

Modellierung und Simulation flüssiger und fester Schäume

Zur Erlangung des akademischen Grades einer
Doktorin der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

von der KIT-Fakultät für Maschinenbau des
Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)
angenommene

Dissertation

von

Jana Holland-Cunz, M.Sc.

Tag der mündlichen Prüfung: 04. Februar 2025
Hauptreferentin: Prof. Dr. rer. nat. Britta Nestler
Korreferent: Prof. Dr.-Ing. Frank Pöhler



Dieses Werk ist lizenziert unter einer Creative Commons Namensnennung -
Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz (CC BY-SA 4.0):
<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.de>

Kurzfassung

Poröse Materialien und Schäume spielen in verschiedenen Bereichen eine entscheidende Rolle, von Leichtbaumaterialien in der Luft- und Raumfahrt bis hin zu biomedizinischen Implantaten. Bei traditionellen Fertigungsverfahren ist es jedoch oft schwierig, die gewünschten physikalischen Eigenschaften zu erreichen. Schaumtemplatierung ist ein neuer Ansatz zur Entwicklung von Werkstoffen mit maßgeschneiderten Strukturen und vorhersagbaren Eigenschaften. Computergestützte Methoden bieten eine vielversprechende Lösung für die Prozessoptimierung, indem sie Einblicke in die Bildung der Schaum mikrostruktur geben und diese mit den resultierenden physikalischen Eigenschaften verknüpfen. Diese Arbeit bietet einen umfassenden Ansatz zur Optimierung von Schaumtemplatierungsprozessen durch die Verknüpfung numerischer Simulationen der Mikrostrukturbildung flüssiger Schäume mit Berechnungen der mechanischen Eigenschaften fester Schäume.

Unter Verwendung des Konzepts der digitalen Zwillinge zielt die Studie darauf ab, Korrelationen zwischen mikrostrukturellen Parametern und den resultierenden physikalischen Eigenschaften des Schaums aufzustellen. Sie verbessert das Verständnis des Materialverhaltens und trägt zur Entwicklung maßgeschneideter Schäume für spezifische Anwendungen bei, indem sie starke Struktur-Eigenschafts-Beziehungen entlang der gesamten Prozesskette der Schaumherstellung etabliert. Der in dieser Arbeit verwendete numerische Ansatz nutzt die Phasenfeldmethode, um einen mehrskaligen Modellierungsrahmen zu schaffen. Dieses Framework wurde auf numerische Simulationen von Schäumen angewandt und ermöglicht die Vorhersage ihrer Mikrostrukturen und mechanischen Eigenschaften.

Die Algorithmen, die die Schaumalterung abbilden, umfassen Beschreibungen des spontanen Reißens von Schaumfilmen und der Koaleszenz von Blasen. Darüber hinaus berücksichtigen sie den druckbedingten diffusiven Gastransfer zwischen Blasen (Ostwald-Reifung). Die vorliegende Arbeit zeigt, dass Simulationsstudien alternder Schäume, die diese Mechanismen berücksichtigen, die Entwicklung der Mikrostruktur in flüssigem Schaum mit sehr geringem Flüssigkeitsanteil im Grenzfall sehr trockener Schäume (engl. *dry foam limit*) vorhersagen. Die Ergebnisse verdeutlichen, dass die Dynamik der Schaumalterung abgebildet wird. Darüber hinaus eignet sich die Methode gut für großskalige Mikrostruktursimulationen. Dies ermöglicht es, statistische Eigenschaften von Schäumen zu untersuchen, die auf den Charakteristika der Strukturen auf der Blasenskala basieren.

Verschiedene geometrische Parameter beeinflussen das Materialverhalten fester Schäume unter mechanischer Last. Die vorgestellte Methode umfasst zwei Schritte. Im ersten Schritt werden offenporige Schaumstrukturen digital generiert und ausgelegt mithilfe eines Algorithmus, der eine präzise Regulierung der Geometrie erlaubt. Im zweiten Schritt werden die effektiven mechanischen Eigenschaften aus numerischen Simulationen von Druckversuchen im elastischen Bereich abgeleitet. Das numerische Modell ermöglicht eine genaue Vorhersage der mechanischen Eigenschaften fester Schäume. Simulationsstudien an den erzeugten Schaumstrukturen zeigen signifikante Unterschiede bezüglich des effektiven Elastizitätsmoduls, was den entscheidenden Einfluss der Schaumgeometrie unterstreicht.

Das in dieser Dissertation vorgestellte digitale Framework bietet ein leistungsfähiges Werkzeug, um den Prozess der Schaumtemplatierung zu verstehen und zu optimieren. Die Methode gibt Einblicke in die Auswirkungen grundlegender Faktoren, die die Entwicklung und Dynamik des zerfallenden Flüssigschaums bestimmen. Sie ermöglicht die Optimierung von Schaumstrukturen hinsichtlich gewünschter mikrostruktureller Eigenschaften. Zusätzlich ermöglicht sie eine eingehende Untersuchung der Auswirkungen der Geometrie auf die mechanischen Eigenschaften. Der vollständig digitale Workflow bietet einen Ansatz für den Entwurf und die Optimierung von maßgeschneiderten Schäumen mit präziser mechanischer Leistungsfähigkeit, indem die Schaumgeometrie reguliert und die effektiven mechanischen Eigenschaften aus Simulationsdaten extrahiert werden.

Abstract

Porous materials or foams play a crucial role in diverse industries, from lightweight structural materials in aerospace to biomedical implants. However, traditional processing routes often face challenges in achieving desired physical properties. Foam templating is a novel approach towards materials design with tailored structures and predictable properties. Computational methods offer a promising solution for guiding process optimization by providing insight into foam microstructure formation and linking it to the resulting physical properties. This work provides a comprehensive approach to optimize the foam templating processes by integrating numerical simulations of liquid foams' microstructure formation with computations of solid foams' mechanical properties.

Using the concept of digital twins, the study aims to establish correlations between microstructural parameters and the resulting physical foam properties. It improves the understanding of material behaviour and contributes to the development of tailor-made foam materials for specific applications by establishing strong structure-property relationships along the foam templating process route. The numerical approach employed in this work utilizes the phase-field method to establish a multi-scale modelling framework. This framework has been applied to numerical simulations of foams, allowing for the prediction of both their microstructures and mechanical properties.

The algorithms mapping the foam ageing process include descriptions of the spontaneous rupture of foam separating films and the coalescence of bubbles. In addition, it accounts for the pressure-driven diffusive gas transfer between bubbles, known as Ostwald ripening. In this work, it is found that simulation studies of ageing foams including these mechanisms predict the microstructure evolution in liquid foam in the dry foam limit. The results demonstrate that the foam ageing

dynamics are mapped. Furthermore, the method is well suited for large-scale microstructure simulations. This allows the investigation of statistical properties of foams, based on the structures' characteristics at the bubble scale.

Different geometrical parameters influence the material behaviour of solid foams under mechanical load. The presented method comprises two stages. The first stage involves the digital generation and design of open pore foam structures using an algorithm that allows for precise regulation of the geometry. The second stage includes retrieving resulting effective mechanical properties from numerical simulations of compression tests in the elastic regime. The numerical model accurately predicts the mechanical properties of solid foams. Simulation studies on the generated foam structures reveal significant variations in the effective Young's moduli, emphasizing the crucial role of the foam geometry.

The digital framework presented in this dissertation offers a powerful tool for understanding and optimizing the foam templating process. The method is effective to gain insight into the impact of fundamental factors controlling the evolution and dynamics of decaying liquid foams, and enables the optimization of foam structures for desired microstructural properties. Additionally, it allows for in-depth investigation of the geometry's impact on mechanical properties. The fully digital workflow offers an approach for designing and optimizing tailored foam materials with precise mechanical performance by regulating foam geometry and extracting effective mechanical properties from simulation data.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen Menschen danken, die mich bei der Anfertigung meiner Dissertation unterstützt haben.

Meinen aufrichtigen Dank möchte Frau Professorin Britta Nestler für die Betreuung meiner Arbeit sowie für die Freiheit in der Ausgestaltung meiner Tätigkeiten aussprechen. Ihre anhaltende Unterstützung und ihr aufschlussreiches, nützliches Feedback sowie ihre konstruktiven Vorschläge waren mir eine wertvolle Hilfe.

Herrn Professor Frank Pöhler danke ich für die Übernahme des Korreferats und für die wissenschaftliche Betreuung als Zweitgutachter.

Ich danke meinen Kolleginnen und Kollegen am IAM-MMS und INT-MSS des KIT sowie am IDM der HKA für den Austausch, die gute Zusammenarbeit und die Unterstützung.

Besonders danken möchte ich Frau Dr. Anastasia August für die hervorragende Betreuung und Begleitung dieser Arbeit, für die vielen produktiven Gespräche und hilfreichen Diskussionen. Ihre kritischen Betrachtungen, ihre differenzierten Anmerkungen und die mehrfache Durchsicht dieser Dissertation haben wesentlich zu ihrem Erfolg beigetragen. Vor allem ihr moralischer Beistand und der menschliche Halt gaben mir Kraft und Mut zur Anfertigung und Vollendung meiner Dissertation.

Danken möchte ich auch allen Wegbegleiterinnen und Wegbegleitern, die mir in den letzten Jahren mit Ermutigung, Geduld und liebevollem Verständnis zur Seite standen. Es wäre schwierig, sie alle zu nennen, aber ohne die emotionale

Unterstützung, die mich durch die vielen Höhen und Tiefen des Projekts getragen hat, wäre diese Arbeit nicht realisierbar gewesen.

