



STRÖMUNGS- UND MATERIALSIMULATION



Gemeinsam mit dem Institut für Verbundwerkstoffe (IVW) entwickeln wir im »Leistungszentrum Simulations- und Software-basierte Innovation« Simulationsmethoden zur Virtualisierung des Sheet Molding Compounding von Faser-Kunststoff-Verbunden. Das Bild zeigt die SMC-Anlage mit Duroplastimprägnierung und Absauganlage im Technikum des IVW.



INDUSTRIELL TAUGLICHE MULTISKALEN- UND MULTI-PHYSIKMETHODEN UND SOFTWARELÖSUNGEN

Die Abteilung entwickelt Multiskalenmethoden und Softwaretools für die Produktentwicklung sowie deren Prozessauslegung. Eine der typischen Herausforderungen ist für uns, die wechselseitige Beeinflussung von Fertigungsverfahren und multifunktionalen lokalen Materialeigenschaften simulationstechnisch zu beherrschen. Unser Alleinstellungsmerkmal liegt in der Entwicklung, Bereitstellung und spezifischen Anwendung von industriell tauglichen Multiskalen- und Multiphysikmethoden sowie firmenspezifischen Softwarelösungen.

Die Abteilung unterteilt sich – auch schon namentlich – in zwei große 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 u. a. mit den zugehörigen Herstellungsprozessen wie Mischen, Dispergieren, Einspritzen, Filtern, Beschichten und Separieren. Schwerpunkte der industriellen Anwendung sind Filtration- und Separationsprozesse sowie die Produktauslegung von Filteranlagen oder anderer verfahrenstechnischer Apparate.

Die Anwendungsprojekte adressieren oft sowohl Materialdesign als auch Strömungssimulation. So befassen wir uns im Bereich Elektrochemie mit verschiedensten Aspekten sowohl in der Materialauslegung von Batterie- oder Brennstoffzellen wie auch mit deren Herstellung, wie beispielsweise dem Befüllen von Batteriezellen.

Kontakt

konrad.steiner@itwm.fraunhofer.de

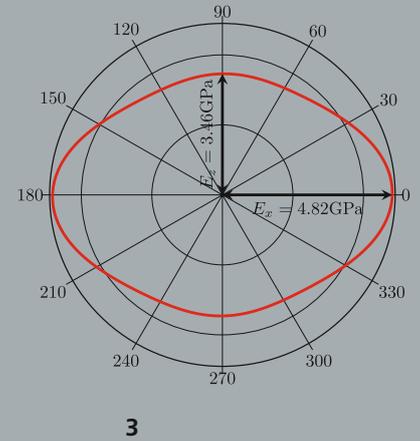
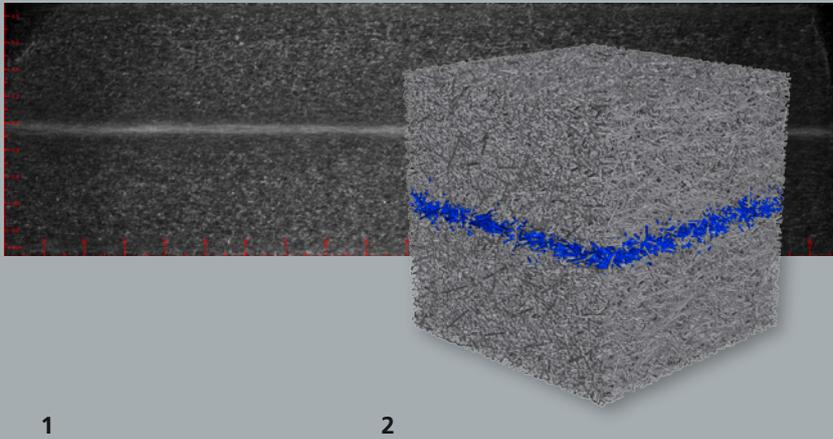
www.itwm.fraunhofer.de/sms



SCHWERPUNKTE

- Technische Textilien und Vliesstoffe
 - Mikrostruktursimulation und virtuelles Materialdesign
 - Leichtbau und Dämmstoffe
 - Filtration und Separation
 - Komplexe Fluide und Mehrphasenströmung
 - Elektrochemie und Batterien
-





