

## Der Wachstumsmarkt „Werkstoffsimulation“

Ali Aksi, Gieta Dewal, Marcus Jainta, Andreas Melcher, Britta Nestler, Oyunaa Nyamsuren-von Stackelberg, Michael Selzer, Frank Wendler

Institute of Computational Engineering am Institut für Angewandte Forschung der Hochschule Karlsruhe – Technik und Wirtschaft

### Inhaltsverzeichnis

1. Der Wachstumsmarkt „Werkstoffsimulation“
2. Pace3D: Eine Simulationssoftware
3. Simulation von Geostrukturen
  - a. Der Rissversiegelungsprozess in Gesteinsadern
  - b. Untersuchung von teilgeschmolzenen Kornsystemen (Partial Melts)
  - c. Porositäts- und Permeabilitätsanalyse
4. Beschreibung des Lotuseffektes mit Hilfe eines Phasenfeldmodells
5. Phasenfeld trifft Elastizitätstheorie: Simulation am Beispiel der Rissausbreitung
6. Ausblick
7. Literatur

### 1. Der Wachstumsmarkt „Werkstoffsimulation“

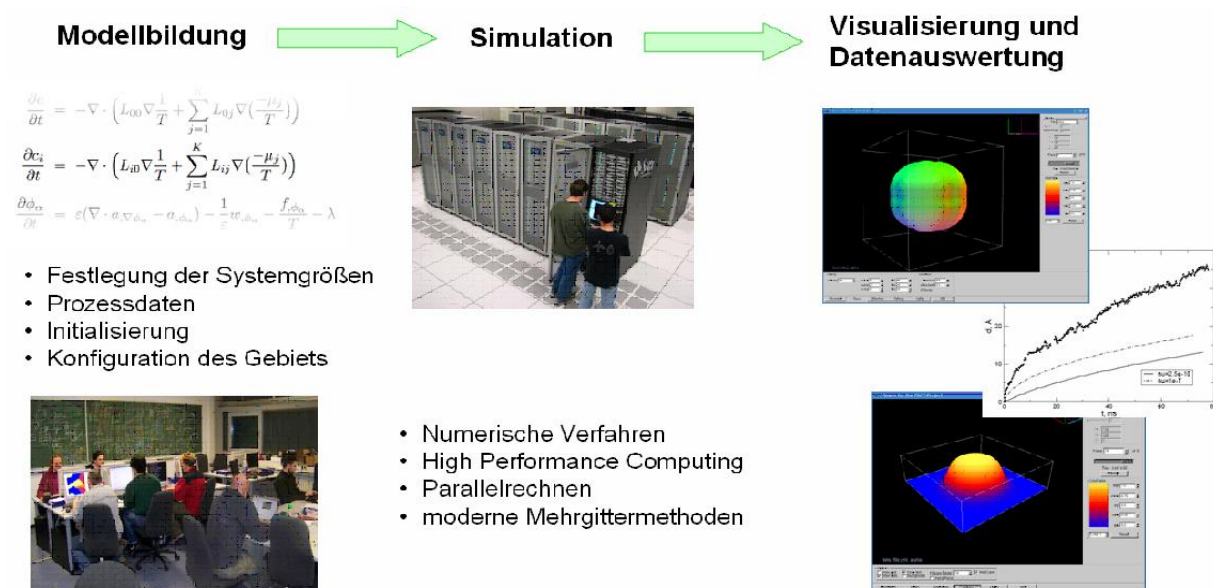
Die Computersimulation hat im vergangenen Jahrzehnt für die Werkstoff- und Bauteilentwicklung sowie für die Prozessoptimierung in der Wirtschaft und Wissenschaft eine Schlüsselrolle eingenommen. Die virtuelle Laborumgebung der numerischen Berechnung und der hochauflösenden Visualisierung stellt eine moderne, zeit-, aufwand- und ressourcensparende Technologie zur Prüfung von Werkstoffen und Bauteilen auf Qualitätsanforderungen wie Belastbarkeit, Langlebigkeit, Effizienz und Wirkungsgrad zur Verfügung. Neue Simulationsverfahren erlauben das Design von Werkstoffen nach Maß wie z.B. komponierte Legierungen, die Analyse von Einflussfaktoren und Prozessführungsbedingungen auf die Mikrostrukturausbildung sowie die systematische Untersuchung von Gefüge-Eigenschafts-Korrelationen. Oftmals können Qualitätsmerkmale von Werkstoffen und Prozessen durch eine geringe Änderung des Bearbeitungsvorgangs oder durch eine Variation der Zusammensetzung erreicht werden. Eine solche detaillierte Bestimmung der Reaktion des Werkstoffs auf eine externe Beanspruchung wie z.B. auf thermische, magnetfeldinduzierte und mechanische Belastung leisten neue Softwarepakete

zur Mikrostruktursimulation. Die charakteristischen Kenngrößen der Mikrostruktur sind ausschlaggebend für die Eigenschaften des Werkstoffs. Als ein Beispiel ist in vielen Herstellungsprozessen die Kornstruktur und die Korngrößenverteilung ein entscheidendes Kriterium für die Härte und Bruchfestigkeit des Materials. Simulationen ermöglichen erstmalig den in-situ Einblick nicht nur in das Endgefüge, sondern auch in den dreidimensionalen Strukturbildungsprozess. Durch eine gezielte Prozessführung lässt sich die Gefügeentstehung kontrolliert beeinflussen und Material mit spezifischen Eigenschaften computergestützt designen. Die Berechnungen ersetzen zu einem hohen Maß die experimentelle, metallographische und mechanische Gefügecharakterisierung, die oftmals eine Zerstörung der Bauteile erforderlich macht. Der Werkstoff, das Bauteil und der Prozessablauf der Zukunft lassen sich durch Verfahren der Werkstoffsimulation Ressourcen- und energieeffizient am Computer entwerfen. Aufwendige Versuche lassen sich einsparen und Schwachstellen können im Designstadium am Computer verbessert werden.

## **2. Pace3D: Eine Simulationssoftware**

Am Institut für Computational Engineering wurde das Softwarepaket Pace3D für große dreidimensionale Simulationen und Auswertung von Mikrostrukturen von Materialien entwickelt. Es handelt sich hierbei um ein umfangreiches Softwarepaket mit C/C++ Programmen mit Schnittstellen zur leichten Erweiterbarkeit der zu simulierenden Modelle und Auswerteverfahren. Von Phasenumwandlung, Diffusion mehrerer Komponenten bis hin zu Strömung, Elastizität und Magnetismus können Modelle individuell aufgestellt, die entsprechende Module der Software ausgewählt und Simulationen durchgeführt werden. In Abb. 1 sind die einzelnen Arbeitsschritte beginnend mit der Modellbildung über die Simulation bis hin zur Visualisierung und Datenauswertung zu sehen. Zur Durchführung von Werkstoffsimulationen ist es notwendig, geeignete Anfangsbelegungen und -parameter zu verwenden. Bei der Softwareentwicklung übernimmt das Preprocessing die Generierung von Gebietsbelegungen. Experimentelle Daten lassen sich konvertieren und Materialeigenschaften aus thermodynamischen Datenbanken als Eingabegrößen für die Simulationsrechnungen extrahieren. Im Simulationsschritt wird die Rechnerumgebung für die Simulationsausführung konfiguriert. Durch Parallelisierung ist die Ausführung der Simulation auf Workstations und Clustersystemen gleichsam möglich. Im Einsatz befinden sich sowohl speicher- als auch rechenzeitoptimierte Verfahren, um auch große Gebiete zu simulieren und so detaillierte Einblicke in Prozessabläufe zu erhalten. Das Pace3D Paket bietet eine Umgebung an, mit der die Durchführung von Simulationsserien zur Parameterstudie automatisierbar ist. Durch Einsatz der Postprocessing-Tools können die Ergebnisse aus den Simulationsrechnungen mit qualitativ hochwertiger Visualisierung dargestellt und mit einer

Vielzahl von bestehenden Algorithmen ausgewertet werden.



**Abb. 1:** Erforderliche Arbeitsabschnitte zur Werkstoff- und Prozesssimulation, die in dem Pace3D-Softwarepaket umgesetzt sind.

