

Mikrostrukturbasierte Simulation inhomogener Werkstoffe

Henning Richter

Seminarvortrag
Institut für Werkstoff-Forschung, DLR Köln
04.05.2015

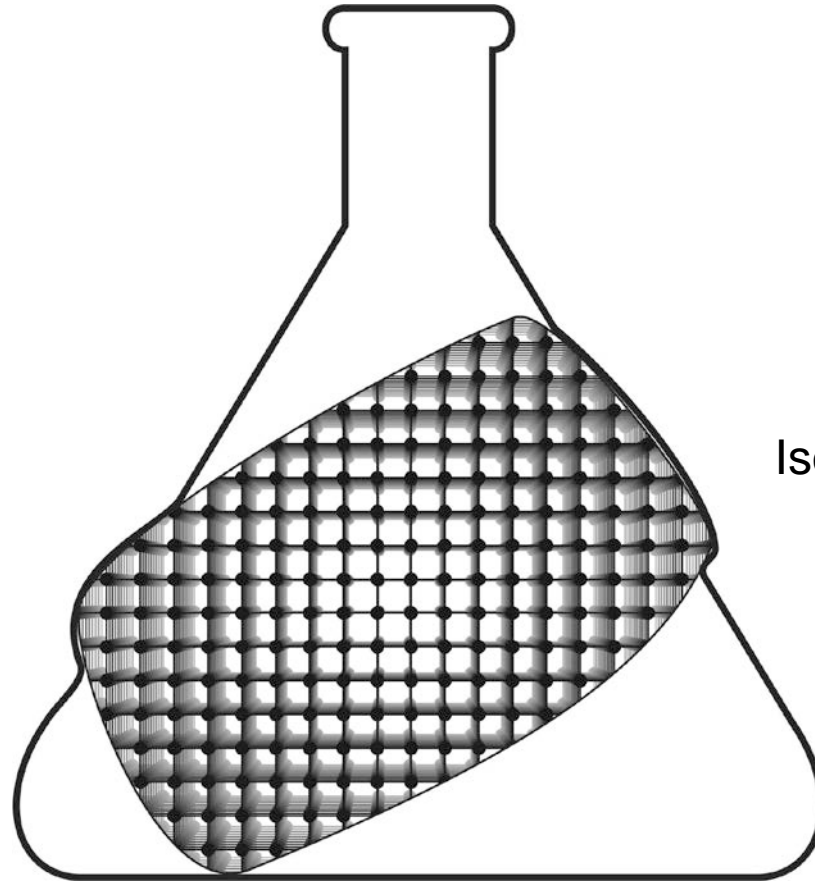
© 2015. Licensed under the CC-BY-NC-ND 4.0 license
(<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>)



Knowledge for Tomorrow



Materialverhalten?



$E = ?$

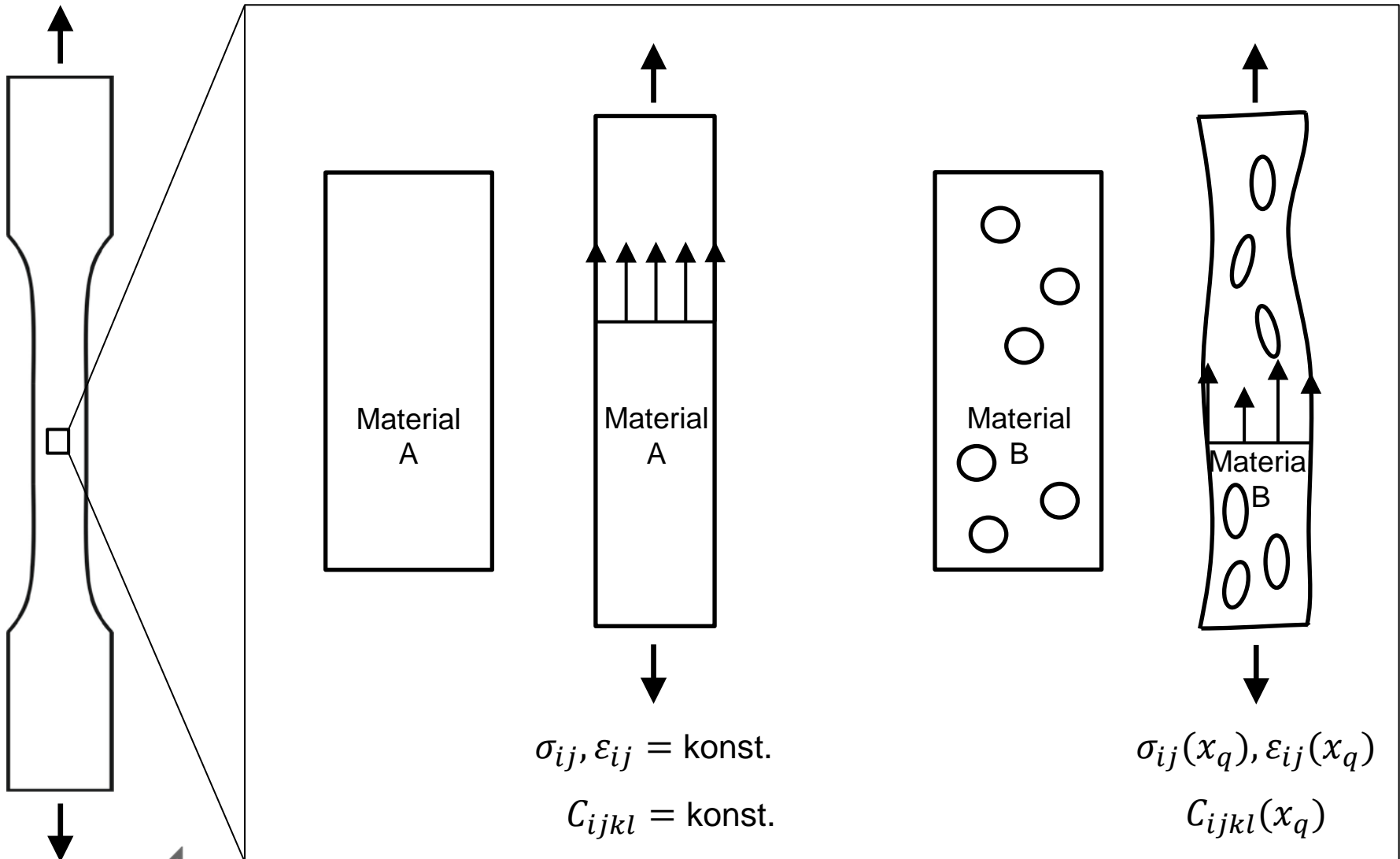
$\nu = ?$

Isotropie?

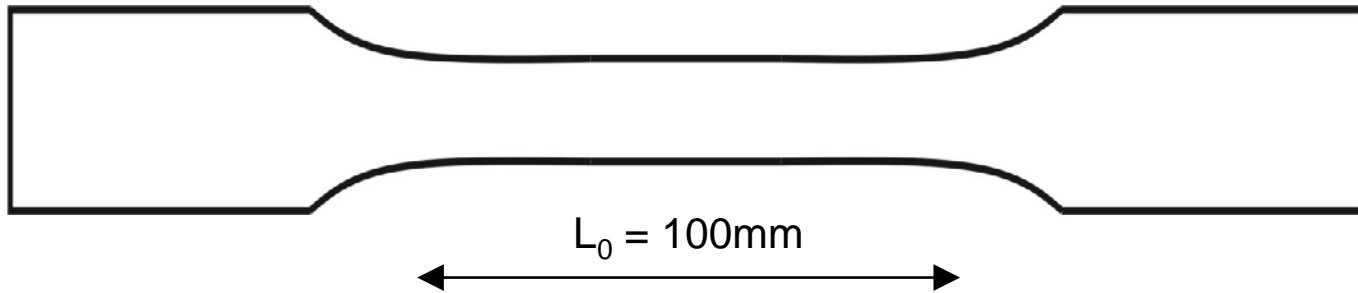
...