Karlsruhe, September 2024

Jana Holland-Cunz

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	i
Abstract	iii
Danksagung	v
1 Einleitung	1
1.1 Schaumstrukturen mit optimierten Eigenschaften	1
1.2 Forschungsmotivation und -beitrag	4
1.3 Aufbau der Dissertation	8
2 Grundlagen zur computergestützten Forschung an Schäumen 11	
2.1 Einführung	11
2.2 Eigenschaften von Schäumen auf verschiedenen Längen- und Zeitskalen	16
2.2.1 Mikrostrukturelle Eigenschaften von Schäumen	16
2.2.2 Metastabilität und Alterung flüssiger Schäume	23
2.3 Charakterisierung von Schäumen	28
2.3.1 Strukturdynamik flüssiger Schäume	28
2.3.2 Mechanische Eigenschaften fester Schäume	29
2.4 Synopsis computergestützter Ansätze	31
2.4.1 Digitale Zwillinge von Schäumen	31
2.4.2 Modellierung und Simulation von flüssigen Schäumen	33
2.4.3 Modellierung und Simulation von festen Schäumen	34
2.4.4 Phasenfeld-Methode und Schäume	37

3 Methodik	39
3.1 Modellierung von Flüssigschaumstrukturen mit der Phasenfeld-Methode	39
3.1.1 Thermodynamische Beschreibung	39
3.1.2 Evolutionsgleichung für Phasenfeld	42
3.1.3 Modellierung der Schaumentwicklung: Reißende Filme und sukzessive Koaleszenz	44
3.1.4 Modellierung der Schaumentwicklung: Gas-Diffusion und Ostwald-Reifung	46
3.2 Algorithmische Generierung von offenporigen Schaumstrukturen	49
3.3 Ermittlung und Homogenisierung mechanischer Eigenschaften fester Schäume	53
3.3.1 Methode für das mechanische Randwertproblem	53
3.3.2 Effektive elastische Eigenschaften durch Homogenisierungsmethode	55
4 Simulation alternder flüssiger Schäume	61
4.1 Setup für die Generierung flüssiger Schäume	61
4.2 Numerische Modellierung als Mittel zur Analyse und Vorhersage	66
4.3 Validierung: Stabilisierung einer einzelnen Gasblase	70
4.4 Vorhersage der Mikrostrukturentwicklung (Koaleszenz)	72
4.5 Statistische Charakterisierung von Mikrostrukturparametern	76
4.5.1 Datenanalyse	76
4.5.2 Zerfallsdynamik von Schäumen	76
4.5.3 Blasenvolumen und -verteilung	78
4.5.4 Gasdruck und Druckfeld	85
4.5.5 Blasenformen	91
4.5.6 Verbindung und Abstand benachbarter Blasen	95
4.6 Vorhersage der Mikrostrukturentwicklung (Ostwald-Reifung)	98
4.6.1 Schaumvergrößerung mit geringer Blasenzahl	98
4.6.2 Zeitliche Entwicklung und Charakterisierung des Blasenensembles	100
4.7 Zusammenfassung	103

5 Simulation der effektiven mechanischen Eigenschaften	
fester Schäume	109
5.1 Digitale Generierung präzise konfigurierter Schaumstrukturen	109
5.2 Numerische Simulation von Kompressionstests im elastischen Bereich	109
5.2.1 Validierung: Eshelby-Problem	109
5.2.2 Setup für Druckversuche	113
5.2.3 Simulationsbedingungen für isotrope Strukturen	113
5.2.4 Geometrie und mechanische Eigenschaften	119
5.3 Implikationen für das Materialdesign fester Schäume	124
5.4 Zusammenfassung	126
6 Zusammenfassung und Ausblick	129
6.1 Relevanz und Hintergrund der Arbeit	129
6.2 Mikrostruktur flüssiger Schäume während der Schaumalterung	130
6.3 Einfluss der Mikrostruktur auf effektive Eigenschaften	132
6.4 Optimierte Eigenschaften durch maßgeschneiderte Schaumstrukturen	133
A Anhang	137
A.1 Diskussion der Längenskalen in den betrachteten Problemen	137
A.2 Einfluss des zufälligen Seeds auf generische Verteilungen	138
Liste eigener Vorveröffentlichungen	141
Abbildungsverzeichnis	143
Tabellenverzeichnis	153
Literaturverzeichnis	155

1 Einleitung

1.1 Schaumstrukturen mit optimierten Eigenschaften

Von Leichtbaumaterialien in der Luft- und Raumfahrt bis hin zu biokompatiblen Strukturen in der Medizintechnik – poröse Materialien und Schäume sind von großem Interesse für viele technische Anwendungen in Industrie und Alltag [1]. Ihre einzigartigen physikalischen Eigenschaften, bedingt durch ein großes Verhältnis von Oberfläche zu Volumen, machen sie zu vielseitigen Werkstoffen für den Einsatz in unterschiedlichen Bereichen.

Neuartige Materialien und hochentwickelte Werkstoffe sind ein zentraler Motor für technologischen Fortschritt und Innovation. Gesellschaft und Industrie stehen beispielsweise in den Bereichen Energie, Mobilität und Gesundheit vor großen Herausforderungen. Hier bieten neue Technologien Lösungsansätze und Möglichkeiten der Anpassung an sich verändernde Bedingungen. Die Verknappung von Rohstoffen und das steigende Umweltbewusstsein machen es unabdingbar, Werkstoffe zu entwickeln, die mit geringem Ressourceneinsatz optimale Leistung erbringen. Energieeffiziente Technologien sind zudem ein Schlüsselement bei der Umsetzung der Energiewende. Sie reduzieren den Gesamtenergiebedarf und erleichtern die Integration erneuerbarer Energien in bestehende energieintensive Prozesse. Auch im Kontext der Miniaturisierung spielen Schaummaterialien eine wichtige Rolle. So sind sie bei der Entwicklung leichter, kompakter Produkte von Bedeutung, insbesondere im Bereich der Materialeffizienz oder bei besonderen akustischen Eigenschaften. Die Umsetzung dieser Technologien stellt komplexe

Anforderungen an Bauteile und Werkstoffe. Hierfür ist der Einsatz geeigneter Materialien mit spezifischen Eigenschaftsprofilen von entscheidender Bedeutung.

Die Möglichkeit, optimierte Werkstoffe mit exakt auf das Anforderungsprofil abgestimmten Eigenschaften zu entwickeln, rückt damit stärker in den Fokus. Schäume eignen sich mit ihren vielfältigen Strukturen und Eigenschaften für ein breites Spektrum an möglichen Einsatzgebieten. Metallschäume beispielsweise weisen aufgrund ihres Materials eine gute Wärmeleitfähigkeit und wegen ihrer großen Oberfläche eine ausgezeichnete Wärmeübertragungsfähigkeit auf, was sie attraktiv für Energiesysteme macht [2]. Offenporige Schäume ermöglichen eine Durchströmung, die zum Beispiel im Bereich der Wärmetauscher genutzt wird [3]. Neben thermischen Anwendungen zeigen Metallschäume dank ihrer hohen Steifigkeit im Vergleich zum geringen Gewicht vielversprechende Eigenschaften im Bereich des Leichtbaus [4]. Zudem macht sie ihre hohe Energieabsorptionsfähigkeit [5] für Crash-Anwendungen interessant [6]. Da ihre spezifischen Eigenschaften zum großen Teil in ihrer komplexen Morphologie und Dynamik begründet liegen, ist das Verständnis ihrer Mikrostruktur ein Schlüsselement für die Entwicklung maßgeschneiderter Materialien.

Verschiedene Anwendungen erfordern unterschiedliche Eigenschaftsprofile definiert durch eine optimale Kombination aus beispielsweise mechanischen, akustischen oder thermischen Eigenschaften. Die Konfiguration der Mikrostruktur der Schäume bestimmt diese spezifischen resultierenden Eigenschaften. Die gezielte Steuerung der Mikrostruktur erlaubt es somit, die optimale Eigenschaftszusammensetzung für eine bestimmte Anwendung einzustellen. Strukturcharakteristika wie das Porenvolumen und die -volumenverteilung, der Grad der Ordnung und die Konnektivität der Poren üben einen großen Einfluss auf die resultierenden Eigenschaften fester Schäume aus, beispielsweise deren effektive Steifigkeit [7].

Trotz ihres Potenzials als vielseitige Strukturbauten haben sich Metallschäume bisher nur wenig etabliert. Inhomogenitäten in der Porenstruktur, wie starke Schwankungen der Porengröße, der Porengometrie und der Stegbeschaffenheit, begrenzen den Einsatz. Etablierte Herstellungsverfahren für poröse Materialien

und Schäume stoßen schnell an ihre Grenzen dabei, bestimmte mikrostrukturelle Konfigurationen und die damit verbundenen erwünschten physikalischen Eigenschaften zu erreichen. Die Produktion von Materialien mit ungeeigneten Eigenschaften führt zu schadhaften und unbrauchbaren Bauteilen. Durch die gezielte Herstellung von Materialien mit geeigneten Eigenschaften kann eine solche unwirtschaftliche und ressourcenintensive Produktion vermieden werden.

Das Herstellungsverfahren der Schaumtemplatierung bietet einen neuartigen Ansatz für die Entwicklung von Materialien mit maßgeschneiderten Strukturen und vorhersagbaren Eigenschaften. Der Prozess ist schematisch dargestellt in Abbildung 1.1. Bei diesem dienen flüssige Schäume als eine Art Schablone für die Herstellung fester makroporöser Strukturen. Aus flüssigen Tensidschäumen entstehen feste Polymerschäume, deren Struktur wiederum die Struktur der Metallschäume bestimmt. Die Besonderheit des Verfahrens besteht darin, dass die resultierende Struktur und die daraus resultierenden Eigenschaften auf der Grundlage der Mikrostruktur genau zugeschnitten werden können. Der Zugang zur Struktur erfolgt dabei über flüssige Schäume, die als Vorformen eingesetzt werden. Das Templatierungsverfahren gewährleistet also eine optimale Passung auf spezifische technische Anforderungen, da über die Einstellung der Mikrostruktur die resultierenden effektiven Schaumeigenschaften wirksam auf die jeweilige Anwendung angepasst sind. Eine besondere Herausforderung besteht darin, dass verschiedene Parameter die effektiven Eigenschaften in unterschiedlicher Weise beeinflussen. Als Basis für die Einstellung ist es wichtig, den Einfluss der einzelnen verschiedenen Faktoren auf der Blasenskala zu identifizieren.

Computergestützte Methoden zur Generierung und Untersuchung von Schaumstrukturen eröffnen einen vielversprechenden Weg, die Schaumtemplatierung entlang der gesamten Prozessroute zu optimieren. Diese numerischen Methoden ermöglichen, den komplexen Zusammenhang des Zusammenspiels verschiedener struktureller Parameter wie der Porengröße, der Porengrößenverteilung und der Topologie mit dem resultierenden Materialverhalten aufzuschlüsseln. Systematische Studien zum Einfluss eines bestimmten geometrischen Parameters auf das resultierende Verhalten sind unerlässlich, um optimale Strukturen zu identifizieren

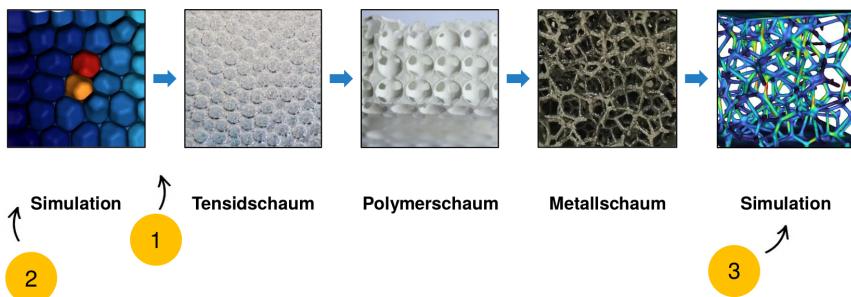


Abbildung 1.1: Optimierung des Herstellungsprozesses für feste Schaumstrukturen (Schaumtemplatierung) durch computergestützte Methoden. Markierungen zeigen die drei Ansatzpunkte dieser Arbeit.

und den Auslegungsraum zu erweitern. Anhand digitaler Zwillinge realer Strukturen lässt sich die Bildung der Schaummicrostruktur verfolgen und diese mit den resultierenden physikalischen Eigenschaften verknüpfen. Ein tiefgreifendes Verständnis der Zusammenhänge ermöglicht es, effektive Strategien für die Fertigung abzuleiten und Herstellungsprozesse gezielt zu steuern.