MEHRSKALENSIMULATION VON FASERVERSTÄRKTEN BAUTEILEN

1 *μCT-Aufnahme von kurzglasfaserverstärktem PBT mit ausgepägter Mittelschicht*

2 *Computermodell eines kurzglasfaserverstärkten PBTs, erstellt mit dem Softwaretool GeoDict*

3 *Berechnete effektive Verbundsteifigkeit in Dicken- und Längsrichtung*

Faserverstärkte Kunststoffbauteile sind von essentieller Bedeutung in verschiedenen Anwendungen, wie zum Beispiel im Automobilbau oder in der Medizintechnik. Im Projekt MuSiKo entwickeln wir Mehrskalensimulationen von faserverstärkten Bauteilen.

Bei mikrostrukturierten Materialien hängt das makroskopische Deformations- und Versagensverhalten maßgeblich von der Mikrostruktur ab, da sie vom Herstellungsprozess beeinflusst wird. So kann es z. B. bei faserverstärkten Polymermatrizen wie Polybutylenterephthalat (PBT) zu Matrixversagen, Faserbruch und Delamination kommen. Zur Vorhersage dieser Effekte reicht eine makroskopische Betrachtung oft nicht aus oder es müssen komplizierte phänomenologische Modelle verwendet werden, welche nur für spezielle Versagensfälle gültig sind.

Verbundforschungsprojekt MuSiKo

Im BMBF-Verbundprojekt MuSiKo entwickeln wir effiziente Mehrskalensimulationstechniken gemeinsam mit Forschern der Technischen Universität Kaiserslautern, der Universität des Saarlandes und des Karlsruher Institutes für Technologie. Die Abkürzung steht für »Adaptive Approximationsverfahren zur Multiskalensimulation des nichtlinearen Verhaltens von Kompositen«. Die Industriepartner Robert Bosch GmbH und Siemens PLM Software unterstützen das Forschungsprojekt.

Der verwendete Mehrskalensatz basiert auf einer gekoppelten Lösung des makroskopischen und des mikroskopischen Problems. Als Eingangsparameter für die Simulation müssen lediglich die Eigenschaften der Matrix und der Fasern sowie die lokale Faserorientierung bestimmt werden. Das mechanische Verhalten auf der Bauteilebene ergibt sich durch die gemittelten mikroskopischen Größen.

Prozesskette für glasfaserverstärkte Kunststoffe

Im Projekt MuSiKo, welches im Jahr 2017 erfolgreich abgeschlossen wurde, haben wir gemeinsam mit den Partnern die komplette Prozesskette für glasfaserverstärkte Polybutylenterephthalat-Kunststoffe (PBT) durchgeführt – von der Messung der Stoffeigenschaften über die Bestimmung der Faserorientierung mittels μ CT bis hin zur Mehrskalensimulation. Die Simulationsergebnisse sind durch entsprechende Bauteilmessung validiert.

Durch diese Simulationstechnik ist es möglich, den Spritzgussprozess (z. B. Temperatur, Angussstellen) von faserverstärkten Bauteilen hinsichtlich der Bauteilfunktionalität zu optimieren.



MATERIALGESETZE FÜR DIE BAUTEILSIMULATION AUTOMATISCH ERMITTELN

Faserverstärkte Kunststoffe spielen im Leichtbau eine große Rolle. Gründe hierfür sind das gute Gewicht-Steifigkeitsverhältnis sowie die kosteneffizienten und massenproduktionsstauglichen Fertigungsverfahren. Für die Entwicklung und Auslegung von kurzfaserverstärkten Bauteilen haben wir in mehreren Projekten mit Bosch eine integrative Simulationskette entwickelt, die den Fertigungsprozess und die daraus erzeugten Materialeigenschaften automatisch berücksichtigt.

Bei den Fertigungsverfahren der faserverstärkten Kunststoffe wird die Kunststoffmasse bei mittlerem bis hohem Druck in eine Bauteilform eingespritzt bzw. gepresst. Die entstehenden Strömungsvorgänge beeinflussen die Faserorientierung und damit die mechanischen Eigenschaften wesentlich.