Materialverhalten: Modell und Realität



Orts- bzw. Volumenabhängigkeit von Materialkennwerten



Keramik:
Partikelgröße ca. $5\mu\text{m}$

Beton:
Aggregatgröße ca. 50mm

Stahl:
Korngröße ca. $50\mu\text{m}$

$5\mu\text{m}$

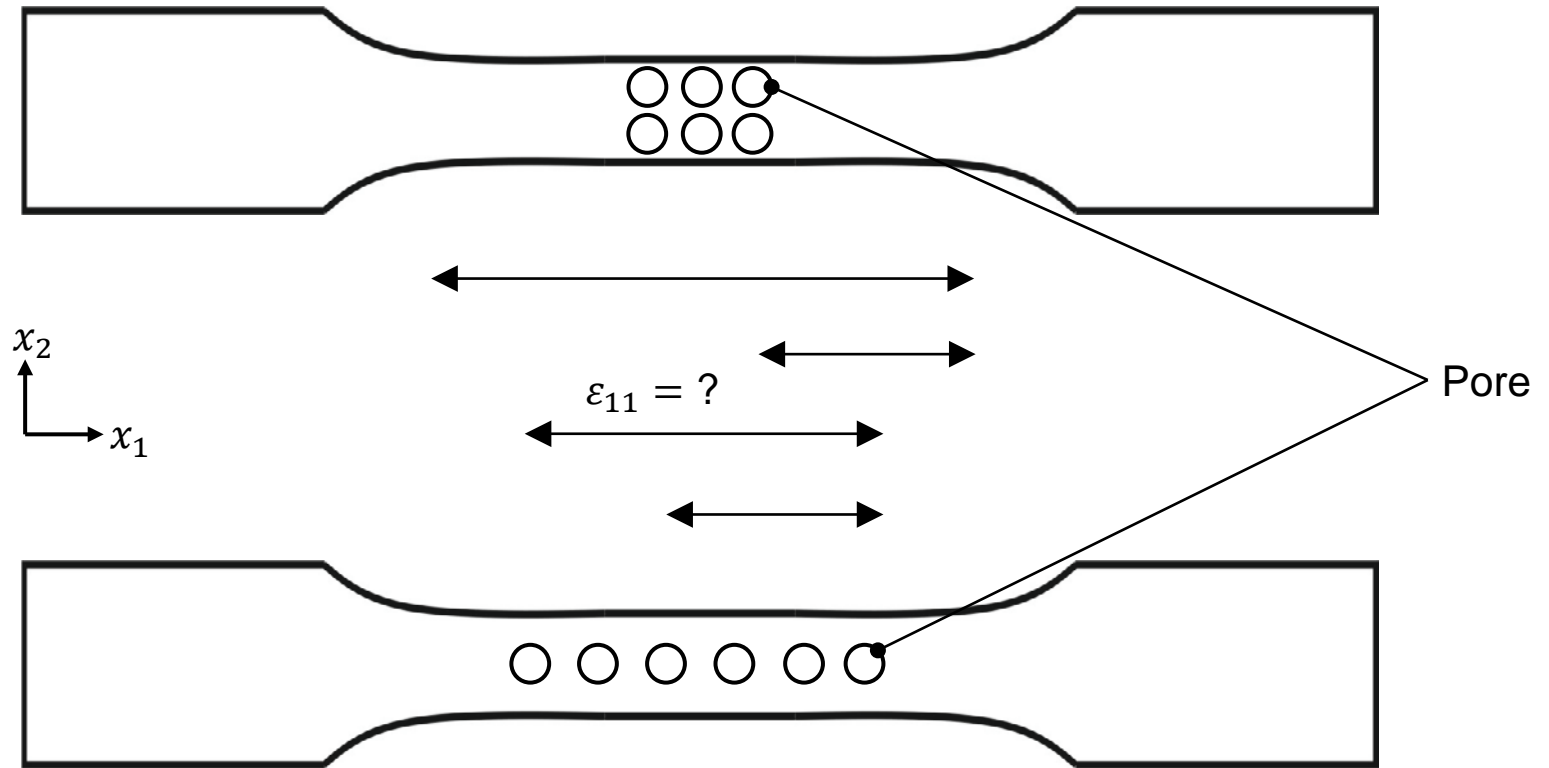
5mm

50mm

Längenskala



Mikrostrukturabhängigkeit von Materialkennwerten



Fazit: Wichtige Versuchsparameter

Realer Zugversuch

„Virtueller“ Zugversuch

Spezifikation

- Probengröße
- Randbedingungen
- Belastungsgeschwindigkeit

- Modellgröße
- Randbedingungen
- Berechnungsansatz
(quasistatisch, dynamisch)

Restriktion

- Auslegung des Lastrahmens
der Prüfmaschine

- Leistung des vorhandenen
Rechners



Wahl des Probenvolumens

Repräsentatives Volumen(element, RVE):

„A sample that

- (a) is structurally entirely typical of the whole mixture on average, and
- (b) contains a sufficient number of inclusions [...].”

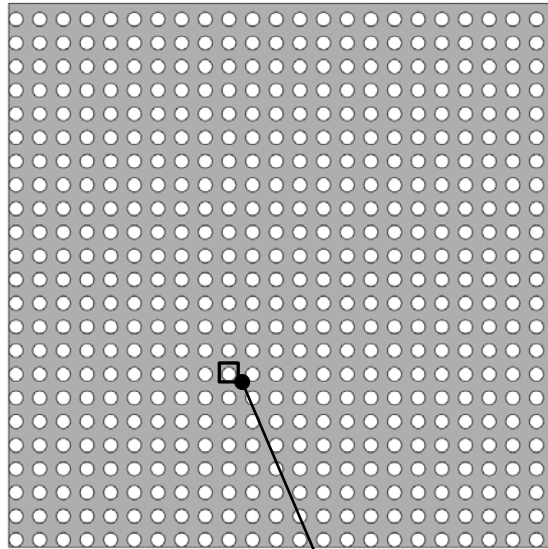
[R. Hill, Elastic properties of reinforced solids: Some theoretical principles, J. Mech. Phys. Solids, 1963]

→ Auswahl der Probe bzw. des Repräsentativen Volumenelements ist

- problemabhängig,
- mikrostrukturabhängig,
- häufig ein Kompromiss.



Wahl des Probenvolumens – Mikrostrukturabhängigkeit

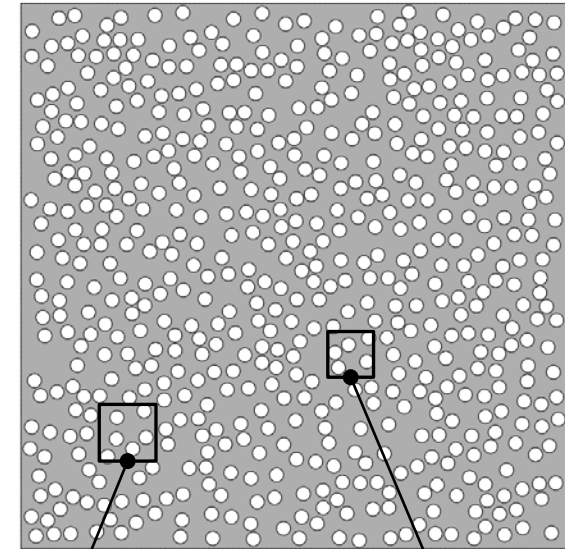

 Ω_{RVE}

Globale Periodizität:

Repräsentatives Volumenelement (RVE):

- kleinste wiederkehrende Einheit
- liefert effektive Materialkennwerte

$$\bar{\mathbf{c}}_{\text{RVE}} = \bar{\mathbf{c}}_{\text{eff}}$$


 Ω_{SVE_1}
 Ω_{SVE_i}

Lokale Periodizität (Annahme!):

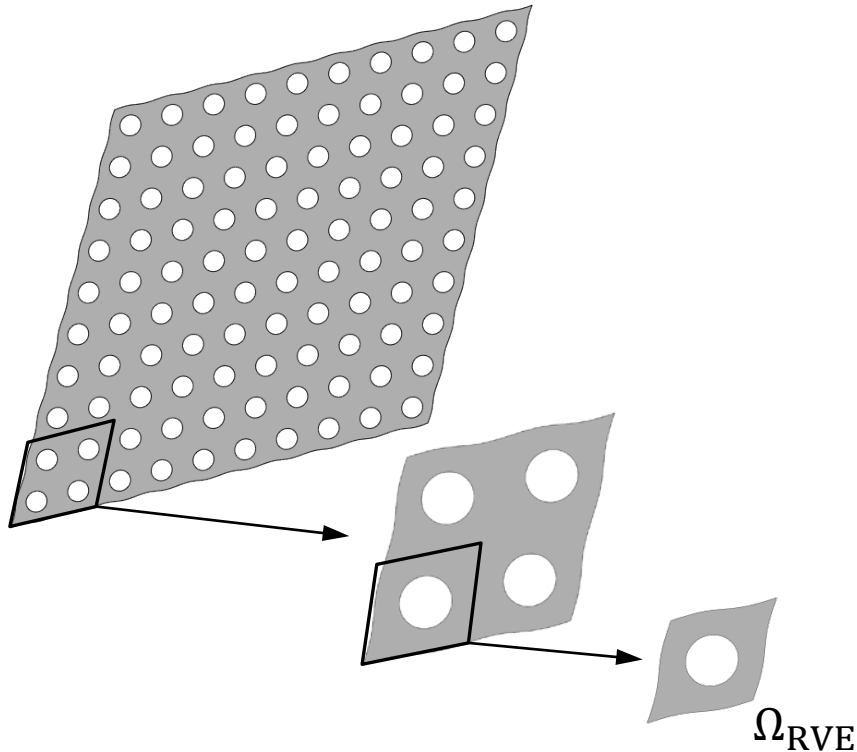
Statistisches Volumenelement (SVE):

- hinreichend groß bzw. ausreichend viele
- liefert scheinbare Materialkennwerte

$$\bar{\mathbf{c}}_{\text{SVE}} = \bar{\mathbf{c}}_{\text{app}}(\mathbf{x}); \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \bar{\mathbf{c}}_{\text{app}_i} = \bar{\mathbf{c}}_{\text{eff}}$$

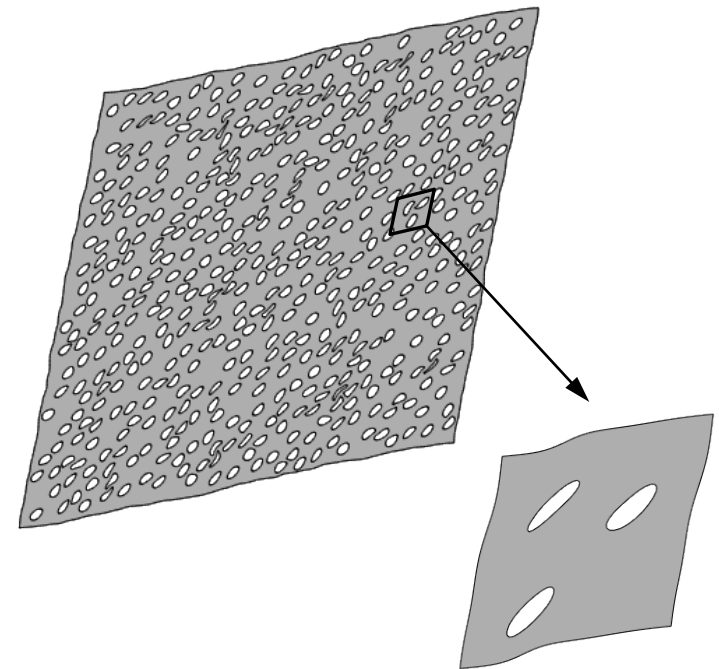


Inhomogene Mikrostruktur unter Schubdeformation



Globale Periodizität:

- Gesamtverformung der Mikrostruktur wird als periodisch angenommen
- Periodizität des RVEs muss im deformierten Zustand erhalten bleiben

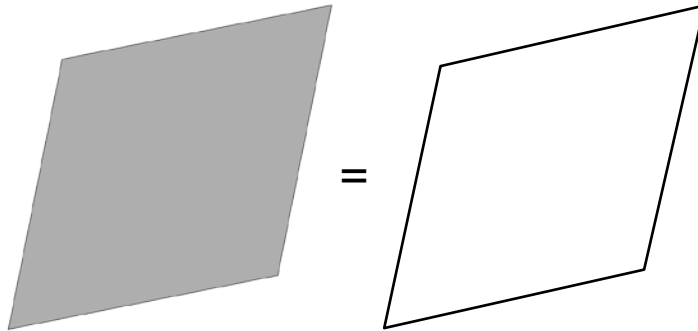


Lokale Periodizität (Annahme!):

- Gesamtverformung der Mikrostruktur ist nicht periodisch
- SVE repräsentiert Verformungen in einem begrenzten Materialausschnitt

