzufuhrkanal eine sogenannte Gasdiffusionsschicht. Diese besteht in der Regel aus Karbonfaser-Vliesstoffen und einer mikroporösen Schicht aus Ruß. Durch Hydrophobisieren dieser Schicht wird für den Wasserabtransport gesorgt. Innerhalb des vom BMBF geförderten Forschungsverbundes OPTIGAA 2 arbeitet das Fraunhofer ITWM daran, Gasverteilerschichten mithilfe der Software GeoDict zu modellieren und Materialeigenschaften wie Strömungswiderstand und Diffusionswiderstand zu berechnen. Insbesondere werden hierbei die Materialeigenschaften bei unterschiedlichen Wassersättigungen der Diffusionsschicht, wie sie auch im Betrieb der Brennstoffzelle vorkommen, untersucht. Mithilfe der Porenmorphologiemethode können diese sättigungsabhängigen Materialkenngrößen auf einfache und effiziente Weise bestimmt werden.

Ziel des Forschungsverbunds ist es, das rechnergestützte Design von Brennstoffzellen zu ermöglichen. Dazu werden gemeinsam mit den Verbundpartnern Methoden erarbeitet, die einen Skalenübergang zwischen Feinstruktur, Brennstoffzelle und Brennstoffzellenstack erlauben. So können die am ITWM errechneten Materialparameter der verschiedenen Gasdiffusionsschichten in CFD-Simulationen der Brennstoffzelle benutzt werden. Insgesamt kann somit der Einfluss eines unterschiedlichen Komponentendesigns auf die gesamte Zelle untersucht und die entsprechende Komponente dementsprechend optimiert werden.



ELEKTROCHEMISCHE SIMULATION VON LI-IONEN-BATTERIEN: VOLUMENÄNDERUNG UND PHASENSEPARATION

Der verstärkte Ausbau der Elektromobilität erfordert eine Verbesserung der Kernkomponente eines Elektrofahrzeugs: der Lithium-Ionen-Batterie als Energiespeicher. Aufgrund ihrer hohen Kosten muss ihre Lebensdauer deutlich erhöht werden. Das Verständnis der limitierenden Degradationsmechanismen ist daher für die Industrie unbedingt notwendig. Ein wesentlicher Degradationseffekt resultiert aus der Volumenänderung einiger Anodenmaterialien während der Interkalation von Lithium-Ionen: So ändert z. B. Silizium, das durch seine hohe gravimetrische Kapazität als sehr vielversprechendes neues Anodenmaterial gilt, sein Volumen um 300 Prozent. Die entstehenden mechanischen Spannungen können zu Rissen innerhalb der Elektrode und so zum Kapazitätsverlust führen.

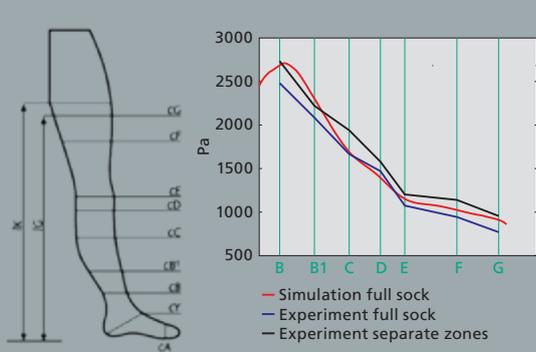
Um diese Einflüsse besser bewerten zu können, wurden im AiF-Projekt ALIB (Ausdehnung von Li-Ionen-Batteriezellen) die bestehenden elektrochemischen Simulationsmodelle, wie sie in unserer Software BEST (Battery and Electrochemistry Simulation Tool) implementiert wurden, derart erweitert, dass auch mechanische Effekte wie die Volumenänderung beachtet werden. Grundsätzlich berechnet BEST den Ionen- und Ladungstransport in der Batterie, um prädiktive Aussagen über das Batterieverhalten machen zu können. Hierzu kann die 3D-Mikrostruktur der Elektroden berücksichtigt werden, die sich z. B. aus der Rekonstruktion bildgebender Verfahren ergibt. In Zusammenarbeit mit unseren Kooperationspartnern am Helmholtz-Institut Ulm wurde die ursprüngliche Modellierung dahingehend erweitert, dass nun auch die von der Lithium-Konzentration abhängige Volumenänderung sowie der Aufbau mechanischer Spannungen beschrieben werden können. Zusätzlich wird der durch inhomogene mechanische Spannungen bedingte Einfluss auf den Ionen- und Ladungstransport und die Interkalationsreaktion berücksichtigt. Die numerische Lösung erfolgt über eine Kopplung unseres Batterielösers BEST mit unserem Mechaniklöser FeelMath, der die mechanischen Gleichungen hocheffizient über eine Fourier-Methode berechnet.