Integrative Simulationskette

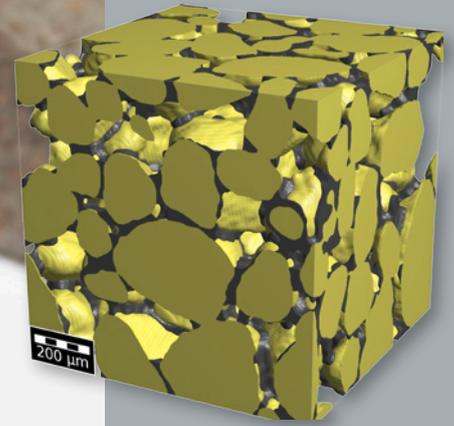
Vor der Bauteilsimulation, in der sogenannten Offline-Phase, befüllen wir zunächst eine Materialdatenbank für verschiedene Faserorientierungen. Dies geschieht unter Verwendung von mikro-mechanischen Simulationen aus FeelMath und Modellreduktionsmethoden. FeelMath ist ein von uns entwickeltes Analyse-Tool zur Berechnung effektiver mechanischer und thermischer Eigenschaften von Mikrostrukturen, die durch Volumenbilder (beispielsweise CT-Aufnahmen) oder analytische Beschreibungen gegeben sind. Anschließend werden die Ergebnisse der Spritzgussimulation mit den Softwarelösungen FLUID, Moldflow oder Moldex 3D auf das Finite-Elemente-Netz (FE-Netz) der Bauteilsimulation übertragen.

Während der Bauteilsimulation mit Abaqus interpolieren wir abhängig von den tatsächlich auftretenden Faserorientierungen zwischen den in der Offline-Phase ermittelten Materialgesetzen und berücksichtigen auf diese Weise die lokal veränderlichen mechanischen Eigenschaften. Dieses Vorgehen ermöglicht es uns, das Leichtbaupotenzial von faserverstärkten Kunststoffen voll auszunutzen und vermeidet übergroße Sicherheitsfaktoren bei der Auslegung.

1 Beispiel für ein faserverstärktes Kunststoffteil: die Steckschnalle eines Lanyards

2 Oben: Randbedingung der Abaqus-Simulation; unten: von Mises-Vergleichsspannungen der Abaqus-Simulation





µ-KERN: MIKROSTRUKTURBASIERTE BERECHNUNGSMETHODE FÜR SANDKERNE

1 Der Sandkern wurde durch ein Kernschießverfahren am UTG erzeugt. Die Sandkörner sind durch ein Bindemittel zu einer Form gebunden.

2 In der virtuell erzeugten Mikrostruktur sind Sandkörner in beige und Binder in grau zu sehen.

Die Gießereitechnik benutzt Sandkerne, um Kühlkanäle in einem Zylinderkopf abzubilden. Diese werden vor dem Abguss der metallischen Schmelze in die Außenform eingelegt und nach dem Gießprozess zerstört, um ein sandfreies Gussteil zu erzeugen. Sie bestehen aus dem granularen Stoff Quarzsand, der durch ein Bindemittel zu einem porösen Komposit gebunden wird. Wir entwickeln im Projekt µ-Kern mikromechanische Simulationsmodelle für Sandkerne in Kooperation mit dem Lehrstuhl für Umformtechnik und Gießereiwesen (UTG) an der TU München.

Eigenschaften von anorganisch gebundenen Sandkernen berechnen

Ein neuartiger anorganischer Binder auf Silikat-Basis erfüllt strengere Umweltschutzgesetze und ermöglicht eine nachhaltige, emissionsarme Produktion. Aber dieser Wechsel der verwendeten Komponenten verändert das physikalische Verhalten des Sandkerns und das Ergebnis ist erst nach Durchlauf der gesamten Prozesskette sichtbar. Um die Entwicklung zu beschleunigen, modellieren und simulieren wir den Prozess.

Ausgehend von Eingangsparametern – wie dem Herstellungsprozess und den verwendeten Materialien – berechnen wir effektive physikalische Eigenschaften wie Festigkeit, Gasdurchlässigkeit und Wärmeleitfähigkeit. Im ersten Teil des Projekts erzeugen wir eine repräsentative Mikrostruktur für das Sand-Binder-Komposit. Im Mikro-Computertomographen erstellen wir hochaufgelöste Strukturaufnahmen von existierenden Kompositen.