### 3. Simulation von Geostrukturen

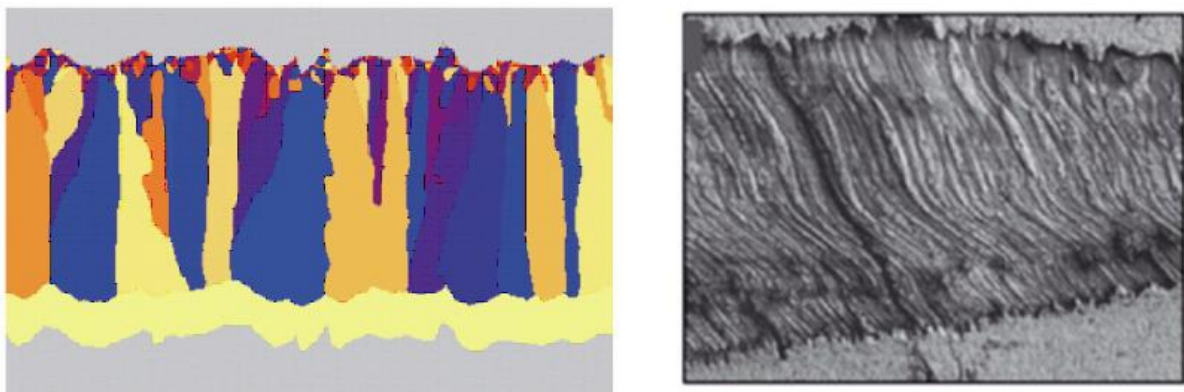
Unabhängig von seiner ursprünglichen Verwendung für die Beschreibung von Erstarrungsprozessen in der Metallurgie lässt sich das Phasenfeldmodell auch sehr effektiv für die Modellierung von Mikrostrukturen aus dem Bereich der Strukturellen Geologie einsetzen. Neben dem Gewinn für die reine Grundlagenforschung spielen dabei oft auch das Verständnis verwandter technischer Prozesse und der Einsatz von geologischen Proben als Indikatoren für abbauwürdige Vorkommen nutzbarer Minerale/Erze eine bedeutende Rolle.

Da geologische Prozesse oft auf einer sehr großen Zeitskala ablaufen, die einer experimentellen Untersuchung meist nicht zugänglich ist, kann die computergestützte numerische Simulation die Theoriebildung erheblich unterstützen bzw. motivieren. Dieser Beitrag zum besseren Verständnis geologischer Ereignisse der Erdgeschichte betrifft sowohl die Auswirkung zurückliegender Ereignisse auf die Mikrostruktur geologischer Materialien als auch die Vorhersage zukünftiger Prozesse. Das in Gesteinsproben gefundene Resultat kann nach experimenteller Analyse und Auswertung mit der Simulation eines Prozessmodell verglichen werden – je nach Rechenkapazität und Methode ein in wenigen Stunden bis mehreren Tagen dauernder Vorgang. Ein Vergleich der Ergebnisse erfolgt entweder über die konkrete Morphologie oder über die Analyse statistischer Größen wie mittlere Kornradien oder der Wachstumsdynamik. Zudem kann man das Prozessmodell auf einer quantitativen

Ebene mit Daten transparenter geologischer Analogsysteme überprüfen, wie etwa Norkampher-Ethanol oder Octachlorpropanol, die auch zur Interpretation geologischer Mikrostrukturen herangezogen wurden [1].

### a. Der Rissversiegelungsprozess in Gesteinsadern

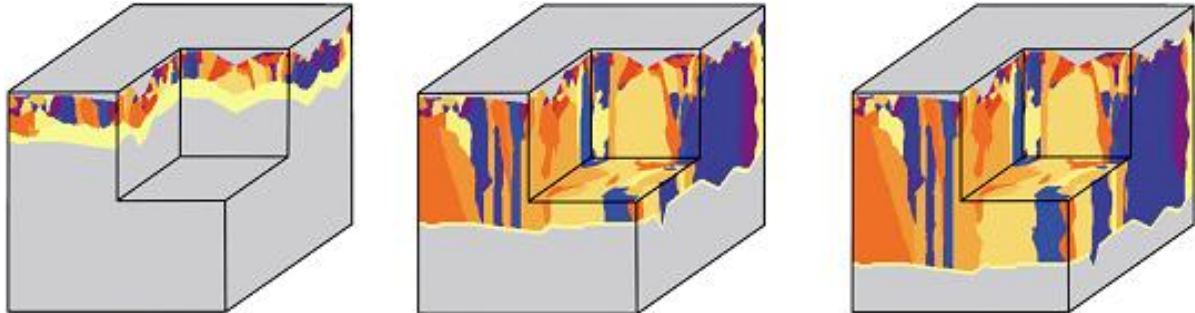
Eine häufige in Gesteinsproben, wie auch etwa bei Flusskieseln, gefundene Morphologie sind feine Adern, die eine andere mineralische Zusammensetzung als die umgebende Gesteinsmatrix aufweisen. Unter dem Mikroskop sind dabei meist faserartige oder blockartige Kornsysteme zu erkennen, siehe etwa das Beispiel in Abb. 2 (rechts). Ein wahrscheinlicher Rissversiegelungsprozess, der in der Theorie diskutiert wird, ist die zyklische Wiederholung von mikroskopischer Rissbildung und dem vollständigen Zuwachsen der Kavität. Risse mit einer Breite von 0.05 – 5 mm treten in natürlichem Gestein im Bereich lokalisierter Scherspannungen auf, die durch tektonische Aktivität zustande kommen. Sie zeichnen sich neben einem charakteristischen Rissprofil durch die Distanzparameter der vertikalen Öffnung (vgl. Abb. 2, links) und dem horizontalen Scherversatz aus.



**Abb. 2:** Gegenüberstellung einer zweidimensionalen Simulation mit zufälliger Risskante und reiner vertikaler Öffnung (links) und eine Gesteinsader mit Faserstruktur (rechts [die experimentelle Aufnahme wurde freundlicher Weise von C. Hilgers, RWTH Aachen zur Verfügung gestellt]).

Die Versiegelung wird durch Einströmen einer hydrothermalen Lösung, die mit Mineralien gesättigt ist, eingeleitet. Dadurch können kleine Kristallkörner heterogen an der Risskante keimen, die dann allmählich wachsen und den Riss ausfüllen. Um deren Wachstumsverhalten korrekt zu beschreiben, wird auf die bekannte Kristallsymmetrie und Morphologie unter den Wachstumsbedingungen des Minerals zurückgegriffen. Bildet die Wachstumsform keine Facetten aus, gibt es also keine bevorzugte Wachstumsrichtung. Es handelt sich um isotropes Wachstum. Bei deutlicher Ausbildung der Kristallflächen - mit etwa kubischer oder hexagonaler Symmetrie – ist das Wachstum anisotrop, das im Phasenfeldmodell durch eine Richtungsabhängigkeit der Oberflächenenergie oder des

kinetischen Koeffizienten nachgebildet wird. In solchen Situationen werden sich Körner, die bezüglich der Richtung der Rissöffnung eine günstigere Orientierung besitzen gegenüber Körnern mit einer ungünstigeren durchsetzen, weil sie schneller wachsen und als Folge andere dadurch verdrängen.



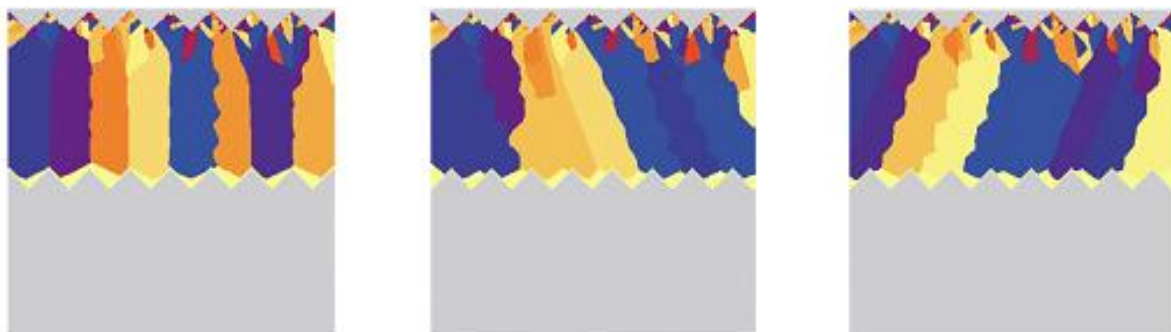
**Abb. 3:** Rissbildungs- und Versiegelungsprozess mit einer zufälligen Wandgeometrie und polykristalliner Kornstruktur als dreidimensionale Simulation.