Für bestimmte Ladezustände zeigen manche Elektrodenmaterialien darüber hinaus ein Phasenseparationsverhalten in eine Li-reiche und eine Li-arme Phase. Es wird erwartet, dass dies mechanische Degradation noch einmal verstärken kann. Durch Hinzufügen eines Phasenfeldmodells ist es gelungen, die Effekte von Elektrochemie, Mechanik und Phasenseparation inklusive der Wechselwirkung mit dem Elektrolyten unter Berücksichtigung der Elektrodenmikrostruktur numerisch zu beschreiben. Auf diese Weise lässt sich nicht nur das durch die Mechanik beeinflusste Batterieverhalten vorhersagen, sondern auch das Risiko mechanischer Degradation abschätzen.

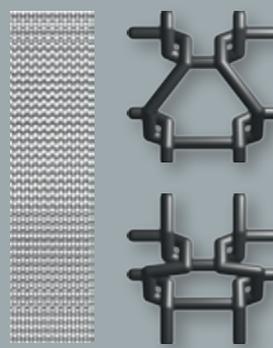
1 *Simulierte Konzentrationsverteilung im Elektrodenmaterial: Während sich die Ionen in der linken Elektrode durch reine Diffusion bewegen, zeigt die Elektrode rechts deutlich das Phasenseparationsverhalten in eine klar getrennte Li-reiche (rot) und eine Li-arme (blau) Phase.*

2 *Simulierte Druckverteilung in der Elektrodenmatrix aufgrund der inhomogenen Lithium-Ionen-Verteilung*

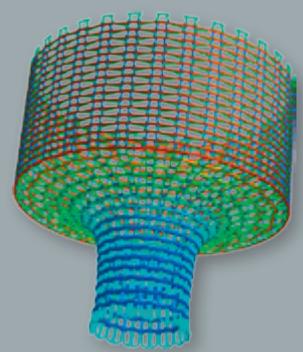
BEST



Input (Beinabmessung (Länge, Umfang), Druckprofil)



Designoptimierung im entspannten Strumpf



Rücktransformation in die Maschinensteuerungsparameter

1

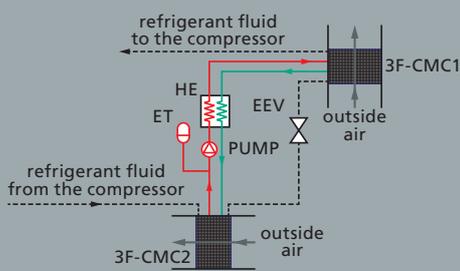
MODELLIERUNG, SIMULATION UND OPTIMIERUNG VON GESTRICKTEN KOMPRESSIONSTRÜMPFEN

1 Patientenspezifische Optimierung der Strickmaschinenparameter für Kompressionsstrümpfe

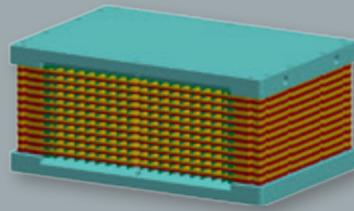
Die Firma BSN medical fertigt Produkte aus unterschiedlichen Gestriken, unter anderem rundgestrickte Kompressionsstrümpfe. Ein besonderes Kennzeichen dieser ist, dass sie bei gleicher Grundkonstruktion in verschiedensten Ausführungen entwickelt und hergestellt werden. Beispielsweise können Kompressionsstrümpfe mit unterschiedlichen Kompressionsklassen aus demselben Material hergestellt werden. Wichtiges Konstruktionsmerkmal aller Kompressionsstrümpfe ist, dass neben dem Garn zur Maschenbildung noch ein weiteres Garn beigelegt wird; erst aus dem Zusammenwirken der beiden Materialien entstehen die endgültigen Eigenschaften.

BSN medical hat das Ziel, den heute stark erfahrungsgesteuerten Entwicklungsprozess zu standardisieren und automatisieren. Beispielsweise soll ein bestimmter Kompressionsstrumpf aus einem neuen Material virtuell ausgelegt werden können, sodass bei dem neuen Produkt die ursprünglichen Kompressionseigenschaften beibehalten werden. Des Weiteren könnten Maschinenparameter bestimmt werden, um die Kompression an definierten Stellen bei unverändertem Material gezielt zu modifizieren. Letztendlich soll auch die Möglichkeit geschaffen werden, patientenspezifische Strümpfe am Rechner auszulegen. Am ITWM werden dazu spezielle Algorithmen in dem eigenen Berechnungstool TexMath umgesetzt. Bei der numerischen Umsetzung wird als Werkzeug die Finite-Element-Methode mit nichtlinearen Truss-Elementen gewählt, die für die Kontaktprobleme um eine zusätzliche interne Variable – das Gleiten von Fäden an Kontaktknoten – erweitert ist. Die Reibungskraft wird mit dem Euler-Eutzelwein-Gesetz modelliert und die nichtlinearen Probleme werden für die elastische Verformung und das Gleiten unter der Reibkraft in zwei separaten Newtonverfahren gelöst. Mit diesem Berechnungsprogramm wird am ITWM der Strickvorgang eines Kompressionsstrumpfes anhand verschiedener Faden- und Maschinenparameter simuliert und visuell dargestellt. Die daraus resultierenden virtuellen Strümpfe werden in einer weiteren Simulation wieder belastet, um Kraft-Dehnungskurven zu erhalten. Diese zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen. Weiterhin wird der virtuell gestrickte Strumpf einem virtuellen Bein angezogen. Dies geschieht anhand von sieben Abmessungen entlang der Beinachse. Somit lassen sich vorab die Eigenschaften des Strumpfes anhand des erzeugten Druckprofils bewerten.