Validierung der erzeugten Strukturen

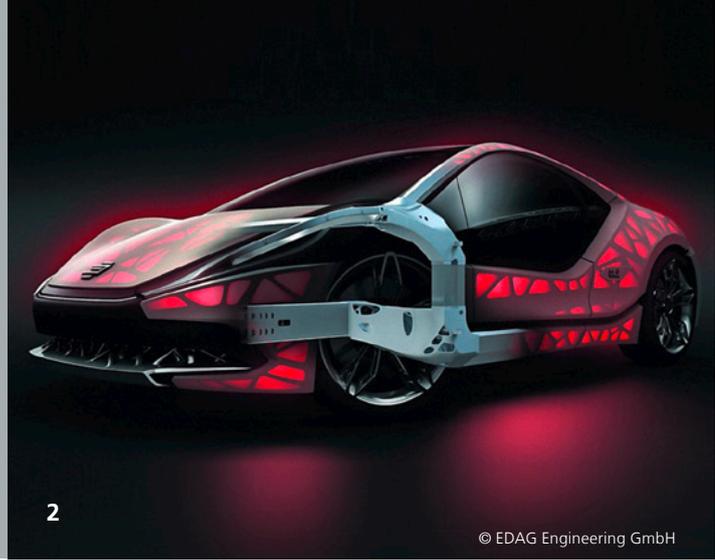
Die Partner des UTG messen die elastischen Eigenschaften des Sandes und des Binders. Dann erzeugen wir virtuelle Mikrostrukturen mit stochastischen Methoden und validieren diese, indem wir sie mit den Strukturaufnahmen vergleichen. Die Eigenschaften des Sandes, wie Kornform, -größe sowie -größenverteilung, und des Binders, wie Volumengehalt und chemische Zusammensetzung, beeinflussen die physikalischen Eigenschaften des Komposits. Wir untersuchen die Abhängigkeit der elastischen Spannungen im Komposit von den elastischen Eigenschaften der verwendeten Materialien Quarzsand und Wasserglas.

Im zweiten Teil des Projekts berechnen wir zudem die Gasdurchlässigkeit und die Wärmeleitfähigkeit. Dafür benutzen wir das Stokes/Navier-Stokes-Modell. Außerdem verallgemeinern wir das elastische Modell auf nichtlineare Schädigungseffekte.



1

© Fraunhofer ILT, Fraunhofer IPT



2

© EDAG Engineering GmbH

MODELLIERUNG UND SIMULATION ADDITIVER FERTIGUNG MITTELS SELEKTIVEN LASERSCHMELZENS

Additive Fertigungsverfahren sind heutzutage fester Bestandteil der industriellen Produktion für hochbeanspruchte und nur in kleinen Stückzahlen benötigte Bauteile – wie z. B. Schaufeln oder Kraftstoffdüsen für Gasturbinen. Neben der Luftfahrt ist der Automobilbau wegen seiner großen Produktvielfalt für die additive Fertigung prädestiniert. Im Rahmen des BMBF-Projekts CustoMat3D entwickeln wir gemeinsam mit Kooperationspartnern Simulationsansätze in diesem Bereich.

Neue Freiheitsgrade und Möglichkeiten in Formgebung

Das Grundprinzip der additiven Fertigung, der schichtweise Aufbau, eliminiert viele Einschränkungen bezüglich der Formgebung. Im Gegensatz zu den etablierten Fertigungsmethoden ermöglicht dies, Strukturbauteile nicht mehr nur als »Einheitsstruktur« auf den Worst-Case-Lastfall auszuliegen, sondern das variantenabhängige Leichtbaupotenzial voll auszunutzen.

Die derzeit verwendeten Aluminiumlegierungen sind im Allgemeinen nicht für einen speziellen Einsatzzweck maßgeschneidert und schöpfen somit das Kosten- sowie Gewichtsreduktionspotenzial nicht aus. Zudem ist der optimale Simulationsansatz noch Gegenstand aktueller Forschung.