1.2 Forschungsmotivation und -beitrag

Bei der Herstellung poröser Materialien und Schäume ist es oftmals herausfordernd, Materialien mit gewünschten physikalischen Eigenschaften zu erzielen. Die Schaumtemplatierung ist ein neuartiges Verfahren, um ein Materialdesign mit maßgeschneiderten Mikrostrukturen und vorhersagbaren Eigenschaften zu gewährleisten. Dies impliziert den dringenden Bedarf, die Verknüpfung von Mikrostruktur und den resultierenden physikalischen Eigenschaften der Schäume zu verstehen. Computergestützte Methoden bieten hierfür eine vielversprechende Lösung, da sie Einblicke in die Mikrostrukturausbildung geben und diese mit den resultierenden physikalischen Eigenschaften verbinden. Indem diese Lücke geschlossen wird, soll der hier vorgestellte Ansatz zum Verständnis der Dynamiken der Entwicklung und der Eigenschaften flüssiger und fester Schäume beitragen.

Das Hauptziel dieser wissenschaftlichen Arbeit besteht darin, einen umfassenden Ansatz zur Optimierung von Schaumtemplatierungsprozessen zu entwickeln. Schlussendlich soll so die Qualität der hergestellten festen Schäume sichergestellt werden. Eine genaue Vorhersage der Morphologie verbessert industrielle Prozesse und hilft dabei, Materialien mit vordefinierten Eigenschaften zu erzielen [8]. In dieser Arbeit werden Vorhersagen der Mikrostrukturbildung flüssiger Schäume mit Berechnungen der mechanischen Eigenschaften fester Schäume zusammengeführt. Auf Basis des Konzepts digitaler Zwillinge zielt die Studie darauf ab, Korrelationen zwischen mikrostrukturellen Parametern und den resultierenden physikalischen Schaumeigenschaften zu etablieren. Ein computergestützter Ansatz auf Basis der Phasenfeldmethode und numerischer Simulationen soll einen multiskaligen Modellierungsrahmen schaffen. Am übergeordneten Hauptziel setzt diese Arbeit an zwei Punkten an – der dynamischen Entwicklung von flüssigen Schaumstrukturen und dem mechanischen Verhalten von festen Schäumen.

Flüssige Schäume, die im Templatierungsprozess als Vorformen für die festen Schäume dienen, sind metastabil. Ihr Zerfallsverhalten wird durch ein komplexes Zusammenspiel von Faktoren auf verschiedenen Längen- und Zeitskalen beeinflusst [9]. Die Verbindung zwischen mikroskaligen Prozessen und dem dynamischen Verhalten von makroskopischem Schaum ist allerdings noch nicht ausreichend verstanden. Das erste Teilziel besteht darin, durch detaillierte Untersuchungen ein Verständnis zu erarbeiten, inwiefern physikalische Einflussgrößen die Strukturbildung von Schaum bedingen. Im Rahmen dieser Dissertation soll ein Modell entwickelt und validiert werden, das den Alterungsprozess von Schaum genau abbildet. Detaillierte Parameterstudien auf Basis der Methode verknüpfen die zugrundeliegenden Mechanismen mit der Ausbildung der Mikrostruktur. Eine neue numerische Methode zur Simulation des Zerfalls von flüssigem Schaum wird entwickelt. Sie basiert auf einem Phasenfeldmodell und berücksichtigt den Gasdruck innerhalb der Blasen. Ein numerischer Löser wird eingeführt, der auf dem PACE3D-Framework basiert. Er beinhaltet Algorithmen, die zwei wichtige Mechanismen der Schaumalterung abbilden. Die physikalischen Modelle umfassen das spontane Reißen von Schaumfilmen und die darauffolgende Koaleszenz von Blasen sowie die Gasdiffusion (Ostwaldreifung). Das Modell wird genutzt, um

anhand numerischer Simulationen die zeitliche Entwicklung der Mikrostruktur in flüssigem Schaum im Grenzfall eines sehr trockenen Schaums (engl. *dry foam liquid*) unter verschiedenen dynamischen Bedingungen vorherzusagen. Numerischen Experimente zeigen, dass die Schaumalterungsdynamik für den Zerfallsprozess durch aufeinanderfolgende Koaleszenzereignisse abgebildet wird. Parameterstudien werden mit dem validierten Modell durchgeführt, um verschiedene Ausgangsmorphologien, einschließlich quasi-mono- und polydisperser Konfigurationen, zu untersuchen. Darüber hinaus eignet sich die Methode gut für großskalige Mikrostruktursimulationen. Diese ermöglichen die detaillierte Untersuchung der statistischen Eigenschaften von Schäumen auf Basis der Struktureigenschaften auf der Blasenskala, einschließlich Volumen, Gasdruck, Form und Konnektivität der Blasen. Die erarbeitete Methode ermöglicht es, effektiv Einblicke in die Auswirkungen grundlegender Faktoren auf die Entwicklung und Dynamik von zerfallenden flüssigen Schäumen zu erhalten. Die Simulationen demonstrieren die Eignung der Methodik, den Schaumzerfall umfassend zu analysieren und auf verschiedene Schaumgeometrien anzuwenden. Das erweiterte Verständnis der Mikrostruktur trägt letztlich zu einer verbesserten Kontrolle der Schaumherstellungsprozesse bei und ermöglicht die Herstellung von Schaumstrukturen mit vordefinierten Eigenschaften.

Feste Metallschäume sind eine vielseitige und zukunftsträchtige Werkstoffklasse im Leichtbau. Sie bieten eine vorteilhafte Kombination aus hoher Festigkeit bei gleichzeitig geringem Gewicht. Die mechanischen Eigenschaften von Metallschäumen werden neben dem verwendeten Metall durch die Geometrie der Schaumstruktur erheblich beeinflusst. Es gibt eine Vielzahl unterschiedlicher Schaumtopologien, von denen die resultierenden mechanischen Eigenschaften abhängen. Durch die Vielseitigkeit der Schaumgeometrien ergibt sich ein großer Parameterraum, der im Hinblick auf eine günstige Kombination von mechanischen Eigenschaften und geringer Massendichte optimiert werden kann. Als zweites Teilziel soll ein vollständig digitaler Workflow entwickelt werden, der die Erzeugung, Simulation und Analyse verschiedener fester Schaumstrukturen ermöglicht, wobei der Schwerpunkt auf deren effektiver Steifigkeit liegt. Um Metallschäume im Einsatzbereich von Materialien unter mechanischer Belastung zu optimieren,

wird in dieser Arbeit untersucht, wie verschiedene geometrische Parameter das Materialverhalten beeinflussen. Es wird ein Algorithmus zur digitalen Generierung und Auslegung von offenporigen Schaumstrukturen vorgestellt, der eine präzise Einstellung der Geometrie erlaubt und komplexe Topologien realisiert. Für numerische Simulationen im elastischen Bereich kommt ein Phasenfeld-Löser zum Einsatz, der es erlaubt, die mechanischen Eigenschaften der Schaumstrukturen im Bereich kleiner Verformungen zu simulieren und zu analysieren. Eine Methode zur Bestimmung der effektiven mechanischen Eigenschaften aus diesen Simulationsergebnissen von Druckversuchen im elastischen Bereich wird vorgestellt. Diese Homogenisierungsmethode geht von isotropen effektiven Eigenschaften aus und verwendet eine Kleinste-Quadrate-Anpassung für einzelne Belastungsszenarien. Durch eine Validierung wird sichergestellt, dass die Simulationsergebnisse zuverlässig sind und realistische Vorhersagen der mechanischen Eigenschaften ermöglichen. Zusätzlich wird die Repräsentativität der in den Simulationen berücksichtigten Schaumvolumina untersucht. Das entwickelte Framework wird anschließend angewendet, um umfangreiche Simulationsstudien an generierten Schaumstrukturen mit einer systematischen Variation der geometrischen Parameter durchzuführen. Diese Strukturen werden in Belastungszenarien untersucht, um den Einfluss der geometrischen Variationen auf die mechanischen Eigenschaften der Schäume und insbesondere ihre effektive Steifigkeit zu analysieren. Durch diese methodische Vorgehensweise lässt sich ein tiefgehendes Verständnis der Zusammenhänge zwischen Struktur und mechanischen Eigenschaften von Metallschäumen erreichen, was die Identifikation und Optimierung vielversprechender Schaumgeometrien ermöglicht.

Der entwickelte Multi-Skalen-Modellierungsrahmen unterstützt die Entwicklung von Materialien und Werkstoffen mit maßgeschneiderten Eigenschaften. Darüber hinaus bietet er ein grundlegendes Rahmenwerk, das zur Prozessoptimierung der Schaumtemplatierung eingesetzt werden kann. Die numerische Modellierung und Simulation von flüssigen und festen Schaumstrukturen, wie sie in dieser Dissertation behandelt wird, stellt einen wichtigen Beitrag zu diesem übergeordneten Ziel dar. Sie ermöglicht es, die komplexen Zusammenhänge zwischen Struktur und

Eigenschaften besser zu verstehen und auf dieser Grundlage gezielt zu beeinflussen. Damit trägt sie dazu bei, Werkstoffe zu schaffen, die optimal an spezifische Anforderungen angepasst sind.

1.3 Aufbau der Dissertation

Die vorliegende Dissertation gliedert sich in sechs Hauptkapitel, die eine systematische Untersuchung des Forschungsthemas ermöglichen und die Forschungsfragen schrittweise beantworten.

Das erste Kapitel führt in die Thematik flüssiger und fester Schäume ein und gibt einen Überblick über das Forschungsgebiet der Schaumstrukturen mit optimierten Eigenschaften. Ausgehend von einer Darstellung des Forschungskontextes folgt die Formulierung der zentralen Forschungsfragen. Anschließend werden die Zielsetzung der Arbeit sowie ihre wissenschaftliche und praktische Relevanz erläutert.

Im zweiten Kapitel wird der theoretische Rahmen der Untersuchung entwickelt. Hier werden die Grundlagen zur computergestützten Forschung an Schäumen behandelt. Dies umfasst eine Einführung in poröse Materialien, ihre Definition und Klassifikation, Anwendungsbereiche und Herstellungsverfahren. Weiterhin werden die Eigenschaften von Schäumen auf verschiedenen Längen- und Zeitskalen sowie Methoden zur Charakterisierung von Schäumen besprochen. Die Synopsis computergestützter Ansätze in der Materialforschung diskutiert die Rolle numerischer Methoden und stellt das Konzept digitaler Zwillinge vor.

