

# GENAU BETRACHTET CLOSE VIEW

## Mikrostrukturmodellierung als Schlüssel zur Materialentwicklung

Die Entwicklung neuer Werkstoffe stützt sich immer häufiger auf rechnergestützte Materialcharakterisierung mittels Simulation. Grundlage hierfür ist die Mikrostruktur, die entweder über  $\mu$ CT-Scans importiert oder durch geeignete Softwaretools modelliert wird. Beide Wege bietet die Software GeoDict – Das Digitale Materiallabor.

Die mechanischen Eigenschaften von Faserverbundwerkstoffen werden maßgeblich über die Verstärkungsfasern beeinflusst. Die Kenngrößen der Mikrostruktur der Verstärkungsphase, wie beispielsweise Faservolumengehalt, Faserlänge oder -orientierung, sind neben der Wahl des Fasermaterials entscheidend für die späteren Materialeigenschaften. Mittels Materialsimulation auf Mikrostrukturebene lassen sich diese Einflüsse quantifizieren und Materialien digital am Rechner entwickeln und optimieren.

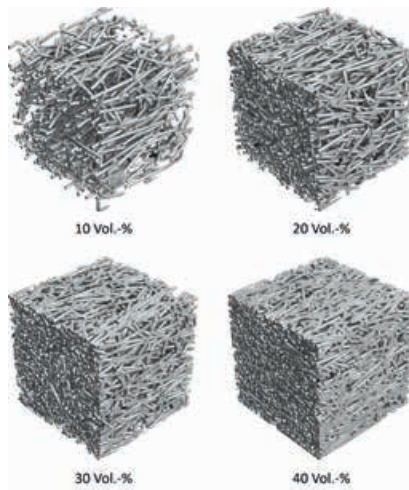
Das Simulationsmodell kann basierend auf statistisch verteilten geometrischen Kenngrößen modelliert oder über den Import und die Segmentierung eines  $\mu$ CT-Scans erstellt werden. Im Folgenden werden beide Methoden am Beispiel eines kurzglasfaserverstärkten Polyamid 6 veranschaulicht.

## Microstructure modelling is key to development of new materials

Simulation, making use of computer-based material characterization, is the leading-edge for the development of new materials. The underlying material microstructure must be modelled from parameters using software tools or be obtained from  $\mu$ CT-scans. Both tasks are efficiently performed with the GeoDict software – The Digital Material Laboratory.

The mechanical properties of fiber reinforced polymers are significantly influenced by the reinforcing fibers' nature and properties. The choice of fiber material and its microstructural parameters, e.g. fiber volume fraction, fiber length or fiber orientation, determine the effective material properties of the polymer.

Through material simulation, the microstructure of materials can be modelled from the statistically distributed geometrical parameters or via the import and segmentation of  $\mu$ CT-scans of existing materials. Then, the influence of these parameters can be quantified on the models at microstructure level with the goal of developing or optimizing new materials digitally. Below, both input methods for creating the models are presented in an example for a short fiber reinforced polyamide 6.



Modell: kurzfaserverstärkte Mikrostrukturen mit unterschiedlichen Faservolumengehalten

Model: short fiber reinforced microstructures with different fiber volume fractions



$\mu$ CT-Scan  
 $\mu$ CT-scan



segmentierte Mikrostruktur  
segmented microstructure



Faserorientierungsanalyse  
fiber orientation analysis

## Modellierung

Die vier Hauptkenngrößen zur Modellierung der Mikrostruktur eines kurzfaserverstärkten Materials sind Faserorientierungstensor, -längenverteilung, -durchmesserverteilung und -volumengehalt.

Der Faserorientierungstensor beschreibt die dreidimensionale Ausrichtung der Verstärkungsfasern in der Matrix. In vorliegendem Beispiel sind 70 Prozent der Fasern in eine Vorzugsrichtung orientiert. Die Faserlängenverteilung ist von der Bauteilgeometrie und den Prozessparametern abhängig und wird in diesem Beispiel mit einer Gaußverteilung um einen Mittelwert von 250  $\mu\text{m}$  modelliert.