Maßgeschneiderte Aluminiumwerkstoffe für die Automobilindustrie

Im Projekt CustoMat 3D arbeiten wir mit Daimler, Concept Laser, MAGMA Gießereitechnologie, Fraunhofer IAPT, ECKA Granules, FKM Laser Sintering, dem Institut für Werkstofftechnik IWT sowie Altair Engineering zusammen. Das Projekt wird gefördert im Rahmen der BMBF-Ausschreibung »ProMat_3D«. Ziel ist die simulationsgestützte Entwicklung und Qualifizierung von maßgeschneiderten Aluminiumwerkstoffen für die laseradditive Fertigung in der Automobilindustrie.

In Kooperation mit MAGMA entwickeln wir neue Simulationsansätze für die dabei auftretenden, extrem schnellen Phasenumwandlungen und Erstarrungsprozesse sowie den sich daraus ergebenden Materialgefügen. Zur Vorhersage des Verzugs berücksichtigen wir alle relevanten Längen- und Zeitskalen. Das heißt, es werden besonders einbezogen:

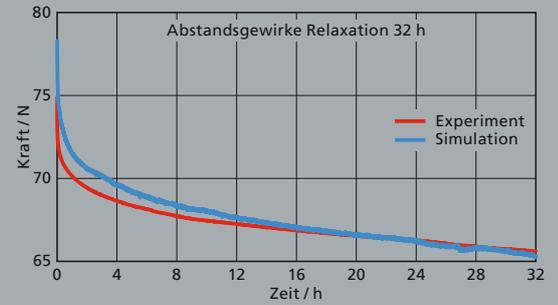
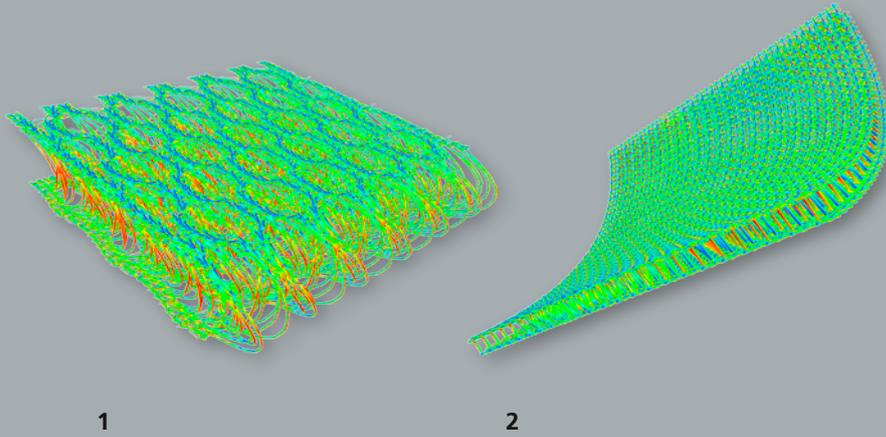
- die Details des Pulvers sowie des Schmelzbads in der Nähe des Lasers
- die Auswirkungen des punktförmigen Wärmeeintrags durch den Laser auf die Eigenspannungs- und Temperaturverteilung im gesamten Bauteil

Wir entwickeln eine simultane Mehrskalermethode, die das Bauteil in ein Nah- und Fernfeld unterteilt und – an die lokalen physikalischen Gegebenheiten angepasst – modelliert und diskretisiert.

1 *Beim selektiven Laserschmelzen wird der zum Bauteil gehörende Anteil der Pulverschicht zunächst aufgeschmolzen und dann für eine bessere Oberflächengüte die Kontur nachgefahren.*

2 *Die Karosserien von morgen sind nicht nur leichter, sondern vor allem hochflexibel konzipiert. Der Concept Car EDAG Light Cocoon wurde mit einer umfassend bionisch optimierten und generativ gefertigten Fahrzeugstruktur konzipiert.*





SIMULATION MECHANISCHER EIGENSCHAFTEN VON ABSTANDSGEWIRKEN

- 1 *Kompressionsberechnung eines Abstandsgewirkes*
- 2 *Biegungsberechnung eines Abstandsgewirkes*
- 3 *Vergleich von simulierter und gemessener Relaxationskurve von Abstandsgewirken unter Kompression*

In verschiedenen Projekten simulieren wir Abstandsgewirke. Dabei handelt es sich um doppelflächige Textilien, in Form von Platten oder Schalen, die aus zwei gestrickten ebenen Schichten bestehen und durch vertikale Abstandsfäden verbunden sind. Sie finden zum Beispiel in Matratzen und Sitzen Verwendung.