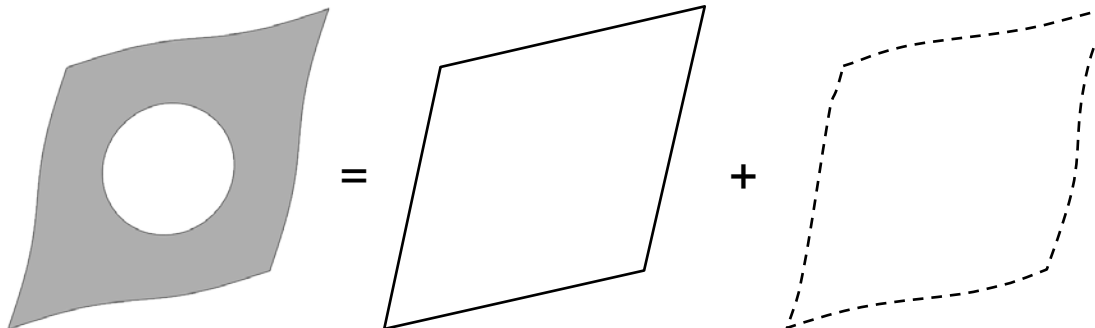


RVE – Zerlegung des Verschiebungsfelds



Homogene Mikrostruktur:

- Verschiebungsfeld u_i ist homogen; kontinuumsmechanische Betrachtung möglich

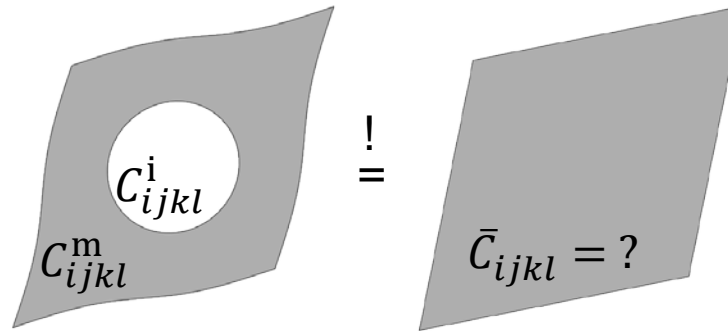


Inhomogene Mikrostruktur:

- Verschiebungsfeld u_i in Ω_{RVE} setzt sich aus effektivem homogenen Anteil und überlagertem fluktuierendem Anteil zusammen: $u_i = \bar{u}_i + \tilde{u}_i = \bar{\varepsilon}_{ij}x_j + \tilde{u}_i$



RVE – Homogenisierung



Ziel:

Überführen der inhomogenen Mikrostruktur in ein homogenes Ersatzmedium mit –makroskopisch betrachtet– äquivalenten mechanischen Eigenschaften.

- Gesucht: Konstitutive Gleichung auf der Makroebene:

$$\bar{\sigma}_{ij} = \bar{C}_{ijkl} \bar{\varepsilon}_{kl}$$

- Zu bestimmende makroskopische Größen:

$$\bar{\varepsilon}_{ij} \text{ und } \bar{\sigma}_{ij}$$

- Fluktuierender Verschiebungsanteil \tilde{u}_i muss (im Volumenmittel) verschwinden:

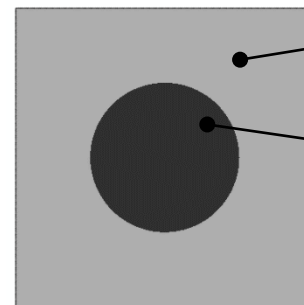
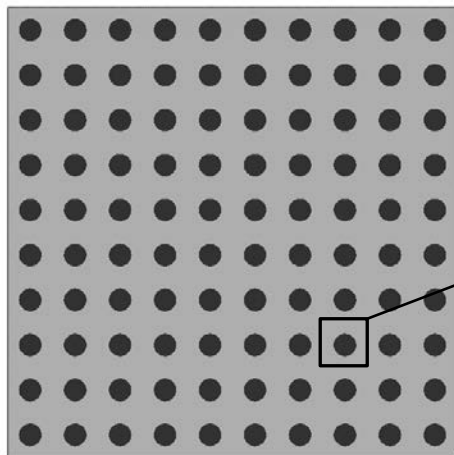
$$\int_{\Omega_{\text{RVE}}} \tilde{u}_i dV_{\Omega_{\text{RVE}}} = 0 \quad (\text{ähnliche Überlegungen gelten für Spannungen in } \Omega_{\text{RVE}})$$



RVE – Wahl geeigneter Randbedingungen

Mikroskopische Fluktuationsanteile müssen im Volumenmittel verschwinden:

- Homogene Randverschiebungen $\tilde{u}_i = 0 = u_i - \bar{\varepsilon}_{ij}x_j \Rightarrow u_i = \bar{\varepsilon}_{ij}x_j$
- Periodische Randverschiebungen $\tilde{u}_i(x_j^+) = \tilde{u}_i(x_j^-)$ und
Randspannungen $\tilde{t}_i(x_j^+) = -\tilde{t}_i(x_j^-) \Leftrightarrow \tilde{\sigma}_{ij}n_j(x_k^+) = -\tilde{\sigma}_{ij}n_j(x_k^-)$
- Homogene Randspannungen $\tilde{\sigma}_{ij}n_j = 0 \Rightarrow t_i = \bar{\sigma}_{ij}n_j$
- Beispiel: Matrix mit regelmäßig angeordneten Einschlüssen (2-D)



Ω_{RVE}

$$E_m = E$$

$$E_i = 10E$$

$$v_i = v_m = v$$

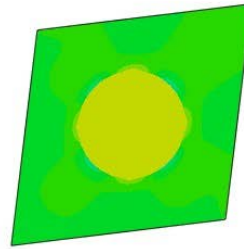
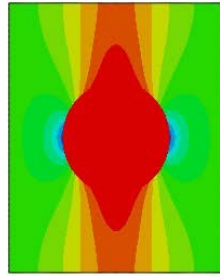
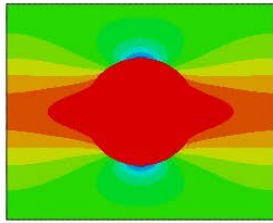
$$A_i/A_{\text{ges}} = 0,2$$

$$\bar{C}_{ijkl} = ?$$



RVE – Einfluss der Randbedingungen

- Homogene Randverschiebungen $u_i = \bar{\varepsilon}_{ij}x_j$



$$\bar{E}_{11} = 1.328E_m$$

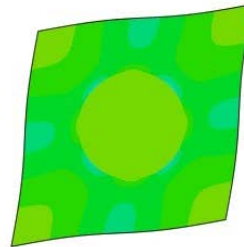
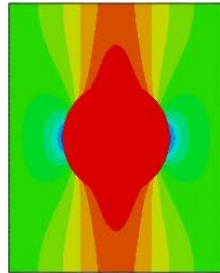
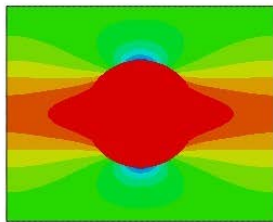
$$\bar{E}_{22} = 1.328E_m$$

$$\bar{G}_{12} = 1.304G_m$$

$$\bar{v}_{12} = 1.008v_m$$



- Periodische Randbedingungen $\tilde{u}_i(x_j^+) = \tilde{u}_i(x_j^-) \wedge \tilde{t}_i(x_j^+) = -\tilde{t}_i(x_j^-)$



$$\bar{E}_{11} = 1.328E_m$$

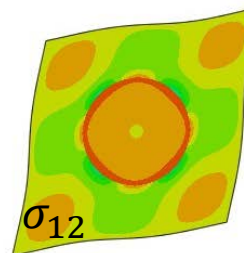
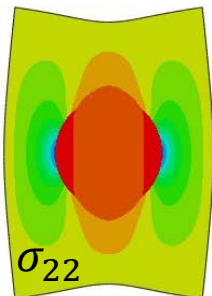
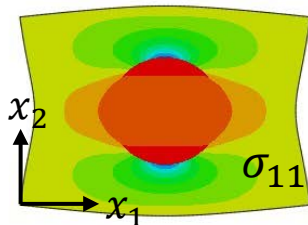
$$\bar{E}_{22} = 1.328E_m$$

$$\bar{G}_{12} = 1.263G_m$$

$$\bar{v}_{12} = 1.008v_m$$



- Homogene Randspannungen $t_i = \bar{\sigma}_{ij}n_j$



$$\bar{E}_{11} = 1.275E_m$$

$$\bar{E}_{22} = 1.275E_m$$

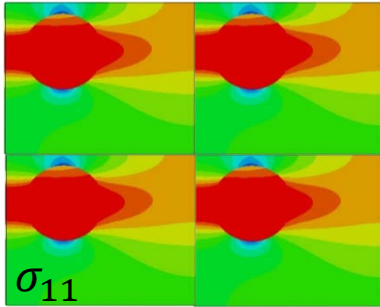
$$\bar{G}_{12} = 1.250G_m$$

$$\bar{v}_{12} = 1.151v_m$$

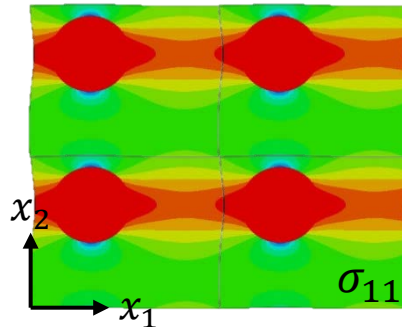


RVE – Periodische Randbedingungen

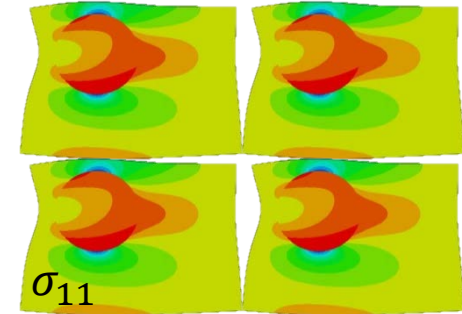
- Bei periodischer Mikrostruktur: Nur periodische Randbedingungen ergeben periodische Spannungs- und Dehnungsfelder