Das dritte Kapitel widmet sich der Methodik. Es beschreibt detailliert die Modellierung von Flüssigschaumstrukturen mit der Phasenfeldmethode, einschließlich der thermodynamischen Beschreibung und Evolutionsgleichung. Die im Rahmen dieser wissenschaftlichen Arbeit entwickelten Algorithmen zur Beschreibung der Schaumalterung werden vorgestellt. Sie umfassen Routinen, die das Reißen von Schaumfilmen und die Gasdiffusion zwischen Schaumblasen abbilden. Zudem werden die algorithmische Generierung von offenporigen Schaumstrukturen

und die Methoden zur Ermittlung und Homogenisierung effektiver elastischer Eigenschaften fester Schäume dargestellt.

Im vierten Kapitel werden die Ergebnisse der Simulationen zur Alterung flüssiger Schäume präsentiert. Zunächst wird eine Validierung anhand der Stabilisierung einer einzelnen Gasblase im Gleichgewicht vorgestellt. Anschließend werden Zerfallsprozesse flüssiger Schäume simuliert, wodurch die Vorhersage der Mikrostruktorentwicklung durch Koaleszenz und Ostwald-Reifung ermöglicht wird. Die Ergebnisse der großskaligen Simulationen erlauben die statistische Charakterisierung von Mikrostrukturparametern sowie der Zerfallsdynamik. Im Einzelnen werden Blasenvolumen und -verteilungen, Gasdruck und Druckfelder, Blasenformen sowie die Verbindung und Abstände zwischen benachbarten Blasen analysiert.

Das fünfte Kapitel umfasst die Simulation der effektiven mechanischen Eigenschaften fester Schäume. Als Validierung wird das Eshelby-Problem vorgestellt. Hier wird die digitale Generierung präzise konfigurierter Schaumstrukturen behandelt. An diesen Strukturen werden numerische Simulationen von Druckversuchen im elastischen Bereich durchgeführt und durch eine Homogenisierungsmethode die effektive Steifigkeit abgeleitet. Anhand dieser berechneten Größen und Zusammenhänge können Implikationen für das Materialdesign maßgeschneiderter Schaumwerkstoffe abgeleitet werden.

Im abschließenden sechsten Kapitel werden die Haupterkenntnisse der Arbeit zusammengefasst und der Beitrag zur Verbesserung des Prozesses der Schaumtemplatierung herausgestellt. Es wird aufgezeigt, wie die Mikrostruktur flüssiger Schäume während der Schaumalterung beeinflusst wird und welchen Einfluss diese auf die mechanischen Eigenschaften hat. Die Arbeit verdeutlicht, wie durch gezielte Auslegung der Schaumstrukturen optimierte Materialeigenschaften erreicht werden können. Auf Basis einer kritischen Reflexion der Limitationen der Methodik, insbesondere der Annahmen und Vereinfachungen der Modellierung, werden Empfehlungen für zukünftige Forschungsvorhaben vorgestellt, um die entwickelten Modelle weiter zu verfeinern und weitere Anwendungsbereiche zu erschließen.

2 Grundlagen zur computergestützten Forschung an Schäumen

2.1 Einführung

Schäume sind komplexe, zweiphasige Materialsysteme, in denen Gaszellen in eine Matrix einer anderen Phase eingebettet sind [9]. In der physikalisch-chemischen Terminologie werden Schäume als disperse Systeme klassifiziert, wobei die Gasphase als disperse und die umgebende Phase als kontinuierliche Phase bezeichnet wird. Dabei ist ihre Form im Wesentlichen als zellulär kategorisiert, was bedeutet, dass die Gasblasen Zellen formen, die von der kontinuierlichen Phase umgeben sind [9]. Die Dimensionen der dispersen Phase liegen typischerweise im mesoskopischen Bereich, zwischen 10^{-6} und 10^{-3} m, was Schäume zu einem interessanten Untersuchungsgegenstand an der Schnittstelle zwischen Mikro- und Makrowelt macht. Die Klassifizierung von Schäumen basiert primär auf dem Aggregatzustand der kontinuierlichen Phase. Zusätzlich unterscheidet man zwischen offenzelligen und geschlossenzelligen – oder offenporigen und geschlossenporigen – Schäumen, was insbesondere für feste Schäume von Bedeutung ist. Diese Arbeit konzentriert sich auf zwei spezifische Schaumsysteme: Gas-Flüssig-Schäume und offenporige Gas-Metall-Schäume, die im Folgenden als flüssige bzw. feste Schäume bezeichnet werden.

Feste Schäume sind in ihren strukturellen Eigenschaften den flüssigen Schäumen sehr ähnlich. Häufig handelt es sich um verfestigte flüssige Schäume, sodass sie eine entsprechende Struktur aufweisen.

Herstellungsverfahren für poröse Materialien

Die Herstellung offenporiger Metallschäume umfasst diverse Verfahren, die sich hinsichtlich ihrer Präzision, Kosteneffizienz und Skalierbarkeit unterscheiden. Unterschiedliche Anwendungen erfordern spezifische effektive Eigenschaften, wobei die Mikrostruktur die spezifischen Eigenschaften für jede Anwendung bestimmt. Diese Arbeit fokussiert sich auf offenporige Metallstrukturen, für deren Herstellung mehrere Herstellungsmethoden etabliert sind. Zu den gängigen Verfahren zählen die elektrochemische Abscheidung, additive Fertigungsmethoden und Infiltrationsprozesse. Die Erzeugung eines Schaums aus der Schmelze basiert auf chemischen oder physikalischen Schäumungsprozessen [10]. Im Verfahren des Schäumens mit Treibmitteln wird die Metallschmelze durch die Zugabe von Partikeln oder in-situ erzeugten Partikeln stabilisiert, was zur Porenbildung führt. Bei der Gasinjektion wird Gas direkt in die Schmelze eingebracht, wodurch der Schaum entsteht. Beide Verfahren erzeugen Metallschäume mit kaum kontrollierbaren Porengrößen und -verteilungen, und damit variablen Eigenschaften. Ein Prozess, der elektrochemische Abscheidung beinhaltet, beschichtet Polymerschäume zunächst mit einem leitfähigen Material, um darauf folgend mittels elektrochemischer Abscheidung eine Beschichtung aufzubringen. Das Verfahren ermöglicht die Produktion hochporöser Strukturen mit Porositäten bis zu 97 %, ist jedoch mit Gradienten in der Beschichtungsdicke verbunden [11]. Additive Fertigungsverfahren wie Selektives Laserschmelzen (SLM) oder Elektronenstrahlschmelzen (EBM) bieten präzise Kontrolle über die Schaumstruktur. Diese Verfahren sind jedoch kostenintensiv und für die Massenproduktion ungeeignet [12, 13]. Alternative Methoden stellen Gießverfahren mit Platzhaltern dar. Bei diesem Infiltrationsverfahren wird flüssiges Metall in ein Bad aus Platzhalterpartikeln gegossen. Nach der Erstarrung werden die Partikel aufgelöst, wodurch gasgefüllte Poren entstehen. Diese Technik ermöglicht die Herstellung offenporiger Schäume mit einer Dichte von weniger als 60 % bis 70 % [14].

Verfahren der Schaum-Templatierung

Das Templatverfahren befasst sich mit dem Übergang von flüssigen zu festen Schäumen und trägt dazu bei, die Beziehungen zwischen Struktur und Eigenschaften fester Schäume besser zu verstehen. Dieses Verfahren weist Parallelen zum bereits etablierteren Emulsionstemplating auf, mit dem PolyHIPEs (engl. *polymerized High Internal Phase Emulsion*) hergestellt werden [15–17]. Während Forschungstätigkeiten zu PolyHIPEs in den letzten zehn Jahren verbreitet zu beobachten waren und zahlreiche Übersichtsartikel dies belegen [18, 19], befindet sich das Feld der flüssigen Schaumtemplatierung noch in seinen Anfängen. Dies erklärt die vergleichsweise geringe Anzahl veröffentlichter Studien in diesem Bereich. Eine Übersicht bieten Andrieux et al. [20]. Die Optimierung von Schaumstrukturen für spezifische Anwendungen basiert auf der präzisen Anpassung der Mikrostruktur. Das Templatverfahren bietet hierbei einen besonders vielversprechenden Ansatz, bei dem flüssige Schäume als Vorläufer für feste makroporöse Strukturen dienen [8]. Dies ermöglicht eine gezielte Steuerung der resultierenden Eigenschaften und deren Abstimmung auf spezifische Anforderungen. Der zweistufige Prozess ermöglicht zunächst die Herstellung maßgeschneiderter Polymerschäume mit präziser Kontrolle über Porengröße (100 nm bis 2 mm), Porosität (20 % bis 97 %), Porenverteilung und -anordnung. In einem zweiten Schritt können diese optimierten Polymerschäume als Templat für die Herstellung von Metallschäumen mittels Feinguss-Prozess dienen. Dieses wird mit hitzeresistentem Material eingeschmolzen. Nach der thermischen Entfernung des Polymers wird die Metallschmelze in die Hohlräume gegossen. Trotz einiger Herausforderungen, wie möglicher unvollständiger Formfüllung bei Hochdruckanwendungen oder dem Risiko der Beschädigung feiner Strukturen bei der Trennung von Form und Schaum, ermöglicht das Verfahren die Herstellung hochporöser, qualitativ hochwertiger Schäume [21].

Die resultierenden physikalischen Eigenschaften der Schaumstruktur werden durch verschiedene Parameter beeinflusst, darunter Material, Porenverbindung, Porosität, Porengröße und -verteilung sowie deren Organisation und Gradienten. Besonders strukturelle Merkmale wie Blasenvolumen, -verteilung, Ordnungsgrad

und Konnektivität haben einen starken Einfluss auf die resultierenden Eigenschaften [22]. Die Anpassung der flüssigen Vorläufer-Struktur ermöglicht dabei den gezielten Zugang zu den gewünschten Eigenschaften. Trotz potenzieller Herausforderungen bei der vollständigen Formfüllung und der Trennung von Form und Schaum bietet dieses Verfahren einen guten Kompromiss zwischen Präzision und Skalierbarkeit.

Man unterscheidet drei Arten flüssiger Schaumtemplate: monomer-, polymer- und dispersionsbasierte Systeme. In monomerbasierten Systemen wird der feste Schaum durch Polymerisation der Monomere in der kontinuierlichen Phase des flüssigen Schaums erzeugt. Polymerbasierte Systeme verfestigen sich durch Vernetzung einer Polymerschmelze oder eines gelösten Polymers [23–25]. Dispersionsbasierte Systeme nutzen Suspensionen oder Emulsionen als kontinuierliche Phase [26].