Der Faserdurchmesser wird konstant gehalten und beträgt 12  $\mu\text{m}$ . Da in der Realität keine Überlappung von Einzelfasern auftritt und diese Überlappung auch im Mikrostrukturmodell vermieden werden soll, sind zur Realisierung von hohen Faservolumengehalten effiziente Rechenalgorithmen notwendig. Diese wurden für die GeoDict Version 2018 nochmals weiterentwickelt und erlauben nun noch höhere Packungsdichten. Beispielhaft sind Strukturen mit den oben genannten Kenngrößen für unterschiedliche Faservolumengehalte bis 40 Prozent dargestellt.

## Import und Segmentierung von $\mu\text{CT}$ -Scan

Liegt eine Probe des zu untersuchenden Materials vor, kann ein  $\mu\text{CT}$ -Scan durchgeführt und die Mikrostruktur mittels GeoDict analysiert werden. Bei ausreichender Auflösung des Scans können die Einzelfasern anhand der Grauwerte vom Matrixmaterial segmentiert werden und man erhält die Mikrostruktur des realen Materials. Diese Mikrostruktur kann auf ihre geometrischen Kenngrößen wie beispielsweise Faservolumengehalt, Faserorientierung oder Faserdurchmesserverteilung untersucht werden. Die berechneten Größen können wiederum zur Modellierung und späteren Optimierung des Materials dienen.

Sowohl auf mit modellierten wie auch mit den  $\mu\text{CT}$ -Scan basierten Modellen können anschließend Simulationen durchgeführt werden, um zum Beispiel die mechanischen Materialeigenschaften zu bestimmen.

## Modelling

The four main parameters to model the microstructure of a short fiber reinforced material are the fiber orientation tensor, the fiber length distribution, the fiber diameter distribution, and the fiber volume fraction.

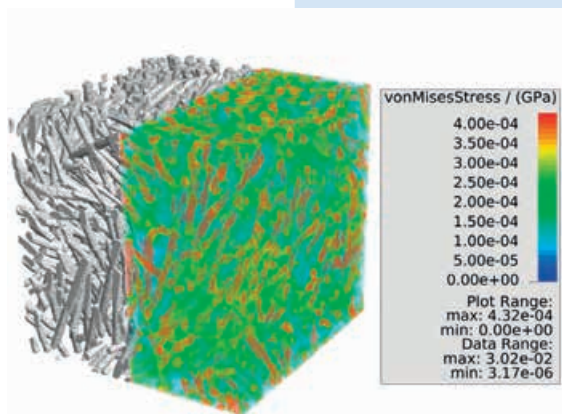
The fiber orientation tensor describes the three-dimensional direction of the reinforcing fibers in the matrix. In this example, 70 percent of the fibers are oriented along a preferable direction. The fiber length distribution, which depends on the geometry of the component and the process parameters, is defined here using a Gauss distribution with a mean value of 250  $\mu\text{m}$ .

The fiber diameter is constant with a value of 12  $\mu\text{m}$ . To digitally match the non-overlapping single fibers of real materials and reach a high fiber volume fraction, the needed highly efficient and fast computation algorithms have been further improved in the 2018 GeoDict version. Examples of microstructures modelled with these parameters and varying values of fiber volume fraction up to 40 percent are shown.

## Import and segmentation of $\mu\text{CT}$ -scans

The microstructure is analyzed using a  $\mu\text{CT}$ -scan when a sample of an existing material is available for examination. With proper resolution, the gray values of single fibers and matrix material in the polymer are differentiated during segmentation and the microstructure of the real material is modelled. Then, this microstructure model is analysed in regard to geometrical parameters such as fiber volume fraction, fiber orientation or fiber diameter distribution. With the values from the analysis, it is straightforward to create a digital twin of the existing structure, to be used for the optimisation of materials.

Regardless of the initial source being parameters or  $\mu\text{CT}$ -scans, the microstructure model is used for simulations to compute, for example, the effective mechanical material properties of the polymer.



*Von-Mises-Spannung in der Mikrostruktur durch Belastung in Hauptfaserrichtung*

*Von-Mises-stress in the microstructure for a load in main fiber direction*

Weitere Informationen/Further information:

Constantin Bauer, Math2Market GmbH, Kaiserslautern, +49 (0) 631 / 20 56 05 10, info@math2market.de, www.geodict.com