Homogene
Randverschiebungen



Periodische
Randbedingungen



Homogene
Randspannungen

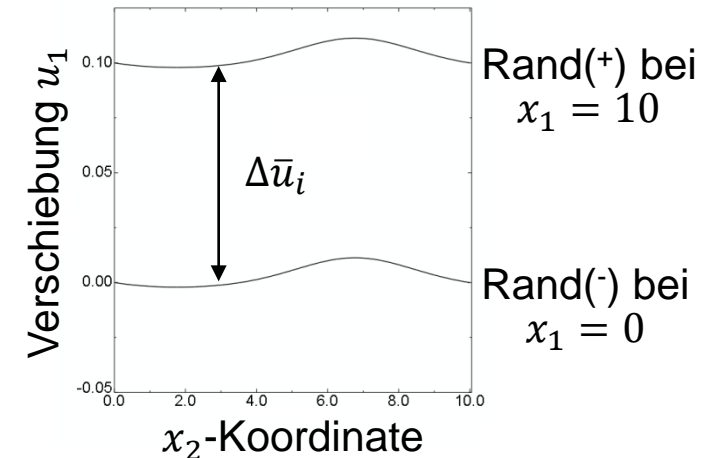
- Periodische Randbedingungen:

$$u_i(x_j^{+,-}) = \bar{u}_i(x_j^{+,-}) + \tilde{u}_i(x_j^{+,-}) \quad (\text{Zerlegung } u_i)$$

$$\tilde{u}_i(x_j^+) = \tilde{u}_i(x_j^-) \quad (\text{Forderung})$$

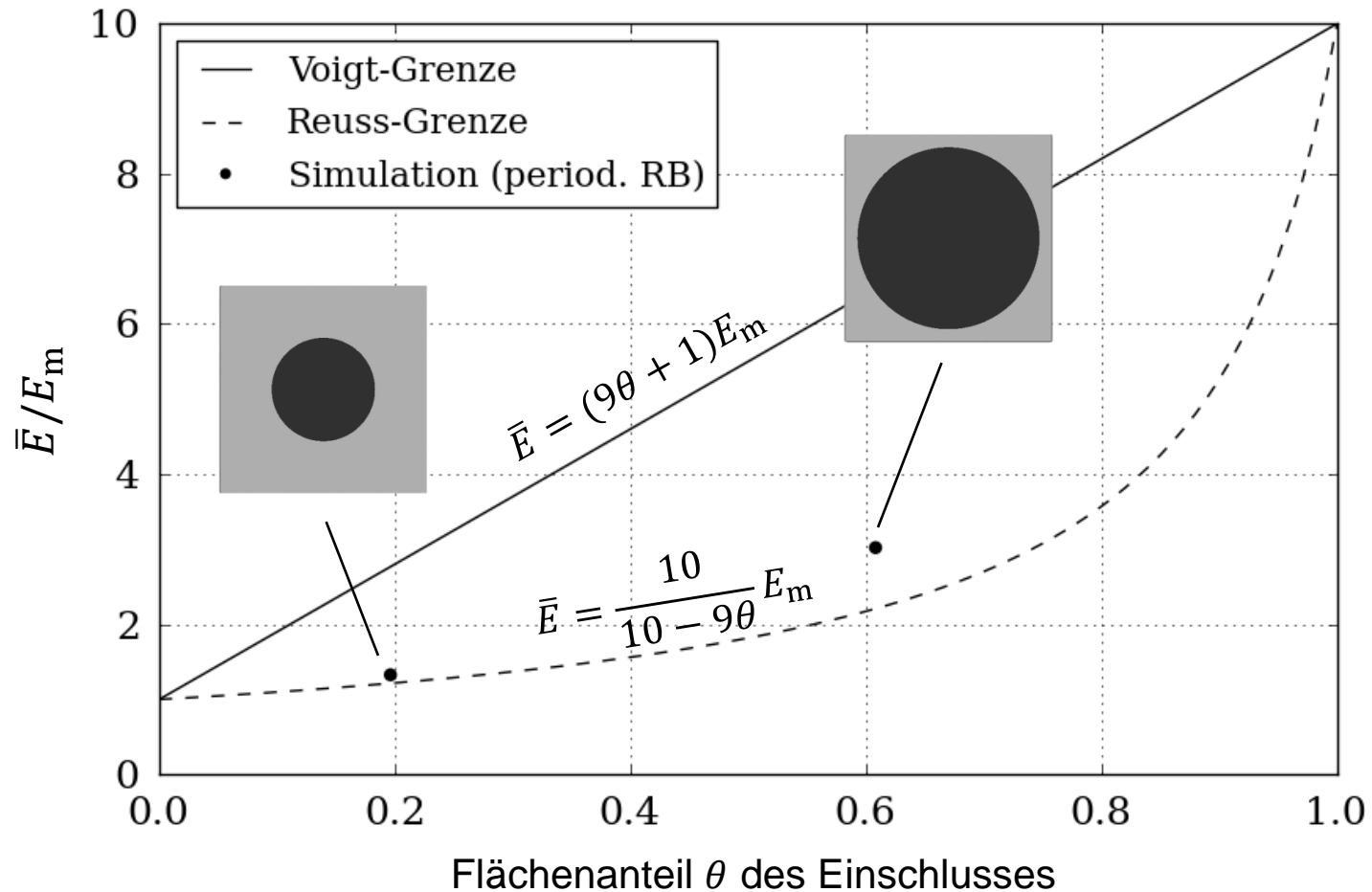
$$\Rightarrow u_i(x_j^+) = u_i(x_j^-) + \bar{u}_i(x_j^+) - \bar{u}_i(x_j^-)$$

$$\Leftrightarrow u_i(x_j^+) = u_i(x_j^-) + \Delta \bar{u}_i$$



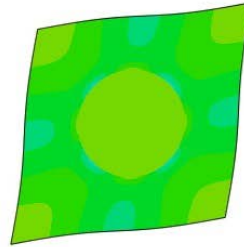
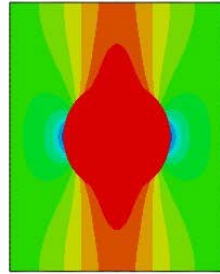
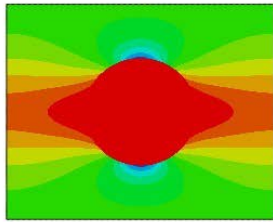
RVE – Periodische Randbedingungen

- Ergebnis plausibel? Vergleich mit „Mischungsregeln“:



RVE – Kein Größeneinfluss (Porenanteil jeweils 20%)

- Kantenlänge des RVEs $l_{\Omega_{\text{RVE}}} = l$

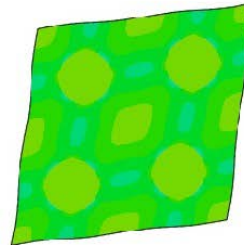
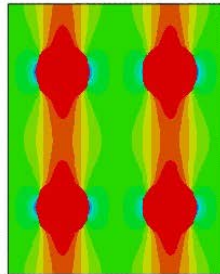
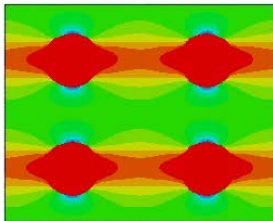


$$\bar{E}_{11} = \bar{E}_{22} = 1.328E_m$$

$$\bar{G}_{12} = 1.263G_m$$

$$\bar{v}_{12} = 1.008v_m$$

- $l_{\Omega_{\text{RVE}}} = 2l$

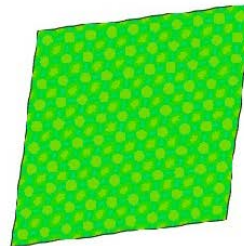
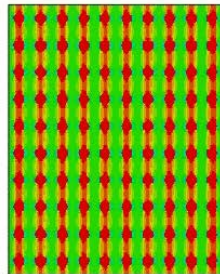
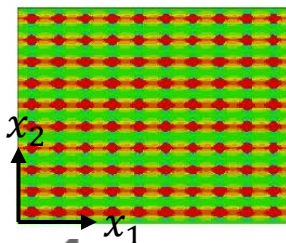


$$\bar{E}_{11} = \bar{E}_{22} = 1.328E_m$$

$$\bar{G}_{12} = 1.263G_m$$

$$\bar{v}_{12} = 1.008v_m$$

- $l_{\Omega_{\text{RVE}}} = 10l$



$$\bar{E}_{11} = \bar{E}_{22} = 1.326E_m$$

$$\bar{G}_{12} = 1.262G_m$$

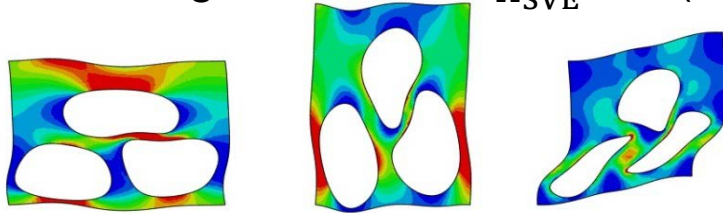
$$\bar{v}_{12} = 1.009v_m$$

(Einfluss d. Elementgröße)



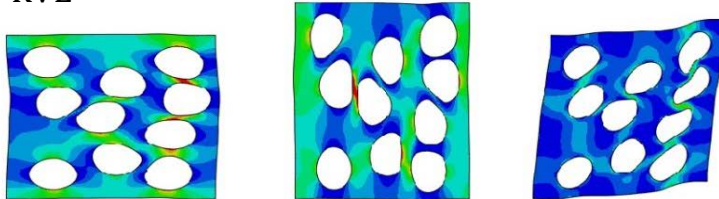
SVE – Größeneinfluss (Porenanteil jeweils ca. 30%)

- Kantenlänge des SVEs $l_{\Omega_{\text{SVE}}} = l$ (3 zufällig angeordnete Poren)



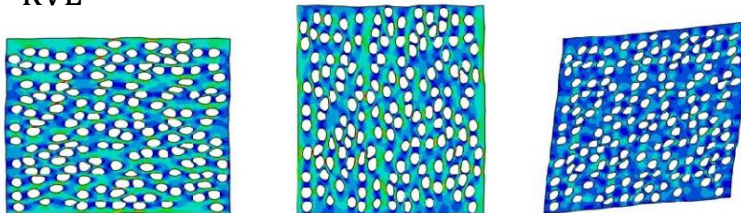
$$\bar{E}_{11}/\bar{E}_{22} = 1.131$$

- $l_{\Omega_{\text{RVE}}} = 2l$ (10 Poren)



