

Zufällige geometrische Strukturen: Modelle für Geometrien von Materialien

F. Ballani, K.G. van den Boogaart (Institut für Stochastik)

Stochastische Geometrie / Keim-Korn-Modell / Zufällige Packung / Zufälliges Mosaik

Moderne Funktionswerkstoffe weisen eine komplexe zufällige Mikrostruktur auf, die die makroskopischen Materialeigenschaften maßgeblich beeinflusst. Die zielgerichtete Entwicklung neuer und Verbesserung derzeit verwendeter Werkstoffe erfordert ein tieferes Verständnis dafür, wie diese Mikrostruktur makroskopische Materialeigenschaften beeinflusst. Modelle aus der stochastischen Geometrie wie zufällige Mosaik und Keim-Korn-Modelle sind ideal geeignet, die zufällig variierende Mikrostruktur von Materialien zu beschreiben. Solche Modelle werden seit vielen Jahren am Institut für Stochastik entwickelt und untersucht. Basierend auf dem Wissen über die Herstellung der Materialien (z. B. die geometrische Form von Bestandteilen) und Analysen mit Hilfe bildgebender Verfahren (CT, REM, TEM) muss entschieden werden, welche der grundsätzlich bekannten Modelle für die Modellierung eines bestimmten Materials tatsächlich in Frage kommen. Gegebenenfalls sind bekannte Modelle zu modifizieren oder zu erweitern und geeignete Simulationsalgorithmen zu implementieren.

Innerhalb der TU Bergakademie Freiberg gibt es in der Anwendung dieser Modelle eine Zusammenarbeit mit verschiedenen anderen Instituten:

1. SFB 799 „TRIP-Matrix-Composite“:

Im Rahmen des am Institut für Mechanik und Fluidodynamik (Dr. Mühlich, Prof. Kuna) angesiedelten Teilprojekts C4 „Geometrische Beschreibung, mechanische Modellierung und Optimierung der Mesostrukturen von Keramik-TRIP-Stahl-Verbundwerkstoffen“ des SFB 799 „TRIP-Matrix-Composite“ soll die Keramik-Phase geometrisch modelliert werden. Ein erster Ansatz mit dem mengentheoretischen Komplement des auf einer zufälligen Kugelpackung basierenden sogenannten Kirschkerne-Modells („cherry pit model“) stellte sich dabei als nur bedingt zutreffend heraus. Deshalb wird alternativ eine Modellierung auf der Basis des Kantensystems eines zufälligen Laguerre-Mosaiks untersucht.

2. SPP 1418 „FIRE“:

Im Teilprojekt „Simulation und Optimierung der wärmetechnischen Eigenschaften von neuartigen kohlenstoffarmen oder kohlenstofffreien keramischen Werkstoffen für die Stahlindustrie“ des SPP 1418 „Feuerfest – Initiative zur Reduzierung von Emissionen (FIRE)“, das zusammen mit Prof. Trimis, Dr. Al-Azoubi und Dr. Ray (Institut für Wärmetechnik und Thermodynamik) betreut wird, ist das Institut für Stochastik insbesondere an der Entwicklung von Modellgeometrien beteiligt. Die zu modellierenden Materialien bestehen dabei aus Körnern unterschiedlicher Materialkomponenten und enthalten Poren. Um die Formvariabilität der Körner zu berücksichtigen, sollen vor allem zufällige Konfigurationen nicht überlappender Polyeder zum Einsatz kommen. Erste Algorithmen basierend auf dem „random sequential adsorption“-Prinzip und dem für Kugelpackungen bekannten „force-biased“-Algorithmus sind bereits implementiert, müssen aber noch optimiert werden.

3. Metallgefüge:

Als Vorarbeit für ein Vorhaben (Institut für Metallformung, Dr. Guk, K. Dembiński), in dem numerisch (ANSYS) der Einfluss der Gefügebestandteile Ferrit und Martensit

auf das Verformungsverhalten untersucht werden soll, wurden basierend auf Kugelpackungen und induzierten Voronoi-Mosaiken verschiedene Realisierungen eines Referenzmodells in einem geeigneten Elementarvolumens simuliert und zur Untersuchung bereitgestellt.