Die Eigenschaften von Abstandsgewirken sind charakterisiert durch verschiedene Parameter der Einheitszelle, wie die Periode, die Dicke und die Höhe der Fasern. Wir berechnen u. a. die resultierende effektive Steifigkeit und Durchlässigkeit. Um Rechenaufwand zu reduzieren, wenden wir Homogenisierungs- sowie Dimensionsreduktionalgorithmen an. Das Abstandsgewirke wird durch eine äquivalente effektive elastische zweidimensionale Schale dargestellt.

Dabei wird die aufgelöste Mikrostruktur für die Strömungssimulation beibehalten, um die effektive Durchlässigkeit zu berechnen. Das Verhältnis zwischen den geometrischen Parametern und der Belastung bestimmt, wie stark Biegung oder Zug auf der Fasermikroebene ausfällt.

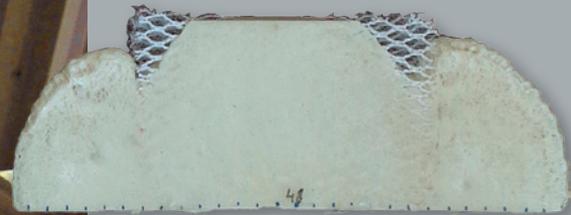
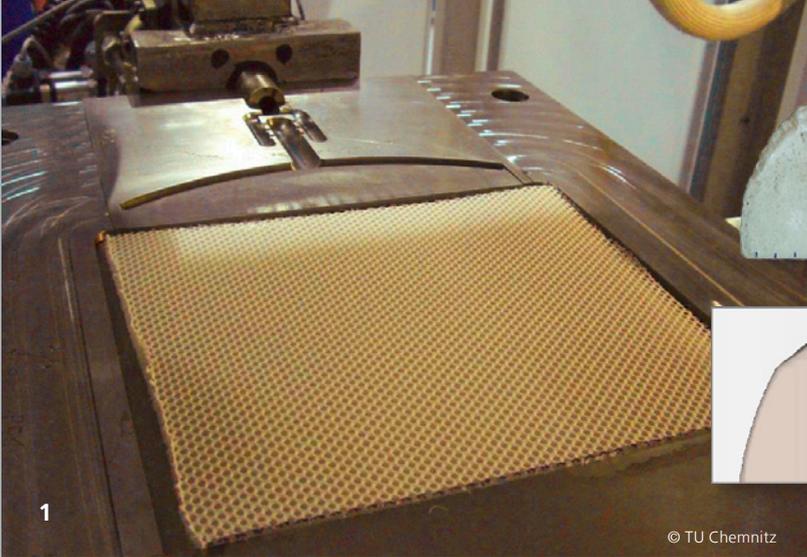
Abstandsgewirke weisen hohe Biegsamkeit, Flexibilität und Festigkeit auf

Einer der Vorteile von Abstandsgewirken ist die gute Druckentlastung. Das heißt, ist das Material einer äußeren Druckbelastung ausgesetzt, weist es eine hohe Biegsamkeit, Flexibilität und Festigkeit auf. Im Prozess der Simulation bilden wir zunächst die komplexe Struktur der Abstandsgewirke nach, dabei werden alle Bindungen jedes gestrickten Fadens aufgelöst. Daraufhin werden die Zug-, Schub-, Kompressions- und Biegeeigenschaften mit TexMath simuliert – einer von uns entwickelten Software zur Modellierung und Analyse von textilen Materialien.