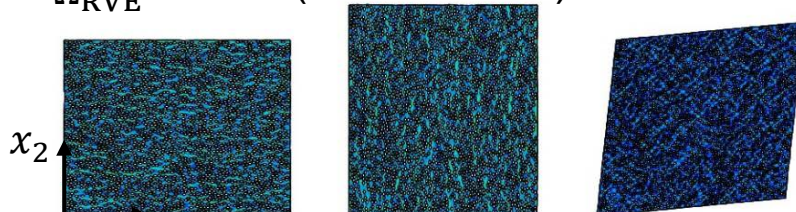
$$\bar{E}_{11}/\bar{E}_{22} = 1.097$$

- $l_{\Omega_{\text{RVE}}} = 8l$ (153 Poren)



$$\bar{E}_{11}/\bar{E}_{22} = 1.004$$

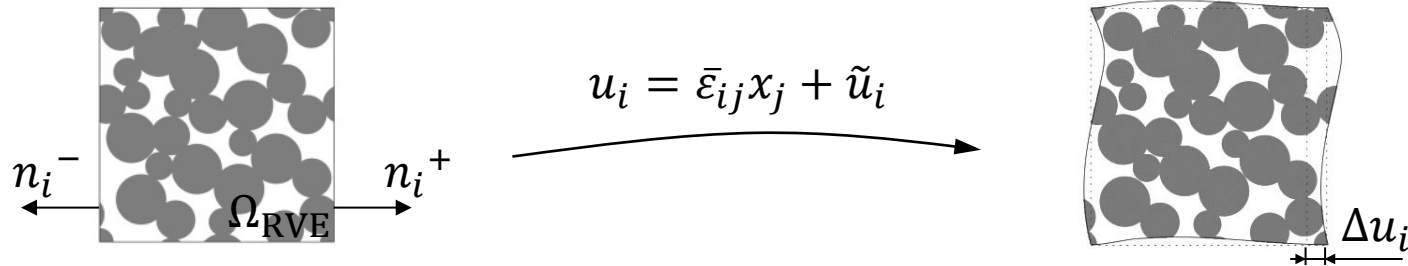
- $l_{\Omega_{\text{RVE}}} = 32l$ (2445 Poren)



$$\bar{E}_{11}/\bar{E}_{22} = 1.002$$



Randwertproblem



- Gleichgewichtsbedingung für Ω_{RVE} (keine Volumenkräfte):

$$\sigma_{ij,j} = 0$$

- Kinematische Beziehung (für kleine Deformationen):

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2} (u_{i,j} + u_{j,i}) \text{ in } \Omega_{\text{RVE}}$$

- Konstitutive Gleichung (Mikroskala):

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} \text{ in } \Omega_{\text{RVE}}$$

- Periodische Randbedingungen:

$$u_i(x_j^+) = u_i(x_j^-) + \Delta u_i \text{ auf } \partial\Omega_{\text{RVE}}$$

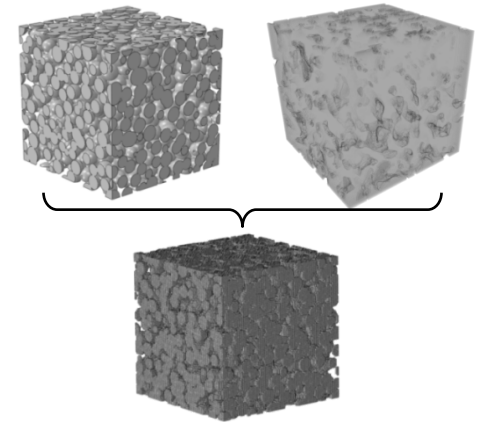
- Beziehung zwischen Randverschiebungen Δu_i und globalen Dehnungen $\bar{\varepsilon}_{ij}$:

$$\bar{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\Delta u_i}{\Delta x_j} + \frac{\Delta u_j}{\Delta x_i} \right)$$



Lösung mittels Finite-Element-Methode

- Generierung der RVE-Mikrostruktur
 - durch parametrisierte Ansätze (Zufallszahlen)
 - mit bildgebenden Verfahren (REM, CT)



- Diskretisierung des RVEs

- Aufbringen von (unabhängigen) Test-Lastfällen:

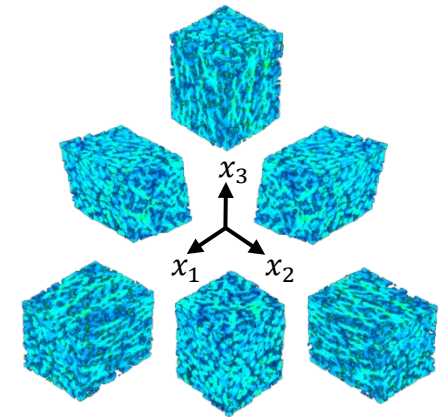
$$\bar{\varepsilon}_{ij}^I = \begin{bmatrix} \varepsilon_a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \bar{\varepsilon}_{ij}^{II} = \begin{bmatrix} 0 & 1/2 \varepsilon_a & 0 \\ 1/2 \varepsilon_a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \bar{\varepsilon}_{ij}^{III} = \dots$$

- Volumenmittelung der lokalen Spannungen $\sigma_{ij}(x_k)$:

$$\bar{\sigma}_{ij} = \frac{1}{V_{\Omega_{RVE}}} \int_{\Omega_{RVE}} \sigma_{ij}(x_k) dV_{\Omega_{RVE}}$$

- Konstitutive Gleichung (Makroskala):

$$\bar{\sigma}_{ij} = \bar{C}_{ijkl} \bar{\varepsilon}_{kl}$$



$$[\bar{C}_{ij}] = \begin{bmatrix} \bar{C}_{11} & \bar{C}_{12} & \bar{C}_{13} & 0 & 0 & 0 \\ \bar{C}_{22} & \bar{C}_{23} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & \bar{C}_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ & & \bar{C}_{44} & 0 & 0 & 0 \\ \text{sym.} & & & \bar{C}_{55} & 0 & 0 \\ & & & & & \bar{C}_{66} \end{bmatrix}$$

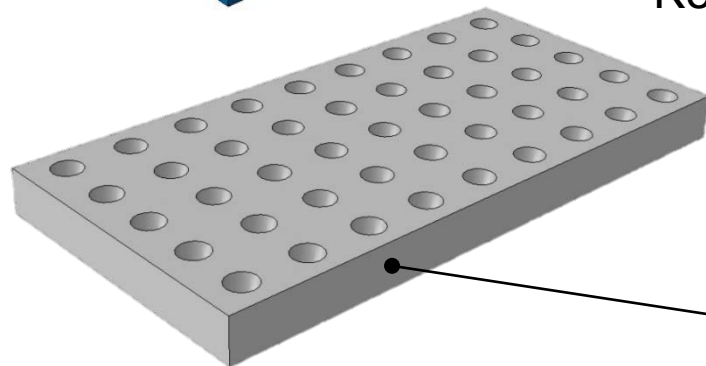
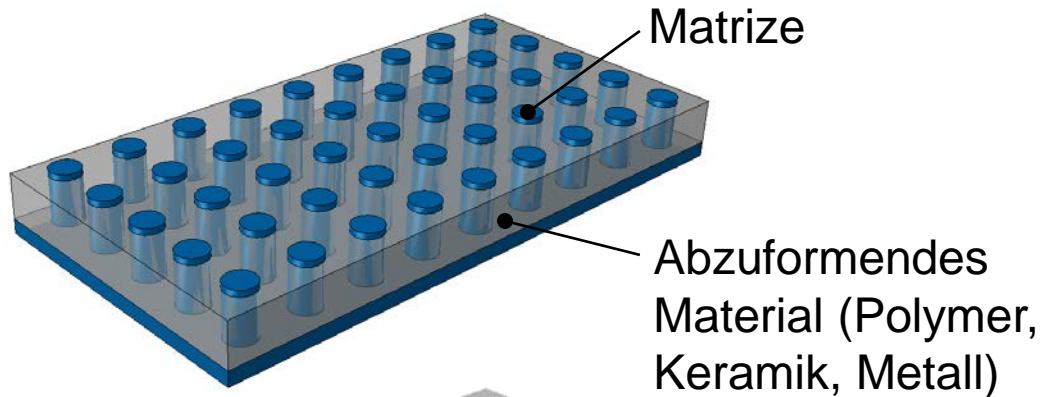


Anwendungen

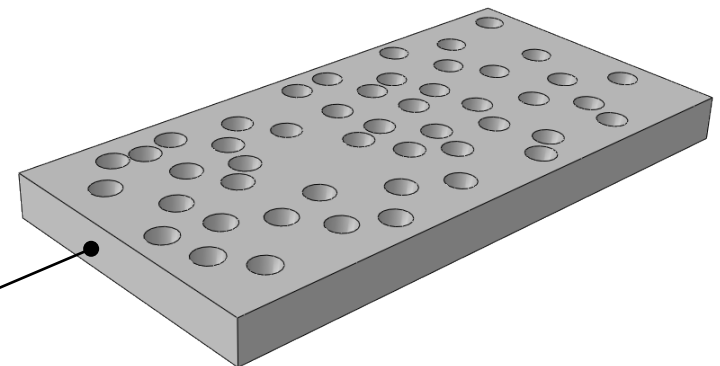
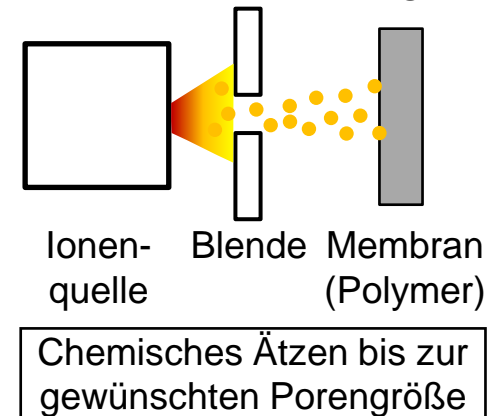


1) Poröse Membranen für Filteranwendungen

Abformen



Ionenspurätzung

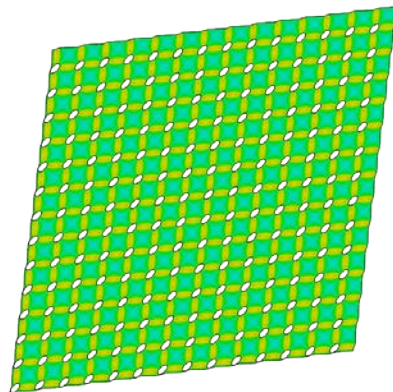


- Porenstruktur kann je nach Anwendungsfall und Herstellungsverfahren geordnet oder ungeordnet sein
- In-plane Eigenschaften? Geringe Materialstärke erschwert mechanische Tests

