

## Exposé zur Dissertation

### ***Stochastic 3D microstructure modeling for virtual materials testing based on tomographic image data***

**Matthias Neumann**

Bei einer Vielzahl von Funktionsmaterialien wie zum Beispiel bei Elektrodenmaterialien in Brennstoffzellen oder Batterien beeinflusst die zu Grunde liegende Mikrostruktur maßgeblich effektive makroskopische Eigenschaften wie zum Beispiel die effektive Leitfähigkeit elektrisch leitender Materialien. Wenn man zum Beispiel poröses Nickel betrachtet, dann ist die (effektive) Leitfähigkeit dieses Materials geringer als die intrinsische Leitfähigkeit von (nicht-porösem) Nickel. Das Verhältnis von effektiver Leitfähigkeit (des porösen Nickels) und intrinsischer Leitfähigkeit hängt dabei nicht nur vom Volumenanteil der Poren ab, sondern auch von deren (in den Anwendungen meist komplexer und ungeordneter) Geometrie, also ihrer räumlicher Anordnung. Ein besseres quantitatives Verständnis der Zusammenhänge zwischen geometrischen Mikrostruktur-Kenngrößen und effektiven makroskopischen Eigenschaften ist von zentraler Bedeutung für die Optimierung von funktionalen Materialien.

Für die Aufklärung dieser Zusammenhänge erweist sich die Kombination von 3D Bildgebung, statistischer Bildanalyse, stochastischer 3D Mikrostrukturmodellierung und numerischer Simulation als wirksames Tool. Basierend auf 3D Bilddaten, die die Mikrostruktur realer Materialien abbilden, können wohldefinierte Mikrostrukturkenngrößen mittels statistischer Bildanalyse berechnet werden, während die zugehörigen effektiven makroskopischen Eigenschaften mithilfe numerischer Simulation bestimmt werden. Aufgrund der hohen Kosten, die bei der 3D Bildgebung anfallen, kann nur eine geringe Anzahl von realen Mikrostrukturen auf die beschriebene Weise untersucht werden. Dieses Problem kann umgangen werden, indem mittels stochastischer 3D Modellierung eine große Datenmenge an virtuellen, aber dennoch realistischen Mikrostrukturen erzeugt wird. Diese virtuellen Mikrostrukturen können anschließend sowohl für die statistische Bildanalyse als auch für die numerische Simulation als Input verwendet werden, um dann effizient Mikrostruktur-Eigenschafts-Beziehungen zu quantifizieren. Dieser Ansatz wird virtuelles Materialtesten genannt.

In meiner kumulativen Dissertation *Stochastic 3D microstructure modeling for virtual materials testing based on tomographic image data* habe ich neue Methoden zur stochastischen Bildanalyse sowie zur stochastischen Mikrostrukturmodellierung entwickelt und auf verschiedene funktionale Materialien (Sackpapier, Ibuprofen Tabletten und Elektrodenmaterialien in Brennstoffzellen und Batterien) angewendet. Darüber hinaus wird virtuelles Materialtesten durchgeführt, um Mikrostruktureinflüsse auf effektive Transporteigenschaften (wie die eingangs erwähnte effektive Leitfähigkeit) zu untersuchen.

All diesen Ergebnisse dienen die Konzepte der stochastischen Geometrie und mathematischen Morphologie als theoretische Basis. Im ersten Aufsatz der vorliegenden Arbeit werden die Mikrostruktur-Kenngrößen mittlere geodätische Tortuosität und Konstriktivität, die die Gewundenheit von Transportpfaden beziehungsweise die Ausprägung von Engstellen in einer Mikrostruktur quantifizieren, für stationäre zufällige Mengen<sup>1</sup> definiert und entsprechende statistische Methoden zu deren Bestimmung aus 3D Bilddaten eingeführt. Danach folgen drei Aufsätze, die sich mit der Mikrostrukturcharakterisierung verschiedener Materialien wie Sackpapier, Ibuprofen Tabletten und Elektrodenmaterialien unter Verwendung statistischer Analyse von 3D Bilddaten beschäftigen.

---

<sup>1</sup> Eine zufällige Menge ist ein mathematisches Objekt der stochastischen Geometrie, das hier als Modell für die einzelnen Konstituenten der Mikrostruktur wie z.B. dem Porenraum oder der Nickelphase im obigen Beispiel dient.

Während die Untersuchungen in diesen drei Aufsätzen auf Bilddaten von realen Mikrostrukturen basieren, wird in den folgenden drei Aufsätzen die stochastische 3D Mikrostrukturmodellierung von dreiphasigen Materialien zur Generierung virtueller, aber dennoch realistischer Mikrostrukturen diskutiert.

Dabei wird ein konzeptuell neuartiges, auf zufälligen Graphen basierendes Mikrostrukturmodell entwickelt, welches erlaubt die Konnektivitätseigenschaften aller drei Phasen gut zu kontrollieren. Dieses Modell, das an 3D Bilddaten von Anoden in Festoxidbrennstoffzellen angepasst wird, wird mit einem bestimmten Pluri-Gauß Modell aus der Literatur verglichen. Eine Verallgemeinerung des Letzteren wird schließlich verwendet, um die Mikrostruktur von Silber basierten Gasdiffusionselektroden zu modellieren. In den letzten beiden Aufsätzen wird stochastische Mikrostrukturmodellierung mit numerischer Simulation kombiniert um empirisch Formeln herzuleiten, die (insbesondere) effektive Leitfähigkeit mithilfe weniger Mikrostrukturkenngrößen der Transportphase beschreiben. Diese Mikrostrukturkenngrößen sind der Volumenanteil, die mittlere geodätische Tortuosität und die Konstriktivität. Die anhand von virtuellen Mikrostrukturen hergeleiteten Formeln werden unter Verwendung von 3D Bilddaten, die die Morphologie realer Mikrostrukturen abbilden, validiert.