Für das Modell wurde der Riss im diskreten Gitter als obere bzw. untere Randbedingung nachgebildet. Der Riss wird wiederholt an der Unterseite geöffnet und die untere Gesteinsmatrix durch eine frei wählbare vertikale und horizontale Verschiebung getrennt. Der frei werdende Zwischenraum wird mit der flüssigen Phase gefüllt, und das Wachstum setzt sich an der unteren Risskante fort. Dieser uniaxiale Wachstumsprozess, dessen Voraussetzung eine unveränderte Bruchkante aufgrund der elastischen Inhomogenität darstellt, ist der in der Literatur als am wahrscheinlichsten betrachtete Mechanismus der Rissversiegelung [2]. Er ist ein Beispiel für ein durch ein äußeres, geometrisches Template gesteuertes Wachstum, das auch für die Synthese von Nanokristallen interessant ist. Die in den Simulationsreihen variierten Parameter, die das Ergebnis des Rissversiegelungsprozesses bestimmen, werden hier kurz aufgeführt: die Spaltgröße (d. h. die vertikale Öffnung), die Scherung (also die Bewegung in horizontaler Richtung), der Zeitpunkt eines erneuten Spaltöffnungsereignisses (kurz vor oder nach der Rissversiegelung), die Geometrie der Risskante, Anzahl und Größe der Kristallkeime sowie die Art des Wachstums (isotrop oder anisotrop).

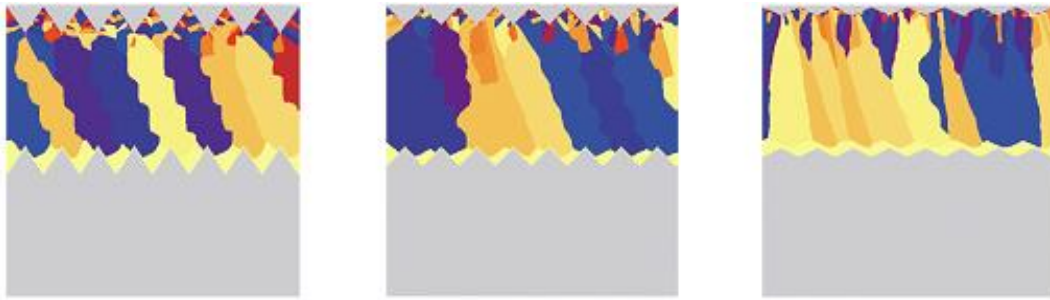
Zuerst wurde nachgewiesen, dass das Modell die in der Mikrostruktur der untersuchten Gesteinsadern vorkommenden Kornbereiche qualitativ realistisch nachbildet. Dazu wurden zunächst 2-D und später dann rechenzeit- und speicherintensivere 3-D Simulationen mit zufallsgenerierten Rissprofilen durchgeführt. Insbesondere zeigte sich mit steigender Oberflächenrauigkeit und steigendem Abbruchwinkel eine Zunahme der Fähigkeit, Korngrenzen zu führen (grain boundary tracking). In Abb. 3 ist das Ergebnis einer 3-D Simulation mit lokal unterschiedlichen Risseigenschaften dargestellt. Durch die

unterschiedliche Farbgebung der Körner werden die verschiedenen Körner bzw. Kristallorientierungen symbolisiert.

Zur systematischen Klärung des Geometrieinflusses wurden in den durchgeführten Simulationsserien periodische Zick-Zack-Risse unter Winkeln kleiner, größer oder gleich  $90^\circ$  vorgegeben. Um die Ergebnisse der Simulationen vergleichen zu können, wurde für jede Versuchsreihe eine identische Startkonfiguration mit Kristallkeimen erzeugt und dann die untersuchten Parameter wie Abbruchwinkel, Öffnungs- bzw. Scherungsversatz variiert. Die Simulationen mit dem Programmpaket *pace3D* ergaben, dass neben der oben erwähnten Anisotropie der Körner das vorgegebene Rissprofil in der Gesteinsmatrix und der Öffnungs- sowie Scherungsversatz von entscheidender Bedeutung für die resultierende Morphologie ist. Einige Ergebnisse der Versuchsreihe für einen Abbruchwinkel von  $90^\circ$  und den gleichmäßigen, periodischen Rissgeometrien sind in Abb. 4 gezeigt. Dabei treten abhängig von der Weite der Rissöffnung und der Orientierungsbeziehung benachbarter Körner entweder charakteristische Wellenmuster oder glatte Korngrenzen auf. Bei Simulationen ohne Scherung wachsen die Kristallkörner senkrecht nach unten, bei horizontaler Scherung der unteren Risskante ist die resultierende Kornstruktur abhängig von deren Stärke nach links oder rechts geneigt. Ein interessantes Ergebnis ist auch, dass bei vielen Öffnungszyklen vor allem Körner selektiert werden, deren Vorzugsorientierung in Richtung der Öffnungstrajektorie liegt. In weiteren Untersuchungen wurde der Riss sowohl in vertikale als auch in horizontale Richtung geöffnet und u. a. der Abbruchwinkel verändert. In Abb. 5 ist das Ergebnis für drei unterschiedliche Winkel gegenübergestellt, wobei das erhöhte Führungsvermögen steiler Bruchkanten klar zu erkennen ist.



**Abb. 4:** 2D Simulationen mit gleichmäßiger Wandgeometrie und unterschiedlicher Scherrate, Zeitpunkt jeweils kurz vor dem vollständigen Versiegeln des Risses.



**Abb. 5:** 2D Simulation mit gleichmäßiger Wandgeometrie und konstanter Scherrate, aber unterschiedlicher Bruchwinkel (von links nach rechts: kleiner, größer, gleich 90°)

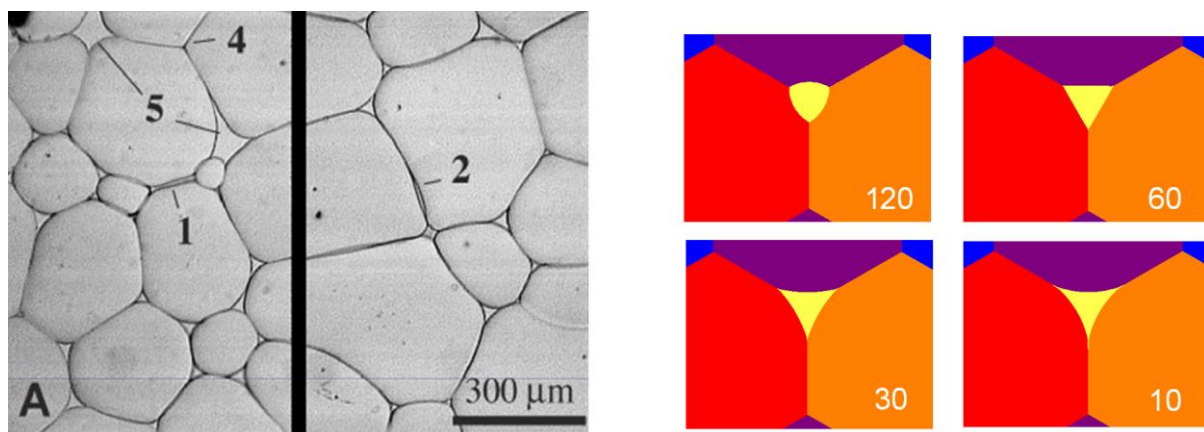
### **b. Untersuchung von teilgeschmolzenen Kornsystemen (Partial Melts)**

In tieferen Lagen der Erdkruste im Bereich der Kern-Mantel-Grenze koexistiert geschmolzenes Material mit festen, mineralischen Gesteinskörnern. Durch hohe Temperaturen oder durch die Dekompression des aus tieferen Schichten aufsteigenden Gesteinsmaterials kommt es zu einem teilweisen Aufschmelzen der festen Struktur. Ein auf den ersten Blick rein mikroskopischer Effekt, die Ausbildung und Verteilung von Schmelzeinschlüssen zwischen Mikrometer großen Gesteinskörnern, bestimmt Prozesse auf der größten geologischen Längenskala. Die Fließeigenschaften (Rheologie) ganzer Kontinentalplatten sowie die Bildung von sogenannten Plumes als Aufstiegszonen der Lava und damit verbunden das Auftreten von Vulkanismus. Beide Phänomene hängen unmittelbar mit der Permeabilität und der Verteilung von Schmelze in teilgeschmolzenen Kornstrukturen zusammen, da z.B. in großer Tiefe bei entsprechend hohen Drücken keine ausreichend großen Risse oder Klüfte für den Transport von Schmelze bestehen können. Die Untersuchung von Teilschmelzen ist auch wegen der vielen Parallelen zu einem interessanten technischen Verfahren in der Metall-Urformung von großem Interesse. Beim Thixoforming (engl.: semi-solid metal processing) wird ein teilweise geschmolzenes Legierungsgranulat durch Scherspannungen, wie sie z.B. in einem Extruder entstehen, plastisch verformbar und kann somit einfach in Formen gepresst werden. Eine vergleichbare Problemstellung stellt die Kornreifung und das (unerwünschte) komplette Aufschmelzen eines flüssig-fest-Gemenges dar, das auch beim Flüssigphasen-Sintern auftreten kann.