Idealerweise entspricht die Porengrößenverteilung des festen Schaums der Blasengrößenverteilung des flüssigen Templates. In der Praxis weichen diese jedoch oft voneinander ab, da die Schäume schwer zu stabilisieren sind. Eine Herausforderung besteht darin, diese Abweichung zu quantifizieren und die Struktur des flüssigen Templates entsprechend anzupassen. Die Stabilisierung von flüssigen Schäumen kann beispielsweise durch eine Unterdrückung von Vergrößerung angepasst werden [27]. Auch ist die Wahl der Schäumungsmethode entscheidend für die Blasengrößenverteilung [28]. Die meisten gängigen Schäumungstechniken für die Polymer-Schaumtemplatierung bieten wenig oder gar keine Kontrolle über die Blasengrößenverteilung, was zu polydispersen Schäumen führt. Die Mikrofluidik bietet die beste Kontrolle und wurde für komplexe Flüssigkeiten adaptiert [24, 25, 29]. Dabei wächst Interesse an monodispersen Polymerschäumen, um die Morphologie fester Schäume besser zu kontrollieren und deren physikalische Eigenschaften gezielt einstellen zu können.

Die Struktur von Schäumen ist durch die Porenverbindung und Porosität charakterisiert. Mit dem Templatverfahren können prinzipiell sowohl geschlossen- als auch offenporige Strukturen erzielt werden. Die Porenverbindung in Polymerschäumen entsteht durch das Platzen der Filme zwischen benachbarten Blasen. Polymerbasierte Schaumtemplate bilden häufig offenzellige Strukturen, da das dispergierte Polymer nahezu ausnahmslos in den Plateau-Kanten vorliegt, und nicht

in den Filmen. Bisher fehlt jedoch ein kohärentes Bild des Reißens von Filmen in flüssigen Schäumen [30]. Systematische Studien an flüssigen Schaumtemplaten sind bisher selten. Van der Net et al. [31] zeigten, dass eine beschleunigte Polymerisation geschlossene Zellen erzeugen kann, was auf eine Konkurrenz der Prozesse von Filmreißen und Polymerisation hindeutet. Weitere Forschungsarbeiten [32, 33] untersuchten die Zellöffnung in Polyurethanschäumen und betonten die Bedeutung viskoelastischer Eigenschaften der Polymer-Gas-Grenzflächen. Vollständig geschlossene Zellstrukturen sind selten und meist auf partikelstabilisierte Vorläufer-Schäume beschränkt [34].

Die Porosität von verfestigten Polymerschäumen entspricht dem Gasanteil des flüssigen Schaums und liegt typischerweise zwischen 50 % bis 90 %. Die Kontrolle des Flüssigkeitsanteils ist entscheidend für die Anpassung der Porosität. Obwohl Methoden bestehen, die eine präzise Steuerung der Flüssigkeits- und Gasströme ermöglichen, kann Drainage zu einem Gradienten des Flüssigkeitsanteils führen. Damit können homogene Strukturen kaum erzielt werden, und dies führt zu Strukturunterschieden zwischen Boden und Oberseite in monodispersen Hydrogel-Schäumen. Bei geringen Flüssigkeitsanteilen entstehen ungeordnete, aber monodisperse Schäume. Diese Erkenntnisse unterstreichen die Bedeutung der Abstimmung charakteristischer Zeiten von Schaumalterung und -verfestigung im Schaumtemplatierungs-Prozess [30].

Die vorliegende Arbeit zielt darauf ab, mittels Simulationen die optimale Struktur für eine uniaxiale Druckbelastung zu identifizieren, um die Effizienz dieses zweistufigen Herstellungsprozesses weiter zu steigern. Dabei ist zu beachten, dass verschiedene Parameter die effektiven Eigenschaften auf unterschiedliche Weise beeinflussen. Systematische Studien sind daher unerlässlich, um den komplexen Zusammenhang zwischen Struktur und Eigenschaften zu verstehen und den Einfluss einzelner Merkmale auf der Blasenskala zu identifizieren. Diese Erkenntnisse bilden die Grundlage für die gezielte Optimierung der Schaumstrukturen und ihrer resultierenden Eigenschaften.

2.2 Eigenschaften von Schäumen auf verschiedenen Längen- und Zeitskalen

2.2.1 Mikrostrukturelle Eigenschaften von Schäumen

Ein umfassendes Verständnis von Schäumen erfordert eine differenzierte Beschreibung über mehrere Längenskalen, die von der molekularen Ebene bis zur makroskopischen Struktur reicht. Diese multiskalige Betrachtung ermöglicht ein tiefgreifendes Verständnis der komplexen Wechselwirkungen und physikalischen Phänomene in Schaumsystemen.

Flüssige Schäume weisen charakteristische Strukturen auf molekularer, mikroskopischer und makroskopischer Ebene auf. Abbildung 2.1 illustriert diese Strukturen auf verschiedenen Längenskalen. Schäume stellen komplexe Systeme dar, deren Eigenschaften maßgeblich durch den Flüssigkeitsgehalt bestimmt werden [35]. Eine Klassifizierung in nasse und trockene Schäume erfolgt anhand des Flüssigkeitsanteils, wobei sich signifikante Unterschiede in Struktur und physikalischen Eigenschaften zeigen. Der Flüssigkeitsgehalt eines Schaums wird quantitativ durch den flüssigen Volumenanteil χ_l charakterisiert, der als das Verhältnis des Flüssigkeitsvolumens V_l zum Gesamtvolumen des Schaums V_{foam} definiert ist,

$$\chi_l = V_l / V_{\text{foam}}. \quad (2.1)$$

Diese Größe steht in direktem Zusammenhang mit der Dichte ρ des Schaums, welche durch die Beziehung

$$\rho = \rho_l \chi_l + \rho_g (1 - \chi_l) \simeq \rho_l \chi_l \quad (2.2)$$

beschrieben wird. Hierbei repräsentieren ρ_l und ρ_g die Dichten der Matrixphase beziehungsweise des Gases. Aufgrund der deutlich geringeren Gasdichte im Vergleich zur Flüssigkeitsdichte kann der zweite Term in der Regel vernachlässigt werden.

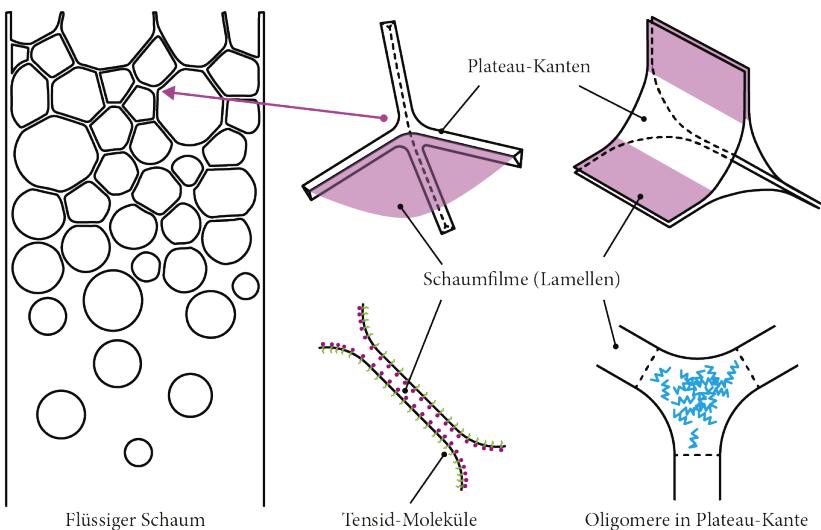


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung eines flüssigen Schaumes mit den Charakteristika von der Mikro- zur Makroskala.

Abhängig vom Flüssigkeitsanteil weist die Struktur des Schaums verschiedene charakteristische Merkmale auf. Die Darstellung in Abbildung 2.1 links verdeutlicht das Spektrum der Schaumstrukturen und hebt die wichtigsten strukturellen Unterschiede hervor. Im Grenzfall eines sehr hohen Flüssigkeitsanteils, bei dem es zum Kohäsionsverlust der Blasen kommt, geht der Schaum in eine blasenhaltige Flüssigkeit (engl. *bubbly liquid*) über. In diesem Zustand weisen die Blasen eine annähernd sphärische Morphologie auf. Nasse Schäume zeichnen sich durch einen hohen Flüssigkeitsanteil aus, der deutlich über 1 % liegt. Hier weicht die Form der Blasen von Kugeln ab, und an jedem Kontakt der Blasen untereinander zeigen sich Abflachungen. Die Flüssigkeit akkumuliert sich primär in den Plateau-Kanten (engl. *Plateau borders*), die als Kanäle finiter Breite fungieren. Bei weiterer Reduktion des Flüssigkeitsgehalts unterliegen die Schaumstrukturen charakteristischen geometrischen Transformationen [9]. Die Plateau-Kanten sind kleiner und die Form der Blasen nähert sich bei zunächst abgerundeten Kanten und

Vertices der Form von Polyedern. Diese Veränderungen markieren den Übergang zu trockeneren Schaumstrukturen. Im Grenzfall eines sehr trockenen Schaums (engl. *dry foam limit*) mit Flüssigkeitsanteilen von $\chi_1 \leq 0,05$ nehmen die Blasen aufgrund der Wechselwirkungen mit ihren Nachbarn polyedrische Form an, mit dünnen Flüssigkeitsfilmen (Lamellen) zwischen den Blasen. Dabei haben die Plateau-Kanten einen vernachlässigbaren Querschnitt.

Die Oberflächen dieser Polyeder bestehen aus dünnen Flüssigkeitsfilmen, auch Lamellen genannt, die aufgrund von Druckunterschieden zwischen benachbarten Blasen gekrümmmt sind. An den Kanten des Polyeders treffen jeweils drei dieser Filme aufeinander und bilden flüssigkeitsgefüllte Kanäle, die als Plateau-Kanten bezeichnet werden – benannt nach Joseph Plateau. Da die Krümmung der Flüssig-Gas-Grenzfläche endlich sein muss (Young-Laplace-Gleichung), weisen diese Plateau-Kanten eine von Null verschiedene Dicke auf. Der Querschnitt jeder Kante hat dabei eine charakteristische Form, ein Dreieck mit konkav gekrümmten Seiten. An den Ecken des Polyeders treffen jeweils vier Plateau-Kanten aufeinander und bilden Knoten zwischen den polyedrischen Blasen. Bei Tensid-Oligomer-Schäumen, die im Templatierungsprozess Verwendung finden, sind in der Flüssigkeit Moleküle enthalten, die verfestigt werden. Diese Oligomere finden sich in den Plateau-Kanten und Knoten.

Schaumfilme streben prinzipiell eine Minimalfläche (engl. *minimal surface*) an, da sie unter den gegebenen Randbedingungen, die durch die benachbarten Blasen des Schaums vorgegeben sind, die kleinstmögliche Oberfläche einnehmen. Charakteristisch für eine Minimalfläche ist, dass ihre mittlere Krümmung überall Null ist. Durch die Minimierung der Oberflächenenergie nehmen die Lamellen die Form eines dünnen Films mit nahezu konstanter Dicke an.