DFG-Projekt: Struktur-Eigenschaftsmodellierung von 3D-Abstandsgewirken

Die Eigenschaften ergeben sich aus dem Strickmuster und den bekannten Kraft-Dehnungs-Kurven-, Querschnitts- und Reibungseigenschaften von Garnen. TexMath ermöglicht die Analyse von räumlichen Variationen des Textildurchlässigkeitstensors, die durch ungleichmäßige Kompression der Struktur entstehen. Dies ist auch Bestandteil des Projektes »Struktur- und Eigenschaftsmodellierung textiler 3D-Abstandsgewirke«, das von der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) gefördert wird. Hier arbeiten wir gemeinsam mit der Technischen Universität Dresden.

Eine andere Frage ist, welchen Anteil die Fasertorsion zu den gesamten effektiven viskoelastischen Eigenschaften beiträgt. Dabei stellte sich heraus, dass die Relaxationszeit des Gewirkes mit der Relaxationszeit der Garntension für Abstandsgewirke übereinstimmt, wie in Abb. 3 gezeigt.



© TU Chemnitz

RIM-VERFAHREN VON POLYURETHAN-SCHÄUMEN FÜR DIE ENTWICKLUNG VON VERBUNDMATERIALIEN

Verbundwerkstoffe gelten als stabil und leicht. Textilverstärkte Verbundwerkstoffe aus Polyurethan(PU)-Schäumen sind dabei aufgrund ihrer physikalischen und mechanischen Eigenschaften besonders prädestiniert. Mit unserer Simulationsplattform CoRheoS und unserer Software FLUID bilden wir den Formfüllprozess der Schäume ab.

PU-Schäume komplex und schwer zu untersuchen

Beim RIM-Prozess (RIM = Reaction Injection Moulding) von PU-Schäumen wird ein Polymergemisch in eine Form gepresst, in der sich das Material nach wenigen Sekunden von einer Emulsion mit niedrigem Molekulargewicht durch Polymerisation zu einem komplexen Polymer-schaum entwickelt.

Die Produktionsphase, die durch Vormischen der Reaktionspartner eingeleitet wird, weist zusammen mit der Entwicklung des Fließverhaltens, der Hitze, Gasbildung und Ausdehnung ein komplexes physikalisches Verhalten auf. Dies macht PU-Schäume extrem schwierig zu untersuchen.

Optimale Simulationswerkzeuge für industrielle Anwendung entwickeln

Deshalb entwerfen wir mathematische Modelle, welche die bei der Schaumausdehnung auftretende Dynamik vorhersagen und wenden sie an, um den Formfüllprozess im Reaktionsspritzguss zu untersuchen. Mit der Plattform CoRheoS und der Software FLUID führen wir die numerischen Untersuchungen durch. Dabei ermitteln wir die erforderliche Menge an Material, um die Form vollständig zu füllen, und die Verteilung der Schaumanteile im ausgedehnten Material.

Um den Ausdehnungsprozess durch Textilstrukturen, insbesondere Abstandsgewirke, zu untersuchen, ermitteln wir per TexMath – einer von uns entwickelten Software für die Modellierung und Analyse von textilen Materialien – die relevanten Durchlässigkeits-Tensoren. TexMath ermöglicht die Analyse von räumlichen Variationen der Tensoren, die durch ungleichmäßige Kompression entstehen (siehe Seite 36).

Die so gewonnenen Daten nutzen wir in FLUID und erweitern damit unsere numerischen Untersuchungen um die Vorhersage der Schaumausdehnung durch maschengestrickte Textilien. Unsere Ergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, die am Lehrstuhl für Strukturleichtbau und Kunststoffverarbeitung der TU Chemnitz gewonnen wurden. Wir stellen somit Simulationswerkzeuge für die effiziente industrielle Anwendung bereit, die bei Optimierung, Herstellung und Entwicklung von Verbundwerkstoffen unterstützen.