Für die Simulation wurde wie im Fall der Rissbildung jedes einzelne Korn durch einen eigenen Phasenfeldparameter ( $\phi_\alpha(x,t)$ ,  $\alpha = 1, \dots, N$ ) und zusätzlich die flüssige Phase durch  $\phi_L(x,t)$  beschrieben. Da für den geologischen Kontext ein exaktes thermodynamisches Gleichgewicht zwischen dem festen Mineral und seiner Schmelze angenommen werden kann, muss das gesamte Schmelzvolumen über die Zeit hin konstant bleiben. Daher wurde

vorerst auf eine Abhängigkeit von Temperatur und Zusammensetzung, d.h. auf eine Modellierung des Phasendiagramms verzichtet. Im Modell wird dies durch ein Verschwinden der treibenden Kräfte realisiert, weshalb die Evolution ausschließlich in Richtung einer Verringerung der freien Oberflächenenergie erfolgt. Für das verwendete Modell, das auf nichterhaltenen Ordnungsparametern (Allen-Cahn Typ) beruht, musste daher eine volumenerhaltende Erweiterung entwickelt, analysiert und implementiert werden [3,4], die auch im Rahmen anderer Materialsimulationen (Blasen, Schäume, Emulsionen) zur Anwendung gekommen ist. Physikalisch bedeutet die Volumenerhaltung, dass die lokal durch Erstarrung freigesetzte Latente Wärme an anderer Stelle zu einem Schmelzen derselben Materialmenge führt.

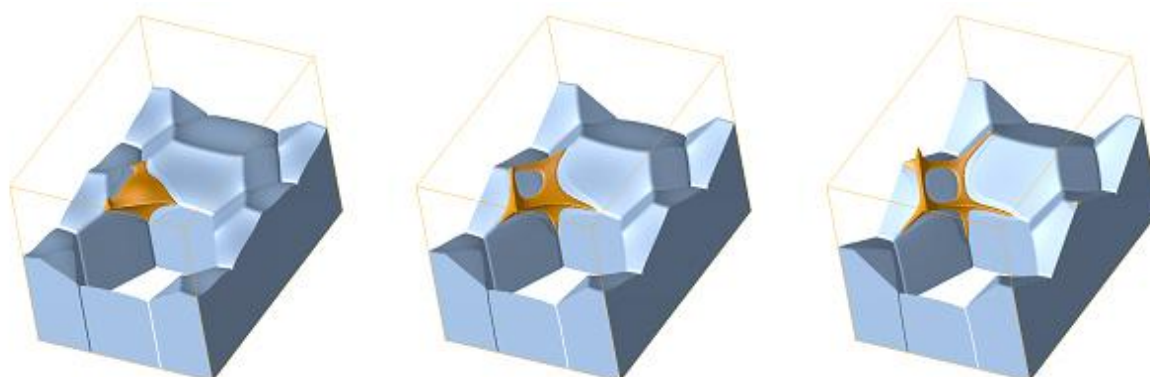
Von grundlegendem Interesse sind die Bedingungen, die im Kornsystem zu einer Ausbildung eines zusammenhängenden Porennetzwerkes führen, das in der Lage ist, Schmelze über größere Distanzen zu transportieren. In diesem Zusammenhang spielen auch strukturelle Abweichungen von der idealen Gleichgewichtsmorphologie eine wichtige Rolle, also Strukturen mit minimaler Oberflächenenergie. Abb. 6 (links) zeigt einen Ausschnitt aus einem experimentell studierten Analogsystem, einem Norkampher-Alkohol Polykristall, der größere Flüssigeinschlüsse und teilbenetzte Korngrenzen aufweist. In den betrachteten mineralischen Korngefügen spielt der sogenannte Öffnungs- oder Dihedralwinkel  $\theta$  eine besondere Rolle, also der Winkel, den die flüssig-fest Grenzfläche in der Nähe des Korn-Korn-Fluid-Tripelpunktes bildet.



**Abb. 6:** Links: Ausschnitt aus dem Korngefüge des Analogsystems Norkampher-Alkohol mit Nichtgleichgewichtsmerkmalen: (teil-) benetzte Korngrenzen (1 und 2), unbenetzte Tripelpunkte (4) und größere Fluid-Einschlüsse (5) [Bild freundlicherweise von P. Bons und J. Becker zur Verfügung gestellt]. Rechts: In den Phasenfeldsimulationen stellen sich durch Wahl der Oberflächenspannungen die korrekten Dihedralwinkel ( $10^\circ - 120^\circ$ ) in einem Schmelzeinschluss (gelb) ein.



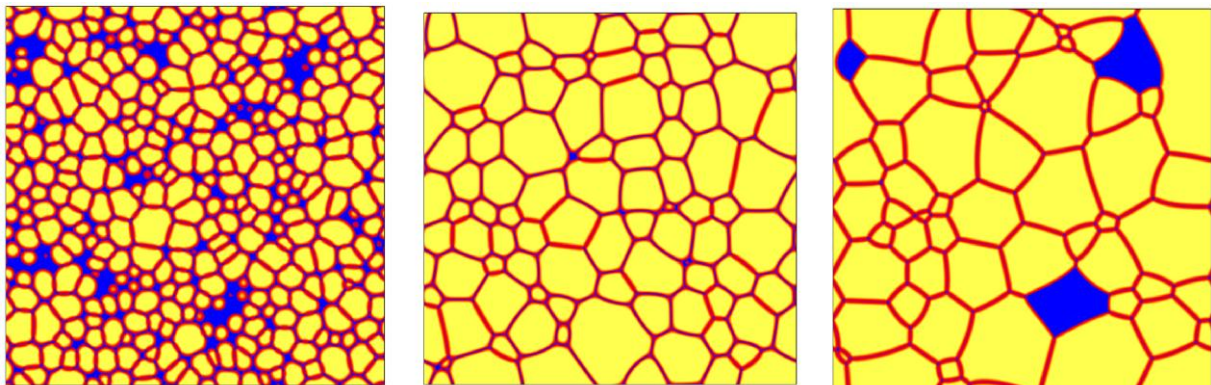
Nach dem Young'schen Gesetz hängt dieser von dem Quotient der Oberflächenspannungen  $\gamma_{SS}$  und  $\gamma_{SL}$  der fest-fest- und fest-flüssig-Grenzfläche ab in der Form  $2 \cos(\theta/2) = \gamma_{SS}/\gamma_{SL}$ . Durch Variation des Verhältnisses  $\gamma_{SS}/\gamma_{SL}$  wurde in einer Reihe von Simulationen Dihedralwinkel von  $10^\circ$  bis  $120^\circ$  eingestellt und an einem einzelnen Schmelzeinschluss die sich einstellenden Winkel gemessen. Die Abweichung von den theoretischen Werten betrug dabei weniger als  $1^\circ$ , siehe einige Ergebnisse in Abb. 6 (rechts). Der Übergang zu einer vollständigen Benetzung der Korngrenzen bei verschwindendem Dihedralwinkel wurde mit einer Oberflächenspannung  $\gamma_{SL} = 0.49 < \gamma_{SS}$  in 2D- und 3D-Simulationen überprüft. Dabei kriecht die Schmelze von dem ursprünglichen Schmelzeinschluss mit konstanter Rate entlang der Korngrenzen, bis in etwa eine Gleichverteilung erreicht wird. Abb. 7 zeigt einen Ausschnitt aus einem Benetzungsprozess in einer 3D Kornstruktur bei einem Winkel  $\theta = 10^\circ$ , bei dem für die Darstellung die obere Hälfte der Körner und ein unteres Korn ausgeblendet wurden.



**Abb. 7:** Drei Zeitschritte während der Benetzung einer 3D Kornstruktur, ausgehend von einem isolierten Schmelzeinschluss (orange) mit  $\theta = 10^\circ$ .