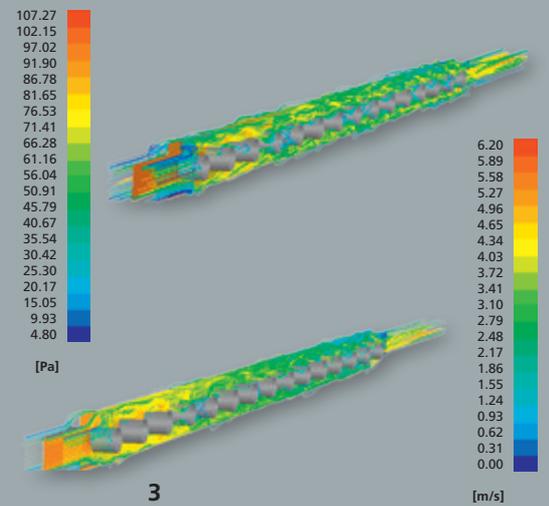
Das Projektziel ist das Erreichen eines vorgegebenen Spannungsprofils bei einem verformten Gestrick. Dabei werden bei vorgegebenen Garneigenschaften optimale Maschinenparameter gesucht, um in allen Beinachsen die Abweichung der Spannung im Strumpf vom Ziel-Spannungsprofil zu minimieren.



1



2



3

XERIC: INNOVATIVES KLIMA-KONTROLLSYSTEM FÜR ELEKTROFAHRZEUGE

Das innerhalb des EU-Programms Horizon 2020 ins Leben gerufene Projekt XERIC hat das Ziel, eine neue Klimaanlage zu entwickeln, die in batteriebetriebenen Elektrofahrzeugen deutlich energieeffizienter arbeitet als herkömmliche Klimasysteme. Die Klimaanlage soll den Insassen unter allen möglichen Wetterbedingungen komfortable Innenraumbedingungen bieten. Herzstück des Systems sind innovative Membrankontaktoren (3-Fluid-Combined-Membrane-Contactors, kurz 3F-CMCs), die gleichzeitig von Luft, einer wässrigen Trockenmittellösung (um die Luft zu entfeuchten) und einem Kühlmittel (um die Trockenmitteltemperatur zu kontrollieren und die Luft teilweise zu kühlen) durchströmt werden. Sensible und latente Wärmeaustauschvorgänge zwischen Luft und Trockenmittel finden durch eine hydrophobe Membran statt, die nur für Wasserdampf, aber nicht für Flüssigkeiten durchlässig ist. Um die möglichen Energieeinsparungen von 35 bis 40 Prozent erreichen zu können, arbeiten alle Projektpartner bei der Entwicklung eng zusammen.

Die Aufgaben des Fraunhofer ITWM innerhalb des Projektes liegen in der mathematischen Modellierung und Computersimulation für eine verbesserte und robuste Auslegung des Systems. Die Simulationsergebnisse werden in unterschiedlichen Stadien der Entwicklung genutzt und haben zum Ziel, die Entwicklung und die Leistungsfähigkeit des 3F-CMC zu optimieren. Da im Betrieb der Klimaanlage hohe Drücke auftreten und außerdem starke Temperaturgefälle entstehen, wird dafür zunächst ein passendes Gehäuse entwickelt, welches dem Druck und den Temperaturschwankungen standhalten kann und nicht unnötig schwer und groß ist. Die mechanische Stabilität des Gehäuses wurde in zahlreichen Studien untersucht. Außerdem sind die Membranen, die Luft und Trockenmittel trennen, sehr dünn, weshalb Abstandhalter im Luftkanal erforderlich sind, um ein Durchbiegen zu vermeiden. Der Abstandhalter erzeugt jedoch wiederum höhere Druckverluste im Luftkanal und muss daher ebenfalls im Hinblick auf den Strömungswiderstand optimiert werden. Da große Konzentrationsgradienten die Leistungsfähigkeit des 3F-CMC senken, wurden 3D-Simulationen des Wärme- und Massetransports ausgeführt, um die Dampfkondensationsdynamik besser verstehen zu können. Letztendlich wird auch die Frostbildung modelliert werden, damit das neue Airconditioning-System für eine breite Palette von Temperaturen und Luftfeuchtigkeit eingesetzt werden kann.

1 Konstruktion eines Air Conditioning-Systems mit zwei 3F-CMC

2 CAD-Design eines 3F-CMC Prototypen

3 Luftdruck- und Geschwindigkeitsverteilung für eine untersuchte Abstandshaltergeometrie