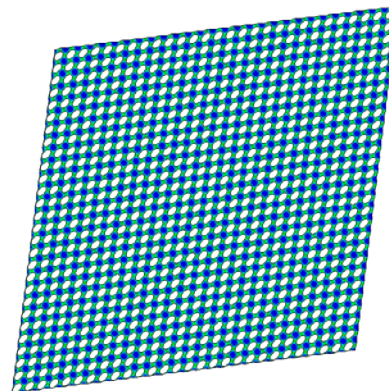


1) Poröse Membranen – Simulation

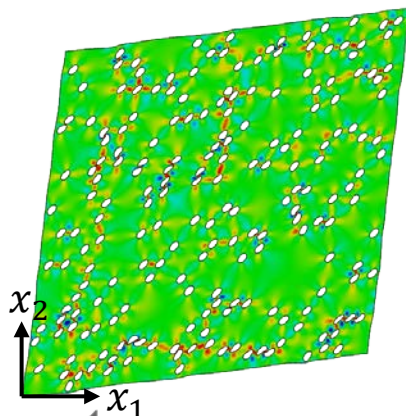
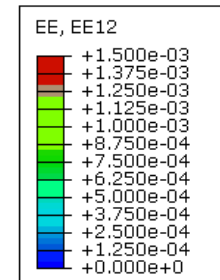
- Reduzierung auf zweidimensionales Problem, ebener Spannungszustand
- RVE mit geordneter, 5 SVEs mit ungeordneter, zufälliger Porenstruktur
- Porosität ϕ variiert zwischen 0% und 40%



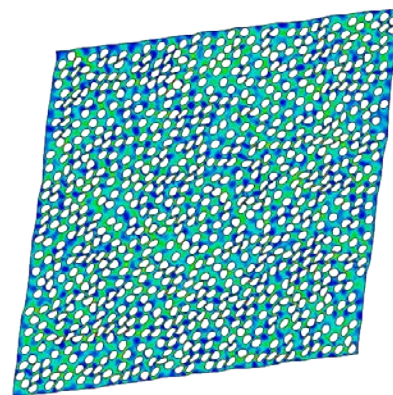
Porosität
 $\phi = 0,1$



Porosität
 $\phi = 0,38$



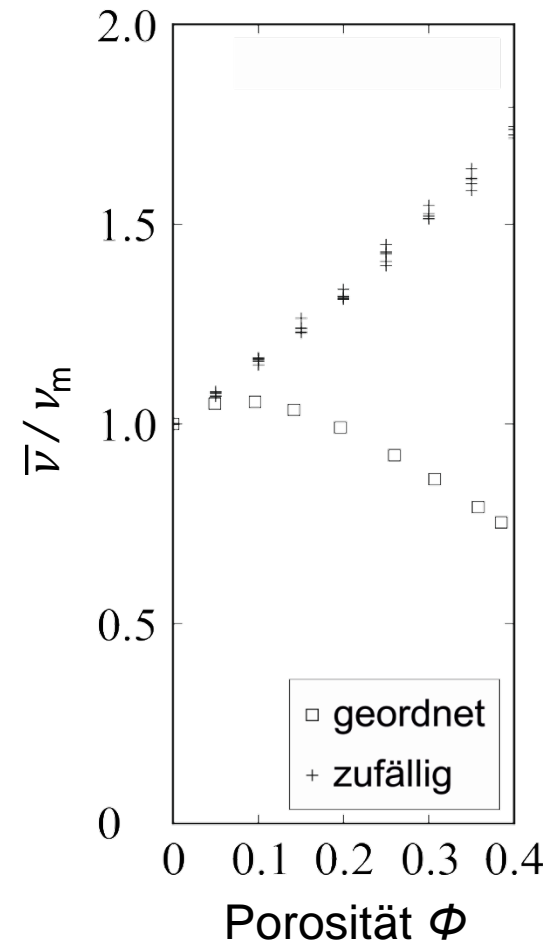
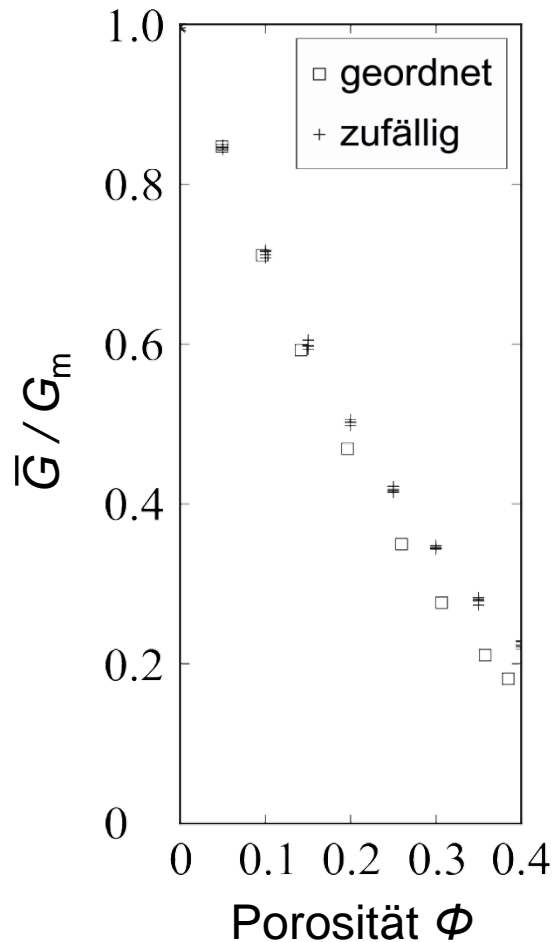
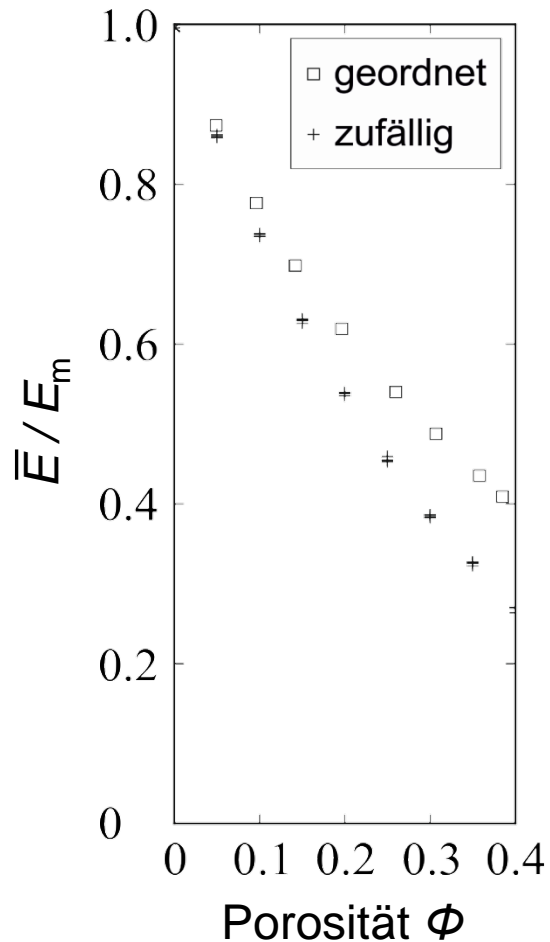
Porosität
 $\phi = 0,1$



Porosität
 $\phi = 0,4$



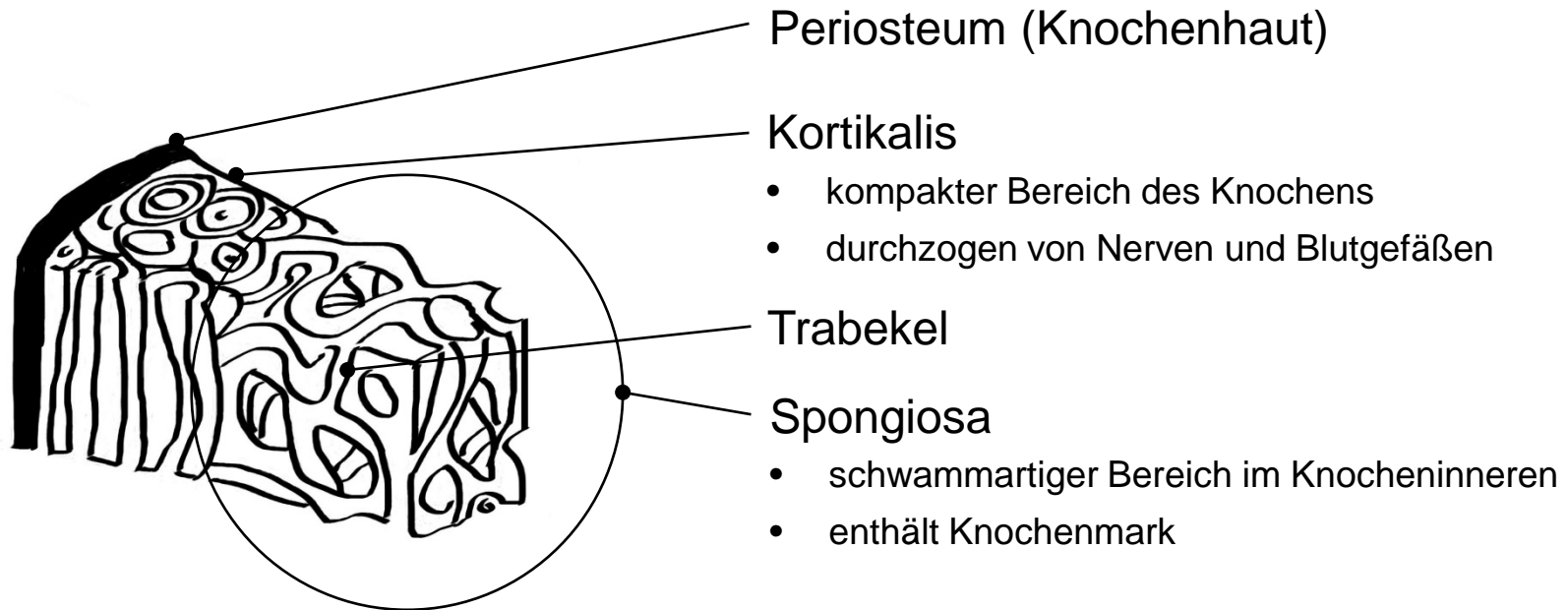
1) Poröse Membranen – Ergebnisse



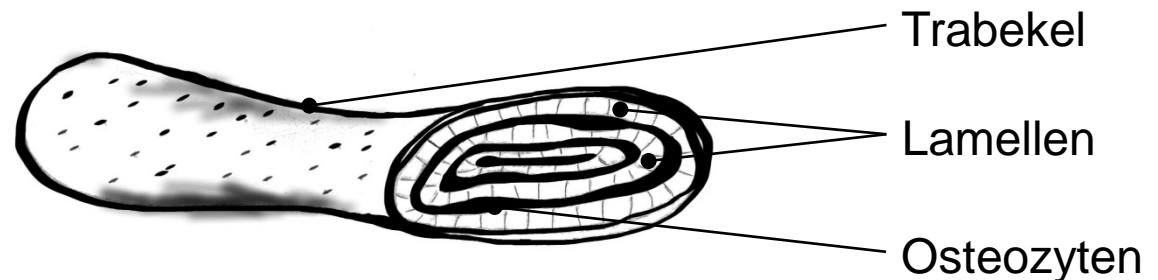
- Geordnete Porenstruktur weist höhere Dehnsteifigkeit auf (materialunabhängig)
- Querkontraktionszahlen verändern sich mit zunehmender Porosität gegensinnig