Weiterhin wurden mikroskopische Filmaufnahmen des quasi 2D Kornwachstums im System Norkampher-Alkohol ( $\theta = 10^\circ$ ) mit Simulationen verglichen. Mit Bildverarbeitungstechniken wurden digitale Bilder dazu in Simulationsdaten konvertiert und als Startbedingung verwendet, wobei die Geometrie geeignet modifiziert wurde, um periodische Randbedingungen anwenden zu können. Dabei stimmte die Formentwicklung der im Inneren des Simulationsgebietes liegenden Körner sehr gut mit den experimentellen Filmaufnahmen überein, wenn die kinetischen Modellkoeffizienten der fest-fest und der fest-flüssig-Grenze korrekt gewählt wurden. Dies ergibt u. a. eine praktikable Methode, Korngrenzmobilitäten, für deren Größe entweder gar keine oder nur ungenaue experimentelle Daten vorliegen, in Simulationen zu eichen (falls zeitlich aufgelöste experimentelle 2D oder 3D Daten vorliegen). Auch in Teilschmelzen bewirkt die Reduktion der Oberflächenenergie im Laufe der Zeit eine

Vergrößerung der Kornstruktur, d.h. ein Schrumpfen kleinerer Körner auf Kosten der überlebenden größeren. Dieser Prozess tritt als 'normales Kornwachstum' bei der Temperaturbehandlung vieler metallischer Legierungen auf und ist i. a. unerwünscht, da er die Isotropie in den mechanischen Eigenschaften des Werkstücks verringert. Die Kornreifung in teilweise geschmolzenen Systemen wurde in Simulationsserien für größere Polykristalle durchgeführt. Als Startkonfiguration wurden dabei jeweils zufällige, mithilfe des Voronoi-Algorithmus erzeugte Kornsysteme verwendet und an den Tripel- (2D) bzw. Quadrupelpunkten (3D) sphärische Schmelzeinschlüsse gesetzt. Die Kornreifung zeigt eine besonders starke Abhängigkeit von drei Parametern: dem Dihedralwinkel  $\theta$ , dem Volumenanteil der Schmelze und deren lokaler Verteilung. In Abb. 8 ist das Endresultat zweier Simulationen mit gleichem Schmelzanteil, aber unterschiedlichem Dihedralwinkel gegeben. Grundsätzlich sinkt die Geschwindigkeit des Kornwachstums in teilgeschmolzenen Systemen mit fallendem Dihedralwinkel  $\theta$  und steigendem Volumenanteil der Schmelze, falls die Anfangsverteilung der Schmelze entlang der Korngrenzen bzw. Tripellinien möglichst homogen gesetzt wird.



**Abb. 8:** Einfluss des Dihedralwinkels bei der Kornreifung: Zwei Korngefüge (Mitte:  $\theta = 30^\circ$ , rechts:  $\theta = 90^\circ$ ) zur selben Simulationszeit ausgehend von einer synthetischen Kornstruktur (links). Die Schmelze ist blau dargestellt. Das Kornwachstum für den Fall mit  $\theta = 10^\circ$  ist erkennbar langsamer, außerdem bilden sich teilbenetzte Korngrenzen; bei  $\theta = 90^\circ$  entstehen größere lokalisierte Schmelzbereiche.

Wenn Körner während der Reifung über flüssige Bereiche zusammentreffen, treten in Übereinstimmung mit Experimenten teilweise benetzte Korngrenzen auf, was sich im Laufe der Zeit wie in Abb. 8 (rechts) fast auf alle vorhandenen Korngrenzen ausbreitet.

### c. Porositäts- und Permeabilitätsanalyse

Die Simulationssoftware Pace3D basiert auf einem Multiphasenfeldmodell und beschäftigt sich mit der Simulation von Materialeigenschaften (z.B. Kristallbildung) auf der Basis der diffusen Grenzflächenmodellierung. Um ein realistisches Verhalten des Kristallwachstums

zum Beispiel in Schmelzen zu erreichen, ist es nötig, dynamische Größen wie Temperaturschwankungen, Konzentrationsänderungen und Strömungsverläufe zu beachten. Der aktuelle Forschungsstand umfasst einen Löser, der die Simulation der Phasenfeldvariablen zur Beschreibung der Phasenzustände, der Mikrostrukturen und der Phasenumwandlungen übernimmt. Gekoppelt an diese Simulationssoftware sind einzelne Module, die weitere dynamische, physikalische Feldgrößen berechnen können. Als Strömungslöser werden eine Implementierung der Navier-Stokes Gleichungen und eine Implementierung eines allgemeinen Lattice Boltzmann Modells (LBM) verwendet.

Das vorhandene LBM Modell ist ein Modell für die Strömungssimulation kompressibler und inkompressibler Fluide, mit dem zurzeit die Porositäts- und Permeabilitätsanalyse vorgenommen wird.

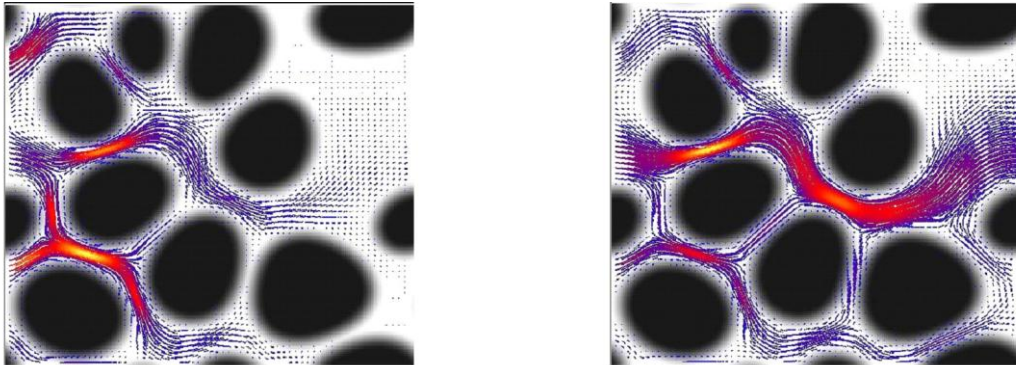
Allgemein ist die Porosität ein Maß für die Dichte eines Mediums mit Hohlräumen. Sie ist die relative Dichte in Vergleich zum massiven Stoff. Die Maße Porosität und Permeabilität spielen in vielen Bereichen von der Automobilindustrie bei der Entwicklung von Partikelfiltern bis hin zu Geologie, Bodenkunde oder Medizin eine große Rolle. Die Permeabilität wird in der Geotechnik zur Quantifizierung der Durchlässigkeit von Böden und Felsmaterial für Flüssigkeiten oder Gase (z. B. Grundwasser, Erdöl oder Erdgas) benutzt. In der Erdöl- bzw. Erdgasindustrie spielt die Nutzporosität eine große Rolle. Nur in untereinander in Verbindung stehenden Poren können Fluide wie Wasser oder Erdöl fließen. Die Größen: Porosität und Permeabilität von Gesteinstrukturen sind ein wichtiger Indikator z.B. für die Wirtschaftlichkeit einer Ölbohrung.

Die übliche Maßeinheit für die Bestimmung der Permeabilität ist Darcy. Dies ist aus dem Darcy-Gesetz abgeleitet, das ein physikalisches Fließgesetz in porösen Medien beschreibt. Für die Quantifizierung der Durchlässigkeit wird der sogenannte Durchlässigkeitsbeiwert benutzt. Dies ist ein Kennwert für das poröse Medium und das durchströmende Fluid, der auch als hydraulische Leitfähigkeit bezeichnet wird.

Das Darcy-Gesetz besagt, dass eine bestimmte Menge eines Fluids, die eine Fläche eines porösen Mediums durchströmt, direkt proportional zum hydraulischen Gradienten ist. Dabei ist der Proportionalitätsfaktor der Durchlässigkeitsbeiwert. Dies ist eine der wichtigsten Größen, die für die Berechnung und Quantifizierung der Permeabilität nötig ist.

Abb. 9 zeigt das Ergebnis einer 2D Simulation eines Strömungsprozesses in einem porösen Medium auf der Basis des kompressiblen Lattice Boltzmann Modells. Für diese Simulation

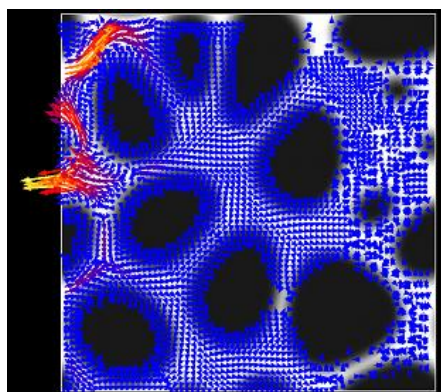
wurde zuerst mit dem Phasenfeld-Modell die Entstehung eines porösen Gebiets simuliert und daran anschließend die Strömungssimulation durchgeführt.