Im Allgemeinen sind Schaumfilme nur einige Nanometer dick und inhärent instabil. Ein Film, der ausschließlich aus reinem Wasser besteht, würde unter dem Einfluss von van der Waals Kräften spontan kollabieren [36], da der Abstand zwischen den beiden Gas-Wasser-Grenzflächen verschwindet, was zum Platzen des Films führt.

Zur Stabilisierung von Schäumen kommen häufig Tenside zum Einsatz. Diese oberflächenaktiven Moleküle reduzieren die Oberflächenenergie und stabilisieren die Filme gegen Zerreißen. In wässrigen Schäumen sind die Tenside amphiphil, das heißt, sie besitzen sowohl eine hydrophile als auch eine hydrophobe Seite. In wässriger Lösung adsorbieren sie bevorzugt an der Grenzfläche zwischen Flüssigkeit und Gas und bilden dort eine Monoschicht [37]. Durch die Bedeckung beider Oberflächen mit diesen geladenen Monoschichten entsteht eine elektrostatische Abstoßung, die der van der Waals Anziehung entgegenwirkt. Dadurch stabilisieren sich die Schaumfilme bei einer Dicke, bei der sich diese Kräfte im Gleichgewicht befinden. Diese Abstoßung zwischen den Grenzflächen wird als Trennungsdruck (engl. *disjoining pressure*) bezeichnet [35].

Feste Schäume lassen sich hinsichtlich ihrer Struktur analog zu flüssigen Schäumen beschreiben. Die hierarchisch strukturierte Morphologie lässt sich auf drei Ebenen charakterisieren: der Mikro-, Meso- und Makroebene. Auf der Mikroebene stellen die Stege (engl. *struts*) die fundamentalen Strukturelemente dar. Hinsichtlich der Gesamtstruktur eines Schaums entsprechen diese den Plateau-Kanten flüssiger Schäume. Die Stege können unterschiedliche Querschnittsformen aufweisen, wie dreieckig, kreisförmig oder konkav. Ihre Dicke und Länge variieren je nach Schaumtyp und Herstellungsprozess. Das Profil ist oft ungleichmäßig, mit einer Aufdickung an den Knotenpunkten und einer Verjüngung der Stege zur Mitte hin. Die Oberflächen der Stege und Zellwände können glatt oder rau sein, abhängig vom Material und Herstellungsprozess. In manchen Fällen weisen die Stege und Zellwände selbst eine feinere Porosität auf. Auf mikroskopischer Ebene sind oftmals Risse, Fehlstellen oder Einschlüsse in den Stegen und Knotenpunkten vorhanden. Die Mesoebene umfasst die Betrachtung einzelner Poren, deren Dimensionen sich typischerweise im Millimeterbereich bewegen. Diese gasgefüllten Zellen werden von einem Netzwerk aus Stegen und Wänden umschlossen. Hierbei unterscheidet man zwischen offenen und geschlossenen Poren: Während geschlossene Poren vollständig von Stegen und Wänden umhüllt sind, weisen Schäume mit offenen Poren lediglich Stege auf, was eine Durchströmung ermöglicht. Auf der Makroebene erfolgt die Betrachtung eines Porenensembles bis hin zur gesamten Probendimension, wobei der Schaum als Kontinuum approximiert

wird. Die geometrische Konfiguration wird maßgeblich durch die Morphologie und Anordnung der Poren bestimmt.

Zur Quantifizierung fester Schäume liegt der Fokus häufig auf dem relativen Volumen der dispersen Phase – des Gases – und daher wird der Gasanteil genutzt, um die Porosität auszudrücken. Diese steht in komplementärer Beziehung zum Anteil der Matrixphase $c_s = V_f/V_d$, vgl. Gleichung (2.1). In der vorliegenden Arbeit wird primär die Porosität

$$\theta = (V_d - V_f) / V_d = 1 - c_s \quad (2.3)$$

als charakteristische Größe herangezogen, die der Übersichtlichkeit halber oft als Prozentwert angegeben wird.

2.2.1.1 Schäume im Gleichgewicht

Die Struktur eines Schaums im Gleichgewicht wird durch die Minimierung der Grenzflächenenergie bestimmt, welche auf lokaler Ebene durch einfache geometrische Gesetze charakterisiert wird. Diese Gesetze, die sowohl für einzelne Filme als auch für Anordnungen mehrerer Blasen gelten, werden in diesem Abschnitt beschrieben.

Die physikalischen Eigenschaften von Schäumen werden maßgeblich durch zwei fundamentale Konzepte bestimmt: die Oberflächenspannung und den Laplace-Druck. Diese Phänomene sind entscheidend für das Verständnis der Struktur, Stabilität und Dynamik von Schäumen.

Die Oberflächenspannung resultiert aus den Kohäsionskräften zwischen den Molekülen einer Flüssigkeit und ist definiert als die Energie, die benötigt wird, um die Oberfläche einer Flüssigkeit zu vergrößern [36]. Mathematisch lässt sich die

Oberflächenspannung γ als Kraft pro Längeneinheit oder als Energie pro Flächeneinheit ausdrücken. Eine Zunahme der Grenzflächenfläche um dS bewirkt eine Änderung der Energie dE_{of} um

$$dE_{\text{of}} = \gamma dS. \quad (2.4)$$

Die Oberflächenenergie ist für jede Grenzfläche zweier Phasen definiert, und direkt proportional zu dieser. Betrachtet werden kann sie nur auf einer Skala, die im Vergleich zur Größe der Moleküle groß ist, d.h. auf makroskopischer Ebene, auf der die Grenzfläche als kontinuierlich angesehen werden kann. Diese Annahme liegt dieser Arbeit durchgängig zugrunde. Daher hängt die Energie ausschließlich von der Größe der Grenzfläche ab und nicht von ihrer Form, und entspricht der Energie einer ebenen Oberfläche gleicher Ausdehnung [35].

Wenn eine Grenzfläche gekrümmmt ist, induziert die Oberflächenspannung Normalkräfte, die im Gleichgewicht durch den Druck auf beiden Seiten kompensiert werden. Die Beziehung zwischen Druck und Oberflächenspannung wird von Form der Grenzfläche bestimmt. Die mittlere Krümmung einer beliebig gekrümmten Fläche ergibt sich aus den zwei Hauptkrümmungsradien r_1 und r_2 . Handelt es sich um eine Kugel, so vereinfacht sich die mittlere Krümmung zu $2/r = 1/r_1 + 1/r_2$. Eine Gas-Flüssigkeit-Grenzfläche verhält sich normalerweise entsprechend des Young-Laplace-Gesetzes [9]. Dieses drückt den Druckunterschied über die Grenzfläche aus. Der Laplace-Druck P einer einzelnen Blase in einer Flüssigkeit [35] beträgt

$$P = \frac{2\gamma}{r_{\text{eq}}}, \quad (2.5)$$

mit der Oberflächenspannung γ und dem Radius der Blase r_{eq} . Für eine einzelne Seifenblase in der Luft, oder einen einzelnen Film in einem Schaum, muss eine Anpassung auf $P = 4\gamma/r_{\text{eq}}$ erfolgen, da zwei Grenzflächen zu berücksichtigen sind. Abbildung 2.2 illustriert dies.

Die drei Plateau-Gesetze [38], formuliert von Joseph Plateau, beschreiben die grundlegenden geometrischen Eigenschaften von Schäumen und Schaumfilmen

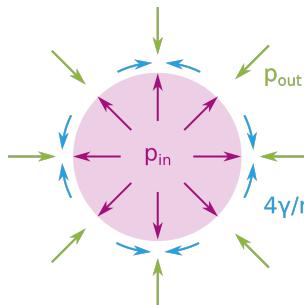


Abbildung 2.2: Stabilisierung einer Gasblase. Dargestellt sind die krümmungsgetriebene Oberflächenminimierung und die Gegenkraft durch Gasdruck innerhalb der Blase.

im Gleichgewichtszustand. Die Beschreibungen basieren auf einigen Näherungen. Sie gelten für einen idealen Schaum, der sehr trocken ist und der sich im mechanischen Gleichgewicht befindet und daher statisch ist. Außerdem wird seine Energie als proportional zur Oberfläche der Blasen definiert und der Schaum als inkompressibel angenommen. Diese Gesetze, die aus der Minimierung der Oberflächenenergie resultieren, umfassen drei Hauptprinzipien: Erstens treffen Schaumfilme stets in Gruppen von drei an einer Kante aufeinander, wobei sie Winkel von jeweils 120° bilden. Zweitens treffen sich diese Kanten in Gruppen von vier an einem Punkt, dem sogenannten Plateau-Knoten, und bilden dabei den Tetraederwinkel von etwa $109,475^\circ$. Drittens ist die mittlere Krümmung eines Schaumfilms konstant über seine gesamte Oberfläche.

2.2.1.2 Dispersität und Unordnung

Dispersität und Unordnung sind wichtige strukturelle Eigenschaften von flüssigen und festen Schäumen und sie dienen als Maß, um ihre Struktur zu charakterisieren. Der Ordnungsgrad der Mikrostruktur beeinflusst maßgeblich die resultierenden Eigenschaften. Dispersität bezieht sich auf die Verteilung der Blasengrößen innerhalb des Schaums und kann von monodispers (einheitliche Größe) bis polydispers (breite Größenverteilung) variieren. Unordnung zeigt sich in der räumlichen Anordnung der Blasen und der Geometrie der Blasen bzw. der Poren. So können

monodisperse Schäume sowohl geordnet als auch ungeordnet sein. In flüssigen Schäumen führen Alterungsprozesse wie Ostwald-Reifung und Koaleszenz zu einer zunehmenden Polydispersität und erhöhen die Unordnung über die Zeit. Bei festen Schäumen beeinflusst die Dispersität signifikant die resultierenden Eigenschaften des Schaums, einschließlich seiner effektiven Steifigkeit.

2.2.2 Metastabilität und Alterung flüssiger Schäume

2.2.2.1 Mechanismen der Schaumalterung

Feste Schäume entstehen in vielen Herstellungsprozessen durch die Verfestigung flüssiger Schäume. Die Vorhersage und Kontrolle der Morphologie der flüssigen Schäume sind wichtig, da die resultierenden Eigenschaften der festen Schäume maßgeblich durch die Struktur beeinflusst werden. Eine verbesserte Vorhersage der Schaummorphologie optimiert nicht nur die Herstellungsprozesse, sondern ermöglicht es, Materialien mit vordefinierten Eigenschaften zu erzielen [8]. Die Herausforderung bei der Vorhersage der Morphologie liegt in der inhärenten Instabilität flüssiger Schäume. Sie sind thermodynamisch instabil und entwickeln sich zu einem Zustand minimaler Grenzflächenenergie hin, was letztlich zur Bildung einer homogenen Flüssigkeitsphase führt. Diese metastabilen Systeme unterliegen einem komplexen Zerfallsprozess, der durch das Zusammenspiel verschiedener Mechanismen auf unterschiedlichen Längen- und Zeitskalen gekennzeichnet ist [9]. Es tragen hauptsächlich drei Prozesse zur Alterung und letztlich dem Zerfall bei. Dies sind die gravitationsgetriebene Drainage, das Reißen von Schaumfilmen mit der Koaleszenz von Gasblasen und Gasdiffusion zwischen Blasen (Ostwald-Reifung). Abbildung 2.3 skizziert die drei Prozesse. Jeder dieser Mechanismen trägt auf unterschiedliche Weise zur Veränderung der Schaumstruktur bei und beeinflusst deren Stabilität. Um das Verhalten von Schäumen besser zu verstehen und zu kontrollieren, ist es wichtig, diese Prozesse im Detail zu betrachten.