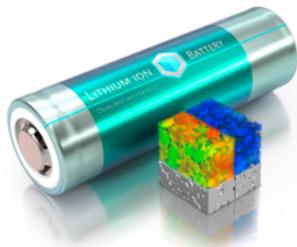
1 RIM-Prozess eines PU-Schaums mit Abstandsgewirke

2 Vergleich der Füllfronten bei einer Infiltrationsstudie





NEWS AUS DER ABTEILUNG



© 2017 Math2Market GmbH



»BATTERYDICT« – BEST MEETS GEODICT

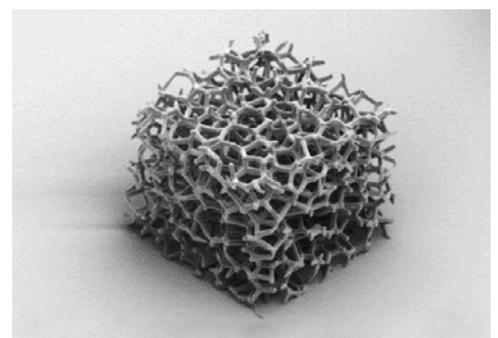
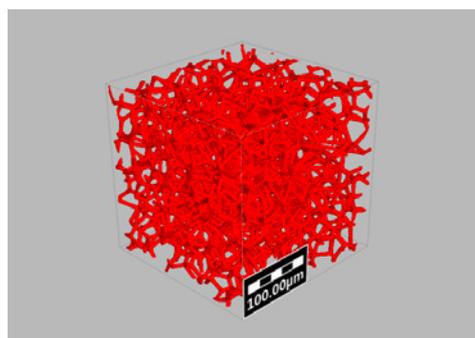
Seit 2017 wurde die Zusammenarbeit mit Math2Market (M2M) auch im Bereich der Batteriesimulationen deutlich verstärkt, um das »Battery and Electrochemistry Simulation Tool« (BEST) des Fraunhofer ITWM und GeoDict von M2M enger zu verzahnen. Hieraus ist das neue GeoDict-Modul »BatteryDict« entstanden, das komplett in GeoDict 2018 integriert ist und die Lösungsalgorithmen der BEST-Löser ansteuert. Somit gibt es neben der Stand-Alone-Batteriesimulationssoftware BEST nun auch eine vollständig in GeoDict integrierte Lösung. Auf den GeoDict User-Meetings im Herbst 2017 in Kaiserslautern, Nagoya und Tokio haben wir BEST und BatteryDict einem interessierten Kundenkreis vorgestellt und in eigenen »Short Courses« die Praxis im Detail präsentiert.

INTEGRATIONSPROJEKT DIGITALISIERUNG DER TERAHERTZ-TECHNOLOGIE

Im Rahmen des Integrationsprojektes mit dem Zentrum für Materialcharakterisierung und -prüfung (MC) beschäftigen wir uns mit der experimentellen Qualifizierung von Mikrostrukturen. Es dient dem Ausbau der Geschäftsfelder und dem Aufbau einer tragfähigen Zusammenarbeit.

Numerische Modelle und ihre Weiterentwicklung werden anhand experimenteller Ergebnisse validiert, um die Vorhersagekraft zu überprüfen. Gemäß der gewünschten Materialeigenschaften, wie zum Beispiel eine bestimmte Durchlässigkeit bei einer notwendigen Steifigkeit, erstellen wir im Computer eine optimale Mikrostruktur.

Diese kann dann in exakt der gleichen Größe, also mit (sub-)Mikrometer-Auflösung 3D gedruckt und hinsichtlich ihrer Eigenschaften geprüft werden. Eine Verifikation von Mikrostruktursimulationen war bisher nur indirekt möglich. Eine explizite Validierung von additiv gefertigten Mikrostrukturen schafft Vertrauen beim Kunden und eröffnet neue Märkte.





Von vorne, links nach rechts: Ruturaj Deshpande, Dr. Olena Sivak, Pavel Gavrilenco, Junfan Zhang, Dr. Ehsan Afrasiabian, Dr. Konrad Steiner, Inga Shklyar, Dr.-Ing. Tobias Hofmann, Dr.-Ing. Sarah Staub, Stephan Wackerle, Alexander Leichner, Christine Roth, Dr. Ralf Kirsch, Dr. Julia Orlik, Dr. Ikenna Ebubechukwu Ireka, Dr. Hannes Grimm-Strele, Dominik Gilberg, Dr. Torben Prill, Michael Hauck, Dr. Stefan Rief, Dr. Stephan Kramer, Dr. David Neusius, Dr. Heiko Andrä, Dr. Sebastian Osterroth, Dr. Aivars Zemitis, Jonathan Köbler, Thomas Palmer, Dr. Jochen Zausch, Dr. Dariusz Niedziela