**Abb. 9:** Zeitliche Entwicklung der Strömung durch ein poröses Medium mit einem kompressiblen Lattice Boltzmann Modell. Die Strömungsrichtung ist von links nach rechts. Dargestellt sind in schwarz die massiven Partikel und die farbigen Pfeile geben die Richtung und Stärke der Geschwindigkeit der Flüssigkeit im Medium an.

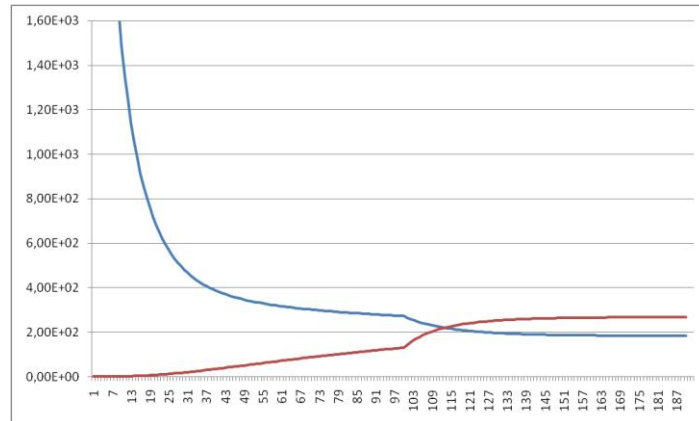
Anhand des Strömungsverhaltens bzw. der Strömungsgeschwindigkeit des Fluids kann nun mit Hilfe der Darcy-Gleichung, die Permeabilität des Mediums bezüglich des bestimmten Fluids berechnet werden. Mit der Verwendung des kompressiblen Lattice Boltzmann Modells zur Strömungssimulation kann die Permeabilität des Materials z.B. auch bezüglich eines Gases berechnet werden.

Abb. 10 stellt das Ergebnis einer 2D Simulation eines Strömungsprozesses in einem porösen Medium auf der Basis eines inkompressiblen Lattice Boltzmann Modells dar. In der Simulation mit einem inkompressiblen Lattice Boltzmann Modell, mit einer definierten Kapazität und Porosität des Mediums kann beobachtet werden, wie das Fluid wieder aus dem Medium herausströmt.

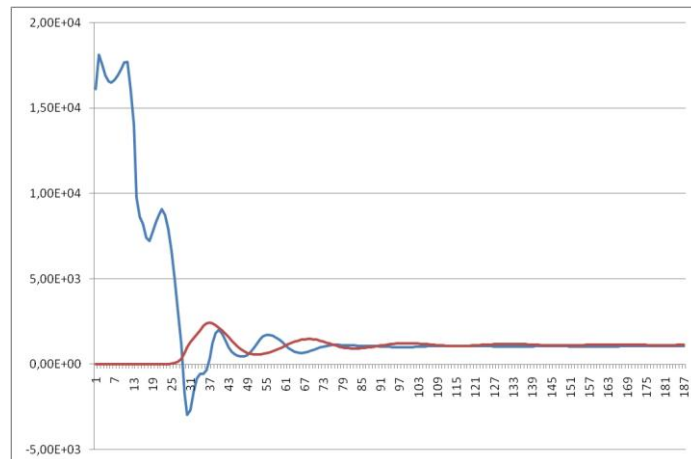


**Abb. 10:** Simulationsergebnis der Strömung durch ein poröses Medium mit einem inkompressiblen Lattice Boltzmann Modell. Die Strömungsrichtung ist von links nach rechts. Die Farbdarstellung entspricht der in Abb. 9.

In Abb. 11 und 12 sind die Profile der Fließgeschwindigkeit des Fluides dargestellt.



**Abb. 11.** Fließgeschwindigkeit eines kompressiblen Fluids am Ein- und Ausströmrund des Mediums.



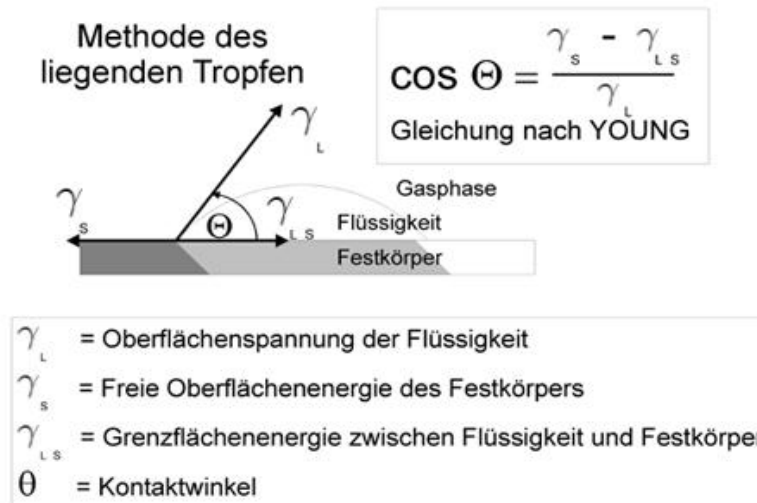
**Abb. 12.** Fließgeschwindigkeit eines inkompressiblen Fluids am Ein- und Ausströmrund des Mediums.

#### 4. Beschreibung des Lotuseffektes mit Hilfe eines Phasenfeldmodells

Beim Lotuseffekt handelt es sich um ein Phänomen, das bei vielen Pflanzen auftritt, bei Lotusblüten jedoch am stärksten zu beobachten ist. Die Oberfläche dieser Pflanzen ist von einer Wachsschicht umgeben, die selbst Wasser abweisend ist. Um diesen Wasser und Schmutz abweisenden Effekt zu verstärken, sind die Oberflächen der Pflanzen in einer geeigneten Art und Weise strukturiert.

Die industriellen Anwendungen für die Simulation dieses Effektes sind vielfältig. Angefangen von der Optimierung schon vorhandener, künstlich hergestellter Lotusoberflächen im Fassaden- oder Sanitärbereich über die Herstellung reibungsarmer und damit energiesparender, mechanischer Lager bis hin zu medizinischen Anwendungen können mehrere Industriebereiche von dem Lotuseffekt profitieren.

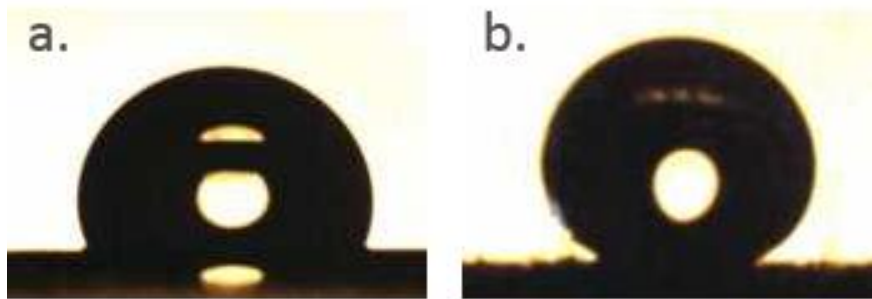
Tropfen, die sich im freien Raum ohne zusätzliche Kräfte befinden, bilden eine Kugelform aus. Grund hierfür ist die Oberflächenspannung zwischen der Tropfenphase und dem umgebenden Material. Bei der Betrachtung des Benetzungsverhaltens von Tropfen an einer festen, nicht beweglichen Oberfläche treten drei physikalische Phasen auf: Eine Festphase, die unbeweglich bleibt, sowie mindestens zwei fluide Phasen, die auf diesem festen Substrat anhaften. Dabei stellt sich abhängig von den beteiligten fluiden Phasen ein charakteristischer Winkel ein (siehe Abb. 13).



**Abb. 13:** Bestimmung des Kontaktwinkels eines Flüssigkeitstropfens auf einer Substratoberfläche (Festkörper).

Um solche, durch Oberflächenenergieminimierung getriebene Prozesse zu simulieren, gibt es unterschiedliche Ansätze. In den vergangenen Jahren wird hierfür häufig eine Phasenfeldmodellierung herangezogen. Dabei werden einzelne physikalische Phasen durch Ordnungsparameter dargestellt, die in einem diffusen Grenzflächenbereich stetig ineinander übergehen [4]. Mit Hilfe des entwickelten Modells ist es möglich, die Oberflächeneigenschaften der simulierten Phasen so einzustellen, dass beliebige Winkel simuliert werden können.