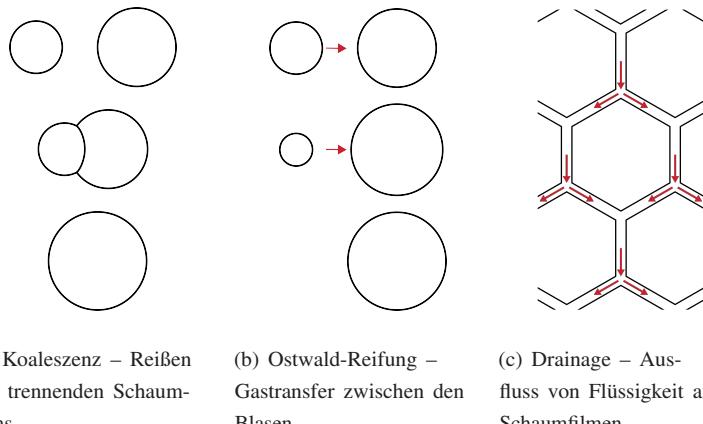


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der grundlegenden Prozesse der Schaumentwicklung auf der Blasenskala. Die Alterungsmechanismen umfassen (a) die Koaleszenz, (b) die Ostwald-Reifung, und (c) die Drainage.

2.2.2.2 Drainage

Die gravitationsgetriebene Drainage ist einer der drei Hauptmechanismen, der die Stabilität von flüssigen Schäumen begrenzt und deren Alterung bedingt. Sie entsteht durch den Dichteunterschied zwischen der flüssigen und der gasförmigen Phase des Schaums, wodurch die Flüssigkeit nach unten abfließt. Dies führt zu einer Verteilung, bei der der obere Teil des Schaums trockener wird, während sich am Boden ein nasserer Bereich bildet. Gleichzeitig bewirkt die Schwerkraft eine Umordnung der Struktur. Größere Blasen steigen auf, während kleinere am Boden verbleiben, was zu einem Gradienten in den Blasengrößen führt. Dieser Effekt wird jedoch teilweise durch die Fließgrenze des Schaums eingeschränkt. In trockenen Schäumen erfolgt die Drainage hauptsächlich durch das Netzwerk der Plateau-Kanten und Knoten [39]. Dem schwerkraftbedingten Flüssigkeitsfluss wirken verschiedene Kräfte entgegen, wie der osmotische Druck, der die Flüssigkeitsentfernung hemmt, sowie Kapillareffekte, die Flüssigkeit von nassen zu trockenen Regionen transportieren. Dies erklärt, weshalb Drainage nicht zur vollständigen Entleerung des Schaums führt. Ein Schaum auf einem Flüssigkeitsbad erreicht

einen Gleichgewichtszustand, in dem die Drainage zum Stillstand kommt [40]. Zusätzlich wird der Fluss durch viskose Prozesse in den Kanälen und Knoten gehemmt, die von der Grenzflächenrheologie der Flüssigphase abhängen. Die Fließgeschwindigkeit wird dabei vor allem durch Änderungen der Blasengröße oder des Flüssigkeitsanteils beeinflusst. Da die Drainage die Flüssigkeitsverteilung im Schaum rasch verändert, stellt sie eine erhebliche Einschränkung für Anwendungen und experimentelle Untersuchungen dar. Eine ungleichmäßige Flüssigkeitsverteilung führt zu Heterogenität in den Eigenschaften und der Stabilität gegenüber anderen destabilisierenden Mechanismen wie Koaleszenz und Ostwald-Reifung.

2.2.2.3 Koaleszenz

Die Koaleszenz von Blasen ist einer der Alterungsmechanismen flüssiger Schäume. Sie ist dadurch bedingt, dass der dünne Flüssigkeitsfilm zwischen zwei benachbarten Blasen reißt, wodurch sich diese zu einer größeren Blase vereinigen. Dieser Vorgang führt zu einer rapiden Reduzierung der Gesamtblasenanzahl im Schaum und kann, bei Kontakt mit der Umgebung, sogar zum vollständigen Verschwinden des Schaums führen. Für die Beschreibung auslösender Faktoren bestehen verschiedene Hypothesen. Koaleszenz kann sowohl durch mechanische Beanspruchung als auch durch thermodynamische Fluktuationen ausgelöst werden, was sie zu einem stochastischen Prozess macht. Intuitiv erscheinen größere Blasen instabiler, was eine einfache Proportionalität der Filmrisswahrscheinlichkeit zur Oberfläche nahelegt. Experimente an drainierenden wässrigen Schäumen zeigten einen starken Anstieg der Koaleszenzrate unterhalb eines kritischen Flüssigkeitsanteils. Dieser hängt vom Tensidtyp und dessen Konzentration ab, nicht jedoch von der Blasengröße. Die Initiierung solcher sog. Lawinen könnte auf die Dehnung von Filmen während Blasenumordnungen zurückzuführen sein. Einige Studien schließen die Existenz eines kritischen Kapillardrucks vor, bei dem Filmrisse induziert werden [41]. Weitere Experimente an Blasenmonoschichten, bei denen Kapillardruck und Blasengröße unabhängig variiert werden konnten, zeigten jedoch, dass die Wahrscheinlichkeit von Koaleszenzeignissen proportional zur Filmfläche

ist [42]. Dies deutet darauf hin, dass die Blasengröße und nicht der Kapillardruck der kontrollierende Parameter für die Koaleszenz ist [43]. Ein umfassendes Verständnis der auslösenden Mechanismen ist von entscheidender Bedeutung, da der Prozess schnell zur Destabilisierung und Zerstörung des Schaums führen kann. Trotz verschiedener Hypothesen bleibt der Prozess aufgrund seiner extremen Geschwindigkeit und der Kopplung mit anderen Mechanismen wie gravitativer Drainage, diffusivem Blasenwachstum oder Verdunstung experimentell schwer zu untersuchen.

2.2.2.4 Ostwald-Reifung

Der Vergröberungsprozess in Schäumen beschreibt den diffusiven Gastransfer zwischen Blasen. Da jedes Gas teilweise in jeder Flüssigkeit löslich ist, wirkt die flüssige Phase des Schaums nicht als vollständige Barriere für das Gas innerhalb der Blasen. In der Literatur werden verschiedene Begriffe für diesen Prozess verwendet. Häufig findet sich der Begriff „Vergröberung“ für polyedrische Schäume, während „Ostwald-Reifung“ für sphärische Blasen in einer Flüssigkeit bevorzugt wird. In dieser Arbeit werden die Begriffe äquivalent zur Beschreibung genutzt. Der Laplace-Druckunterschied zwischen Blasen unterschiedlicher Größe lässt das Gas von kleineren zu größeren Blasen diffundieren. Kleine Blasen verlieren ihr Gas an die Nachbarn, schrumpfen und verschwinden schließlich, was zu einer Abnahme der Gesamtblasenanzahl über die Zeit und zu einer Zunahme der mittleren Größe der verbleibenden Blasen führt. In trockenen Schäumen resultiert die Vergröberung aus dem Gasaustausch zwischen den beiden Seiten eines Schaumfilms. Das Gas diffundiert von der konkaven zur konvexen Seite des Films. Um zu bestimmen, ob eine polyedrische Blase Gas gewinnt oder verliert, müssen die Gastransfers über alle Filme aufsummiert werden. Der Gastransfer wird durch die Druckdifferenz $P_1 - P_2$ zweier benachbarter Blasen bestimmt, die aus dem Laplace-Druck folgt. Der Effekt könnte in seinem Ergebnis somit dem der Koaleszenz ähneln, obwohl der zugrundeliegende physikalische Prozess ein anderer ist. Da das Gas durch die flüssige Phase des Schaums diffundieren muss, wird die Vergröberungsrate stark von der physikalischen Chemie der Schaumkomponenten

beeinflusst [44], aber eine entscheidende Rolle spielt in erster Linie der Flüssigkeitsanteil des Schaums. Tatsächlich dominiert die Diffusion der Transfer durch die dünnen Filme, die benachbarte Blasen trennen, während die Plateau-Kanten einen vernachlässigbaren Beitrag leisten. Die Blasentopologie nimmt also eine fundamentale Rolle dabei ein, welche Blasen wachsen oder schrumpfen. Die größere Fläche von Filmen in trockenen Schäumen macht die Vergrößerung schneller als in nassen Schäumen oder blasenhaltigen Flüssigkeiten, wo die Gasdiffusion zwischen nicht berührenden Blasen durch die Bulk-Flüssigphase vermittelt wird, die als Gasreservoir fungiert [45]. Obwohl experimentelle Daten und etablierte Gesetze zu Vergrößerungsraten in alternden Schäumen existieren, bleiben Fragen zum Zerfallsprozess offen, beispielsweise, wie sich die Vergrößerungsrate mit zunehmendem Flüssigkeitsanteil in mäßig nassen Schäumen ändert. Aufgrund ihrer Abhängigkeit vom Flüssigkeitsanteil ist es leicht vorstellbar, wie der Vergrößerungsprozess stark mit der Drainage korreliert ist. Da die Drainage die vertikale Verteilung des Flüssigkeitsanteils verändert, ist die Vergrößerungsrate innerhalb der Schaumprobe nicht homogen. Sofern es nicht zuerst zum Reißen von Filmen kommt, vergrößern die Blasen im oberen Bereich schneller als diejenigen im unteren Bereich. Dieser druckgetriebene Vergrößerungsprozess wurde in wässrigen Schäumen sowohl theoretisch als auch experimentell umfassend untersucht.

Im Mittelpunkt dieser Forschungsarbeit stehen Struktur-Eigenschaftsbeziehungen. Kapitel 4 analysiert detailliert die spezifischen Merkmale des Zerfallsprozesses trockener Schäume mit geringem Flüssigkeitsanteil. Ein Schwerpunkt liegt auf reißenden Filmen und der daraus resultierenden Koaleszenz von Blasen. Trotz umfangreicher Forschung bleibt die Beziehung zwischen der Stabilität einzelner Schaumfilme und dem Verhalten makroskopischer dreidimensionaler Schäume unklar. Ein weiterer Fokus liegt auf dem Einfluss der Schaumvergrößerung. Diese Arbeit zielt darauf ab, den Einfluss einzelner Alterungsmechanismen auf die Morphologie abzubilden.