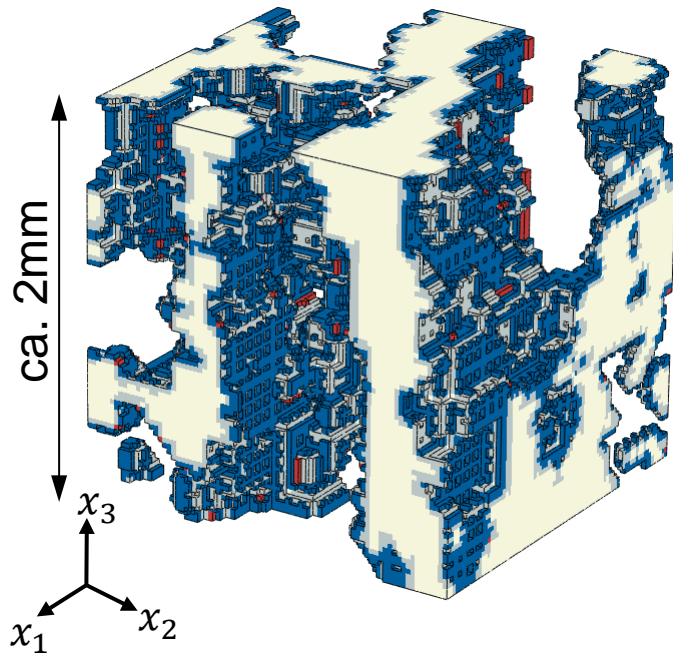
2) Trabekulärer Knochen – Aufbau



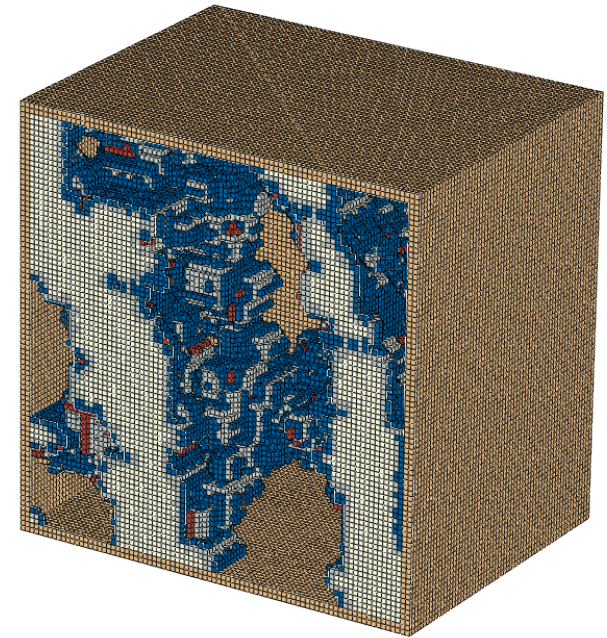
- Struktur der Spongiosa passt sich der Belastung des Knochens an



2) Trabekulärer Knochen – Modellierung



μ CT-Scan: B. van Rietbergen,
Department of Biomedical Engineering,
Eindhoven University of Technology
Rekonstruktion und Mapping: U. Mittag,
Institut für Luft- und Raumfahrtmedizin,
Deutsches Zentrum für Luft- und
Raumfahrt (DLR)



CT-Scan einer Spongiosa-Probe:

- Lamellenstruktur der Trabekel wird durch Bereiche unterschiedlicher E-Moduln abgebildet (weiß \triangleq 15GPa, blau \triangleq 2,5GPa)

FE-Modell (SVE):

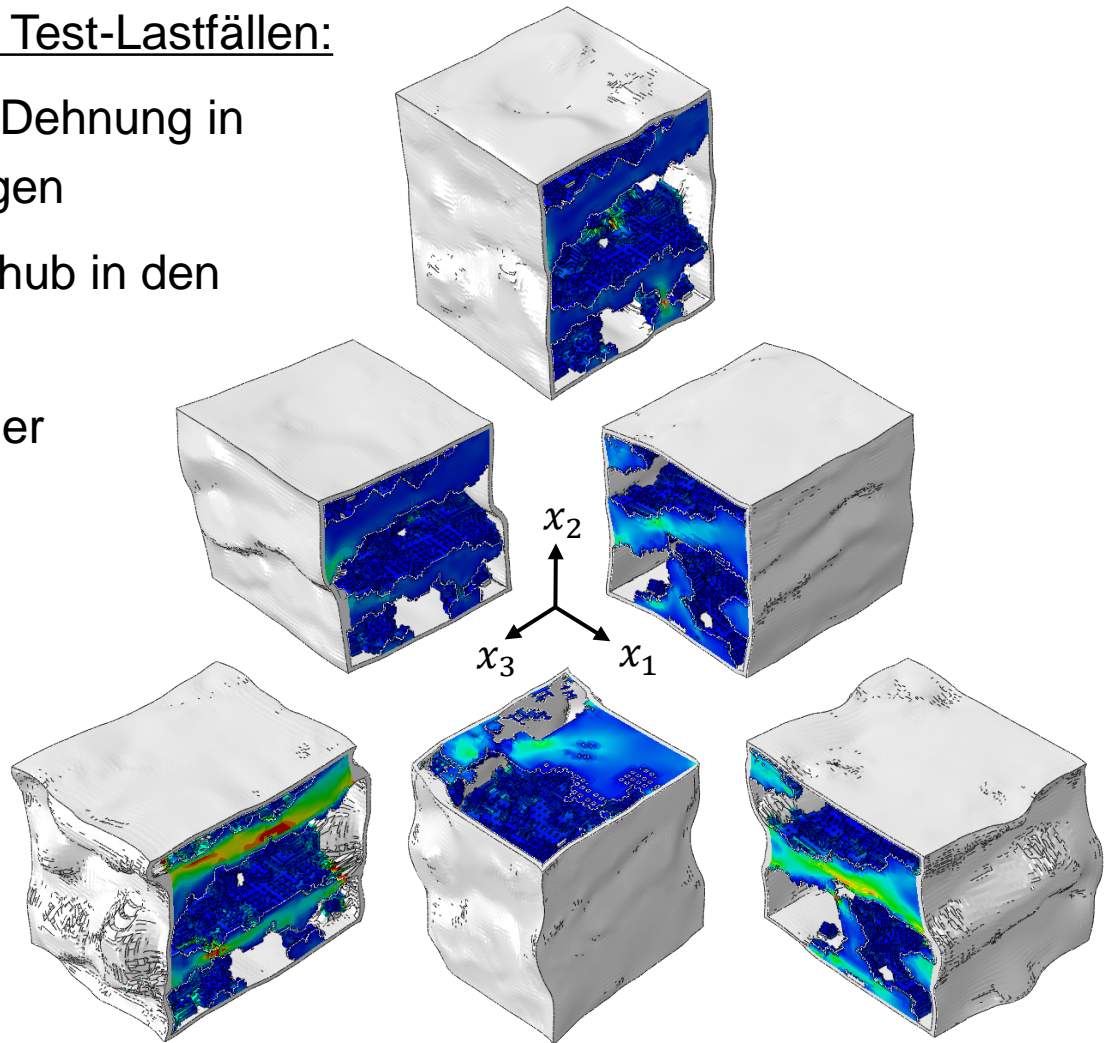
- Keine Periodizität – Mikrostrukturmodell wird in „Hülle“ mit effektiven elastischen Eigenschaften eingebettet (braun)



2) Trabekulärer Knochen – Simulation

FE-Modell unter aufgebrachtten Test-Lastfällen:

- Drei Lastfälle von uniaxialer Dehnung in den drei Koordinatenrichtungen
- Drei Lastfälle von reinem Schub in den drei Koordinatenebenen
- Plots zeigen die Verteilung der Mises-Vergleichsspannung in den Trabekeln
- Annahme lokaler Periodizität



2) Trabekulärer Knochen – Experimente

Dichteabhängige Materialkennwerte der Spongiosa aus Tests an Humanproben:

- Druck-E-Modul: $E \sim 2875\text{GPa} \cdot \rho^3$
[Carter and Hayes, *The compressive behavior of bone as a two-phase porous structure, J. Bone Joint Surg. Am.*, 1977]
- Schubmodul: $G \approx 1234\text{MPa} \cdot \rho - 407\text{MPa}$
[Bruyère Garnier et al., *Mechanical characterization in shear of human femoral cancellous bone: torsion and shear tests, Med. Eng. Phys.*, 1999]
- Poissonzahl: $\nu_{23} = 0,27(0,21)$, $\nu_{31} = 0,15(0,08)$, $\nu_{12} = 0,2(0,12)$ für $\rho \approx 0,3\text{g/cm}^3$
[Dalstra et al., *Mechanical and textural properties of pelvic trabecular bone, J. Biomech.*, 1993]

Unwägbarkeiten:

- Abhängigkeit der gemessenen mechanischen Eigenschaften vom Ort der Probenentnahme (Anpassung der Trabekelstruktur)
- Probengröße und -anzahl naturgemäß begrenzt