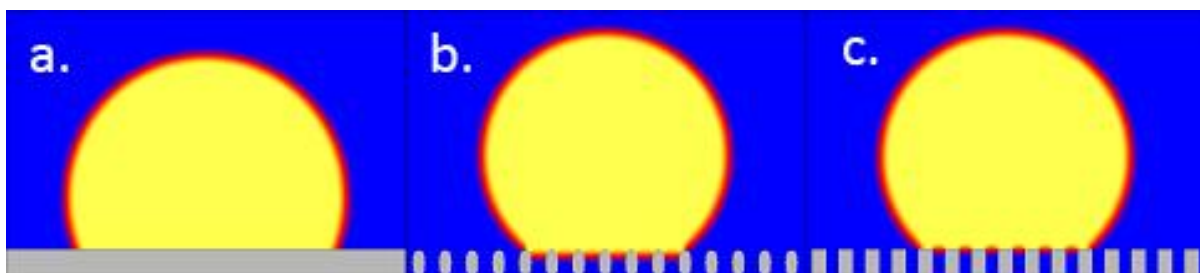
Einige Forschergruppen [11] sind zur Zeit mit der Untersuchung geeigneter Materialien und Oberflächenstrukturen beschäftigt, um den Lotuseffekt experimentell zu untersuchen. Abb. 14 zeigt zwei Tropfen, bei denen in beiden Fällen dasselbe Basismaterial verwendet wurde. In Abb. 14 a ist die Oberfläche unbehandelt, und es stellt sich ein Kontaktwinkel von  $110^\circ$  ein, wohingegen die Oberfläche in Abb. 14. b aufgeraut ist und ein Kontaktwinkel von  $150^\circ$  als Ergebnis gemessen wird.



**Abb. 14:** Benetzungsverhalten abhängig von der Oberflächenstruktur (experimentell [11]).

Um zu überprüfen, ob diese experimentellen Ergebnisse mit unserem Modell nachvollzogen werden können, wurden zwei Phasen im Gebiet gefüllt. Die Oberflächenspannungen wurden so gewählt, dass sich ein Kontaktwinkel von  $110^\circ$  am Substrat einstellt. Anschließend wurden bei gleicher Tropfengröße unterschiedlich strukturierte Substrate am unteren Rand gesetzt.

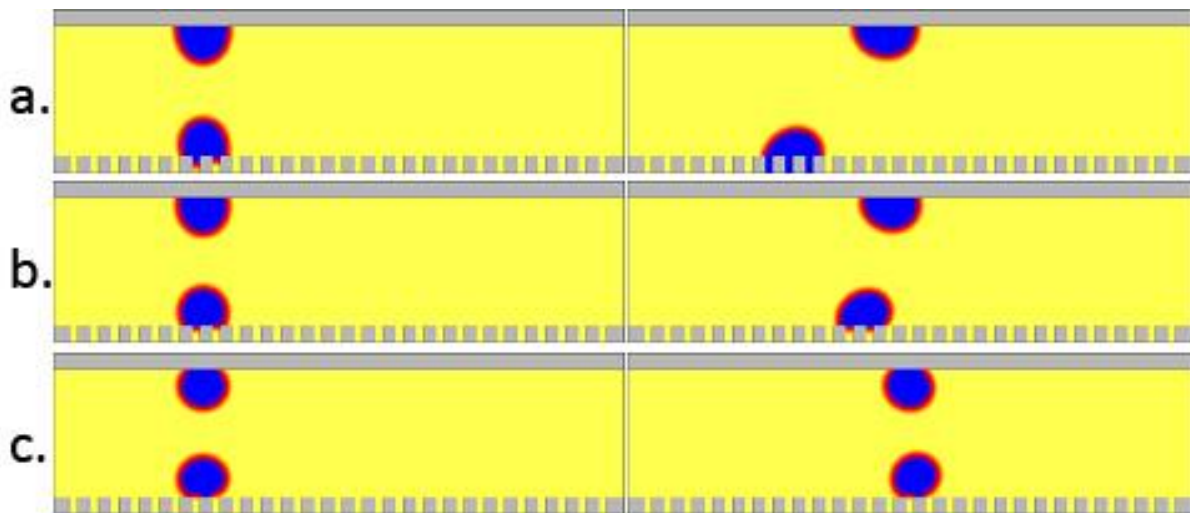
Abb. 15 zeigt Auszüge einer Simulationsserie. Dabei zeigt sich, dass Simulationen mit strukturiertem Substrat (Abb. 15. b und 15. c) einen deutlich größeren Kontaktwinkel haben als ursprünglich eingestellt wurde (15. a). Die Messung des Kontaktwinkel ergab Werte von etwa  $120^\circ$  bis ca.  $145^\circ$ , abhängig von der gewählten Strukturbreite und dem Verhältnis zwischen Stempelbreite und Stempelabstand. In Zukunft soll diese Simulationsreihe fortgesetzt werden, um den Einfluss der Strukturform und komplexer, dreidimensionaler Stempelformen auf den Kontaktwinkel erfassen zu können.



**Abb. 15.** Simulationen mit der Ausbildung unterschiedlicher Kontaktwinkel der Tropfenphase abhängig von der Oberflächenstruktur des Substrat.

Nicht nur die statische Messung des Kontaktwinkels ist von Interesse, sondern auch die Adhäsion des Tropfens an der Substratoberfläche unter dem Einfluss äußerer Kräfte wie Gravitation oder Strömung. Dazu wurden für die Simulationen in Abb. 16 verschiedene Substrate gewählt und eine konstante Strömung von links nach rechts eingestellt. Die beiden blauen Tropfenphasen werden von der Strömung mitgetragen, während sie am Substrat

anhaften. Es ist zu erkennen, dass sich die Adhäsion bei unterschiedlichen Kontaktwinkeln im Vergleich von strukturierter zu glatter Oberfläche drastisch ändert. Dieser Effekt soll in weiteren Simulationsreihen eingehend untersucht werden.



**Abb. 16:** Adhäsionsverhalten für unterschiedliche Kontaktwinkel (a:  $90^\circ$ , b:  $112^\circ$  und c:  $134^\circ$ ) zwischen Flüssigkeitstropfen (blau) und Substrat (grau). Es sind jeweils der Beginn und das Ende der Simulation dargestellt. Von links nach rechts wurde eine Strömung aufgeprägt.

## 5. Phasenfeld trifft Elastizitätstheorie: Simulation am Beispiel der Rissausbreitung

Die Untersuchung von Rissausbreitung ist eine sehr wichtige Aufgabenstellung in vielen Anwendungsgebieten der Physik und den Materialwissenschaften. Grundlegend dafür ist das Verständnis der dynamischen Vorgänge, die während der Rissausbreitung in einem mechanischen Körper auftreten.

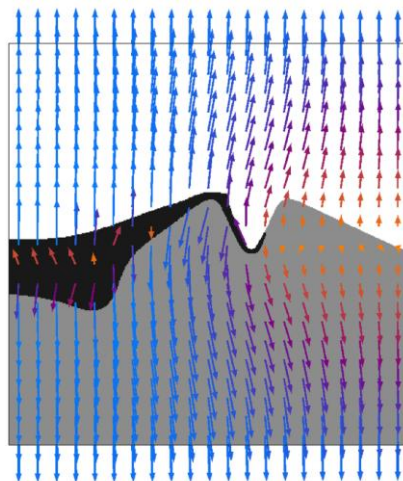
Beginnend mit der Arbeit von Griffith [5] in den zwanziger Jahren des vorherigen Jahrhunderts ist die fundamentale Basis der Rissausbreitung der Konkurrenzkampf zwischen der elastischen Energie und einem gleichzeitigen Ansteigen der Oberflächenenergie in dem Körper, wenn sich ein Riss ausbreitet. Obwohl in den letzten achtzig Jahren bedeutende Fortschritte in der Erklärung der grundlegenden Phänomene gemacht wurden [6], sind die Mechanismen, die die Dynamik der Rissbildung beschreiben, bis heute noch nicht ganz verstanden. Typische Modellvorstellungen basieren in der Erklärung der auftretenden Phänomene auf einer atomistischen Basis, wobei die Rissausbreitung durch ein sukzessives Aufreißen der Atombindungen erklärt wird. Ein solches Modell und seine theoretischen Vorhersagen hängen dann signifikant von dem zugrundeliegenden empirischen Modell der Atomeigenschaften ab. Ein gegensätzlicher Ansatz versucht die Rissbildung mittels der linearen Elastizitätstheorie oder Plastizitätstheorie zu erklären, was auch durch experimentelle Untersuchungen gerechtfertigt wird. Eine vollständige Modellierung der Rissausbreitung sollte neben der Ausbreitungsgeschwindigkeit auch die Rissform und