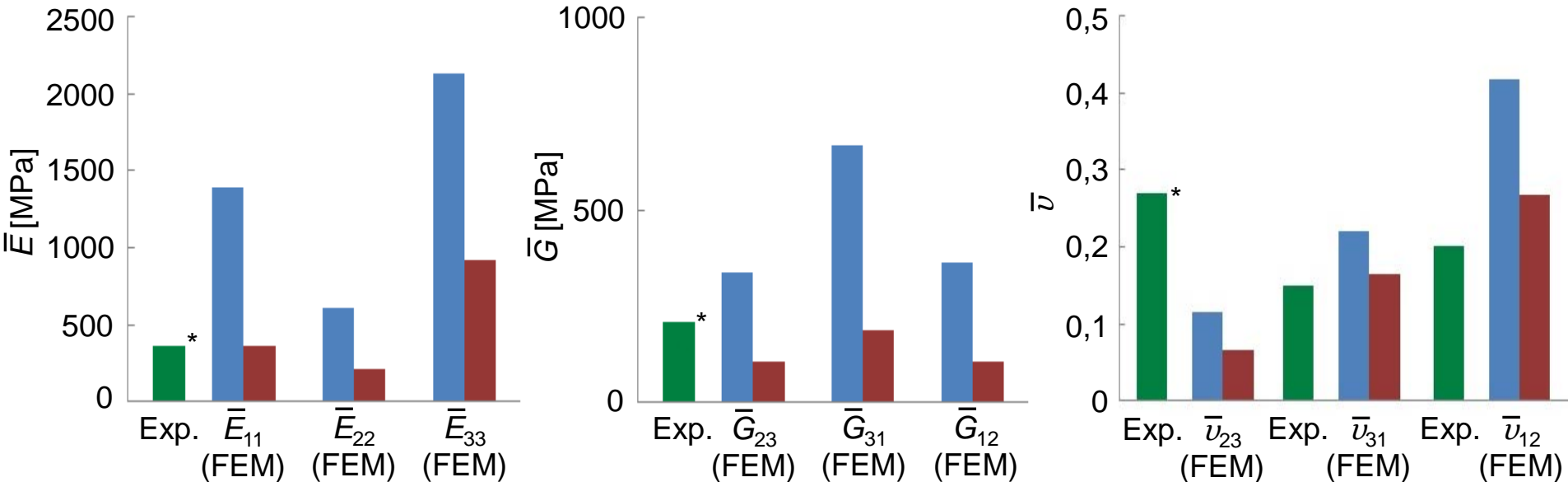


2) Trabekulärer Knochen – Vergl. Simulation-Experiment

- Dichte des Knochen-SVEs beträgt $0,5\text{g/cm}^3$

Äußere Hülle besitzt

- gemittelte Eigenschaften der Kortikalis
- gemittelte Eigenschaften der Spongiosa



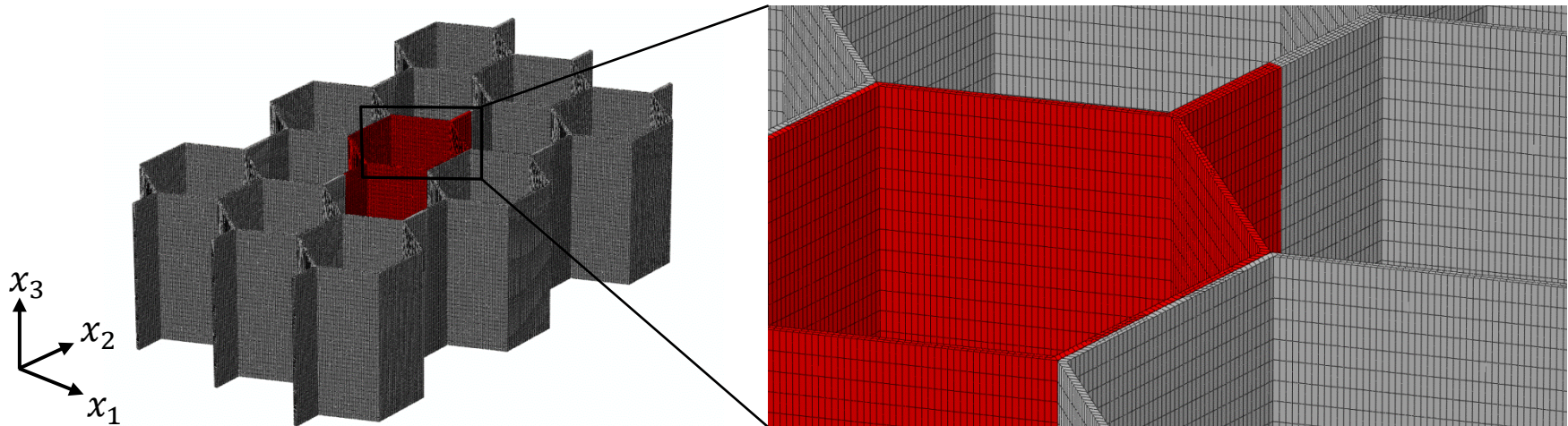
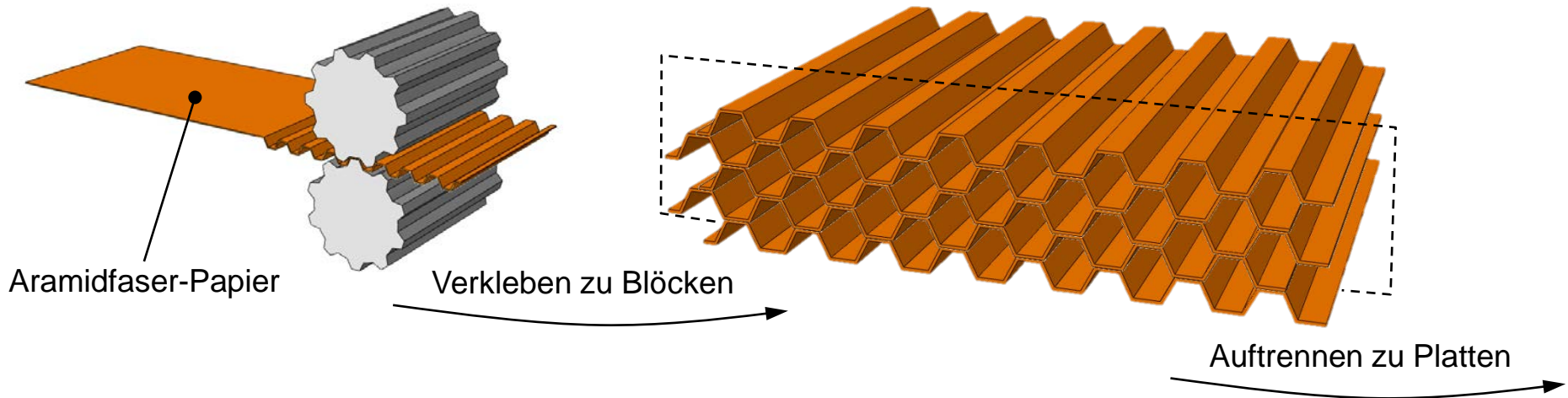
* unterschiedliche Quellen!

Ergebnis:

- Mikrostruktureinfluss – betrachtetes SVE des trabekulären Knochens zu klein bzw. mehr SVEs notwendig
- Einfluss der Steifigkeit der äußeren Hülle dominiert

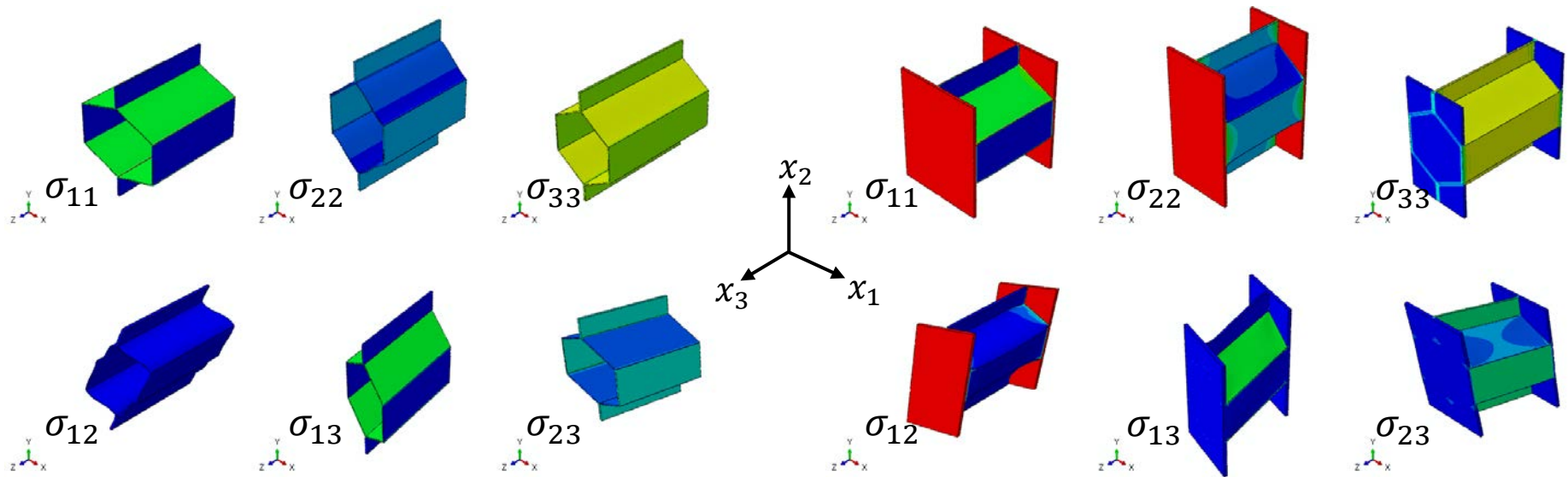


3) Wabensandwich – Herstellung



3) Wabensandwich – Simulation

Funktionsprinzip des Sandwichaufbaus:



Keine Deckschicht

Zwei Deckschichten mit
 $E_{\text{Deckschicht}} = 10E_{\text{Honeycomb}}$

Ergebnis:

- Starke Verbesserung der in-plane-Eigenschaften – effektive E-Moduln $\bar{E}_{11} = \bar{E}_{22}$ und effektiver Schubmodul \bar{G}_{12} steigen
- Out-of-plane-Eigenschaften bleiben nahezu unverändert



Fazit

Ziele der mikrostrukturbasierten Werkstoffsimulation:

- (Möglichst genaue) Nachbildung des mechanischen Verhaltens inhomogener Werkstoffe
- „Blick in das Materialinnere“: Auflösen der lokalen Spannungs- und Dehnungsfelder

Praktischer Nutzen:

- Versuchsplanung: Reduzierung der benötigten Probenanzahl
- Versuchsauswertung: Hilfe bei der Interpretation von Versuchsergebnissen
- Abschätzung von effektiven Materialkennwerten, falls Messwerte nicht verfügbar oder werkstoffmechanische Tests nicht möglich sind
- Gezielte Anpassung der Mikrostruktur neuer Werkstoffe („Materialdesign“)