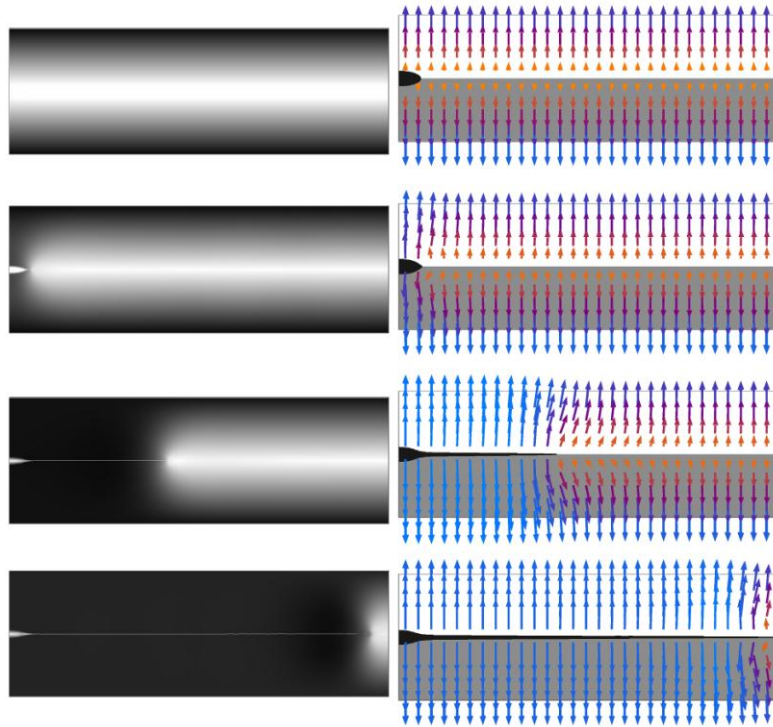
Längenskala selbstkonsistent beschreiben.

In den letzten Jahren hat sich die Phasenfeld-Modellierung als ein vielversprechender Ansatz zur Beschreibung der Dynamik der Rissausbildung entwickelt. Phasenfeldmodelle gehen über die mikroskopische Grenze der diskreten Modelle hinaus und beinhalten eine Vielzahl der zu erwartenden Eigenschaften der Rissausbildung. Die bedeutendste Eigenschaft solcher Modelle ist aber die direkte Verbindung zwischen der Längenskala der sich ausbildenden Strukturen mit der Grenzflächenbreite des Phasenfeldmodells, die ein rein numerischer Parameter, ohne direkte Verbindung zu irgendwelchen physikalischen Eigenschaften ist. Deshalb besitzen diese Beschreibungen a priori keinen Grenzwert, wenn man die Grenzflächendicke der diffusen Grenzschicht gegen Null gehen lässt. Um diese Eigenschaft zu kompensieren, wird das Phasenfeld-Modell mit den Gleichungen aus der linearen Elastizitätstheorie gekoppelt. Bei diesem Ansatz entwickelt sich in endlicher Zeit eine Singularität, die die Beschreibung des Risswachstums im stationären Zustand nicht zulässt, es sei denn der Radius der Rissspitze ist in der Größenordnung der Grenzflächendicke der Phasenfeld-Formulierung.

Detaillierte Modellentwicklungen und Simulationsanwendungen mit der Phasenfeld-Modellierung wurde in den letzten Jahren von Spatschek et.al. [7-10] veröffentlicht. In den folgenden Abbildungen 17 und 18 werden Simulationsrechnungen zur Rissbildung beruhend auf der Phasenfeld- Modellierung vorgestellt.



**Abb. 17:** Simulation eines Rissbildungsprozesses: Die Darstellung zeigt die Phasengrenzen überlagert mit dem Verschiebungsfeld aus der elastischen Zugspannung. Die Rissphase (schwarz) bildet sich entlang der Korngrenze zwischen weißem und grauem Korn aus.



**Abb. 18.** Zeitliche Entwicklung eines geraden Risses: Die Bilder links veranschaulichen das normierte Verschiebungsfeld der elastischen Spannung im Material. Die Zeitsequenz rechts zeigt eine überlagerte Darstellung der scharfen Phasengrenzen mit der vektoriellen Darstellung des Verschiebungsfeldes.

## 6. Ausblick: Die Zukunft der Technologie „Werkstoffsimulation“

Die Werkstoffsimulation besitzt für industrielle Anwendungen bereits heute ein weitreichendes Potenzial. Intensive Forschung und Weiterentwicklung sowie der rasante Fortschritt auf dem Gebiet des Hochleistungsrechnens erschließen ständig neue Anwendungsfelder, in denen Computersimulationen Einblick in die Prozesse und Material der Zukunft geben. In aktuellen Arbeiten werden die Simulationsmethoden auf verschiedene Materialien wie Keramiken, Polymere, Geomaterialien, biologische und biomimetische Systeme übertragen, um ein tieferes Verständnis über die Strukturbildungsmechanismen zu erlangen, um Eigenschaften vorherzusagen und diese zielgerichtet zu optimieren. Je komplexer ein Bauteil, umso aufwendiger ist die Entwicklung eines Simulationsmodells, das die Realität möglichst genau widerspiegelt und umso umfangreicher sind die Simulationsrechnungen. Produkte, Herstellungs- und Fertigungsprozesse werden zukünftig am Computer entworfen und optimiert, bevor sie als Prototyp eingerichtet werden. Besondere Herausforderungen an die Entwicklung in diesem Jahrzehnt stellen die Mehrskalensimulationen und die Modellierung gesamter Prozessketten der Fertigung dar. Bei der skalenübergreifenden Behandlung ist das Ziel, Phänomene auf verschiedenen

Längen- und Zeitskalen zu erfassen. Neben dem atomistischen Detail und der Mikrostrukturausbildung sollen makroskopische Bedingungen der Prozessführung in eine Werkstoffmodellierung einfließen. Auf dem Weg vom Halbzeug zum Werkzeug wirken aufeinander folgende Bearbeitungsschritte auf das Bauteil ein. Um Materialinformationen entlang der Prozesskette zu gewinnen, ist eine integrale Werkstoffsimulation angestrebt, bei der Simulationsdaten prozessschrittübergreifend und ganzheitlich berücksichtigt werden.

## 7. Literatur

- [1] N. P. Walte, P. D. Bons, C. W. Paschier, "Deformation of melt bearing systems – insight from in situ grain-scale analogue experiments", *J. Struct. Geol.* 27 (2005) 1666-1679
- [2] C. Hilgers, D. Koehn, P. D. Bons, J.L. Urai, "Development of crystal morphology during uniaxial growth in a progressively widening vein: II. Numerical simulations of the evolution of antitaxial fibrous veins", *J. Struct. Geol.* 23 (2001) 873-885
- [3] B. Nestler, F. Wendler, M. Selzer, B. Stinner, H. Garcke, "Phase-field model for multiphase systems with preserved volume fractions", *Phys. Rev. E.* 78 (2008) 011604-1 - 7
- [4] H. Garcke, B. Nestler, B. Stinner, F. Wendler, "Allen-Cahn systems with volume constraints", *Math. Mod. Meth. Appl. Sci.* 18 (2008) 1347-1381
- [5] A. A. Griffith, "The phenomena of Rupture and Flow in Solids", *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A* 21, 163 (1920)
- [6] L. B. Freund, "Dynamic Fracture Mechanics", Cambridge University Press, Cambridge, England, 1998
- [7] R. Spatschek, M. Hartmann, E. Brener, H. Müller-Krumbhaar and K. Kassner, "Phase Field Modeling of Fast Crack Propagation", *Phys. Rev. Lett.* 96, 015502 (2007)
- [8] D. Pilipenko, R. Spatschek, E. A. Brener and H. Müller-Krumbhaar, "Crack Propagation as a Free Boundary Problem", *Phys. Rev. Lett.* 015503 (2007)
- [9] E. A. Brener, V. Marchenko and R. Spatschek, "Influence of strain on the kinetics of phase transitions in solids", *Phys. Rev. E.* 75, 041604 (2007)
- [10] R. Spatschek, C. Müller-Gugenberger, E. Brener and B. Nestler, "Phase-field modeling of fracture and stress induced phase transitions", *Phys. Rev. E.* 75, 066111 (2007).
- [11] Fraunhofer Institut Grenzflächen- und Bioverfahrenstechnik, Abhängigkeit des Kontaktwinkels von den Oberflächeneigenschaften,  
<http://www.igb.fraunhofer.de/www/gf/GrenzflMem/gf-physik/dt/GFphys-KontWinkel-Obfl.html>