2.3 Charakterisierung von Schäumen

2.3.1 Strukturdynamik flüssiger Schäume

Die Forschung an Schäumen hat in den vergangenen Jahrzehnten beachtliche Fortschritte erzielt. Diverse Methoden bilden die komplexen Eigenschaften und Prozesse in Schäumen ab und ermöglichen die Analyse von Struktur und Eigenschaften. Studien untersuchten verschiedene statistische Eigenschaften sowohl in mono- als auch in polydispersen zweidimensionalen Schäumen. Sie nutzten dafür unterschiedliche experimentelle Ansätze, beispielsweise optische Beobachtungen. Zu den Bildgebungstechniken zählen unter anderem Fluoreszenzmikroskopie [46], und Aufnahmen mit handelsüblichen Webcams [47], um die quantitative Entwicklung aufzuzeichnen. Ähnlich berichten Roth et al. [48] über Vergrößerungsdynamiken, die sie mittels Fotografien beobachteten.

Drei Hauptmechanismen tragen zur Alterung von Schäumen bei [35]. Erstens die Drainage – unter dem Einfluss der Schwerkraft, zweitens die Vergrößerung – Gastransfer zwischen Blasen und drittens die Koaleszenz – Reißen des trennenden Flüssigkeitsfilms. Obwohl diese drei Prozesse bekanntermaßen die dynamische Entwicklung von Schäumen bestimmen, bleibt ein Problem bestehen: Es fällt schwer, den Beitrag einzelner, isolierter Prozesse zur gesamten Strukturbildung aufzuschlüsseln. Um die individuellen Prozesse zu untersuchen, bietet sich an, andere beitragende Mechanismen zu unterdrücken. Dafür wurden verschiedene Ansätze vorgeschlagen. Rio et al. [41] geben dazu einen Überblick über ausgereifte experimentelle Designs. Beispielsweise untersuchten Deminiere et al. [49] den von Koaleszenz dominierten Entwicklungsprozess in einem Modellmaterial (Emulsion); Carrier und Colin [42] stellten einen Zusammenhang zwischen dem Auftreten von Koaleszenz und dem Flüssigkeitsanteil her; und Forel et al. [50] verfolgten einzelne Koaleszenzereignisse mit einer hochauflösenden Kamera und schlussfolgerten, dass die Koaleszenzwahrscheinlichkeit proportional zur Größe des trennenden Films ist.

Dennoch bleiben Probleme bestehen. Während sich Drainage und Vergrößerung modellieren lassen und bereits umfangreich erforscht wurden, bleibt die Koaleszenz weniger gut verstanden [51]. Der Schaumzerfall hängt hauptsächlich von den Eigenschaften einzelner Filme ab. Daher konzentrierten sich experimentelle und theoretische Untersuchungen vor allem auf das Reißen isolierter, einzelner Schaumfilme in einfachen Geometrien [52]. Verschiedene Ansätze heben die Zerstörung einzelner Schaumfilme [53] und die Koaleszenz mit Fokus auf topologische Umordnungen [54] hervor. Viele Experimente nutzen zweidimensionale Schaumstrukturen, da sie einfacher zu handhaben sind [48]. 3D-Experimente erweisen sich als kostspieliger und komplexer hinsichtlich der Aufnahmen und die Erfassung stellt oft eine technische Herausforderung dar.

2.3.2 Mechanische Eigenschaften fester Schäume

Zur Charakterisierung von Metallschäumen bestehen verschiedene etablierte Methoden, die sich in mehrere Kategorien einteilen lassen. Ein wesentlicher Aspekt ist die Bestimmung der Schaummorphologie, die Porengröße, Porosität und Dichteverteilung umfasst. Hierfür stehen sowohl zerstörungsfreie als auch zerstörende Prüfverfahren zur Verfügung. Zu den zerstörungsfreien Verfahren gehören Röntgendiffraktion und Radioskopie, Röntgen-Computertomographie, Wirbelstrom-Sensorik, Porosimetrie und Permeametrie sowie Farbeindringung [10, 55, 56]. Als zerstörendes Prüfungsverfahren ist die optische Mikroskopie zu nennen, bei der eine Zerteilung des Schaums erforderlich ist [56]. Zur Bestimmung der Schaumeigenschaften kommen verschiedene Methoden zum Einsatz. Zerstörungsfreie Prüfverfahren umfassen akustische Messungen zur Ermittlung der Schallabsorption, Schwingungsanalysen zur Bestimmung des Elastizitätsmoduls und Verlustfaktors sowie Messungen der elektrischen und thermischen Leitfähigkeit [56, 57]. Zerstörende Verfahren beinhalten mechanische Tests, die analog zu Tests an Vollmaterialien durchgeführt werden. Diese umfassen uniaxiale, biaxiale, multiaxiale und hydrostatische Belastungen in Druck, Zug und Torsion sowie Biegeversuche, die als konstante, quasi-statische, dynamische oder zyklische Belastung erfolgen können [56].

Die vorliegende Arbeit untersucht in virtuellen Experimenten Schaumstrukturen hinsichtlich ihres Druckverhaltens. Daher gehen die folgenden Erläuterungen auf das Verhalten von Metallschäumen unter quasi-statischer Druckbelastung.

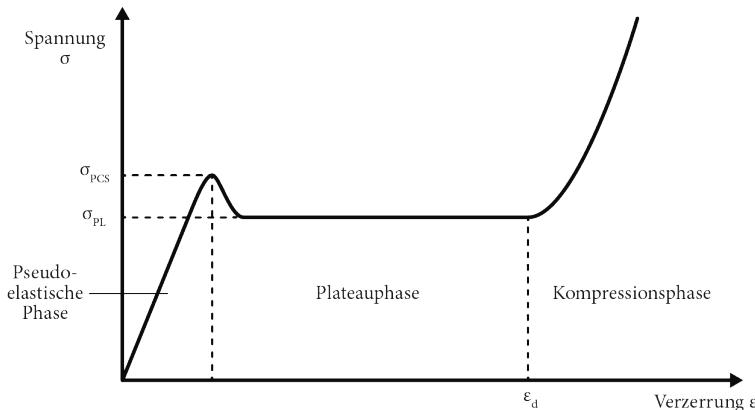


Abbildung 2.4: Allgemeines Spannungs-Verzerrungs-Diagramm von Metallschäumen. Gekennzeichnet sind die Plateauspannung σ_{PL} , die plastische Versagensspannung σ_{PCS} und der Verdichtungspunkt ε_d . Darstellung in Anlehnung an [58].

Der typische Verlauf eines uniaxialen Druckversuchs von Metallschäumen ist in Abbildung 2.4 illustriert. Das Spannungs-Verzerrungs-Diagramm für Druckbelastung weist drei charakteristische Phasen auf: die pseudoelastische Phase, die Plateauphase und die Kompressionsphase. In der pseudoelastischen Phase zeigt sich ein linearer Anstieg der Spannung. Trotz des scheinbar elastischen Verhaltens treten bei Metallschäumen bereits frühzeitig plastische Verzerrungen an den Verbindungsstellen der Stege auf. Dies resultiert in einem niedrigeren Elastizitätsmodul als für ein entsprechendes Vollmaterial erwartet. Der Entlastungspfad in dieser Phase verläuft steiler als der Belastungspfad, da in diesem Fall die rein elastische Verzerrung sichtbar wird [59, 60]. Die Phase endet mit dem Kollaps der ersten Porenlage, wobei die unter dieser Bedingung herrschende Spannung als plastische Versagensspannung σ_{PCS} bezeichnet wird [58].

Die anschließende Plateauphase zeichnet sich besonders bei offenporigen Schäumen durch ein ausgeprägtes Plateau auf Höhe der Plateauspannung σ_{PL} aus [59]. Während dieser Phase biegen sich zunächst die Stege, bis sie bei entsprechend hoher Spannung brechen, was zum Kollaps der Poren führt. Aufgrund der Lokalisierung von Spannungen und Verzerrungen kollabieren die Poren nicht simultan, sondern sukzessive in horizontalen oder geneigten Deformationsbändern [61].

Die Kompressionsphase setzt ab dem Verdichtungspunkt ϵ_d ein, an dem sich die Stege berühren. In dieser Phase wird die Struktur weiter komprimiert, wobei die Spannung rapide ansteigt und nur noch geringfügige Verzerrungen auftreten [59]. Der markante Spannungsanstieg resultiert aus dem Kontakt der einzelnen Stege und stellt einen rein geometrischen Effekt dar [58]. In dieser Phase verhält sich der Schaum ähnlich einem Vollmaterial, da alle Poren bereits kollabiert sind.

An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass für die Studien der vorliegenden Arbeit ein rein elastisches Materialverhalten als grundlegende Annahme dient. Diese Vereinfachung ermöglicht eine fokussierte Analyse der grundlegenden Zusammenhänge zwischen Porenstruktur und effektiven Eigenschaften, ohne plastische Verformungen zu berücksichtigen.

2.4 Synopsis computergestützter Ansätze

2.4.1 Digitale Zwillinge von Schäumen

Digitale Zwillinge sind virtuelle Repräsentationen physischer Objekte, Prozesse oder Systeme. Im Bereich der Materialwissenschaften spiegeln sie beispielsweise komplexe Materialsysteme detailliert wider und bieten vielfältige Möglichkeiten zur Analyse und Optimierung [62]. Im Gegensatz zu experimentellen Methoden, bei denen der Zugriff auf bestimmte Materialparameter oft herausfordernd ist, liefern digitale Zwillinge von Schaumstrukturen eine vollständige und zugängliche Darstellung der mikrostrukturellen Eigenschaften und der Morphologie. Zur Generierung digitaler Zwillinge von Schäumen existieren zwei grundlegende

Ansätze. Zum einen lassen sich reale Schäume mittels bildgebender Verfahren wie Computertomographie digital rekonstruieren. Zum anderen können Strukturen algorithmusbasiert digital generiert werden. Beide Methoden haben Vor- und Nachteile hinsichtlich Genauigkeit, Flexibilität und Aufwand.

Im Kontext der Schaumtemplatierung, einer vielversprechenden Methode zur Herstellung maßgeschneiderter fester Schäume, bieten digitale Zwillinge Möglichkeiten zur Auslegung der Materialsysteme und zur Optimierung des Herstellungsprozesses selbst. Dabei können die einzelnen Prozessschritte abgebildet werden, einschließlich der Materialeigenschaften, Prozessparameter und Umgebungsbedingungen. Im Fokus der vorliegenden Arbeit stehen flüssige und feste Schäume entlang der Prozesskette der Templatierung. Anhand des virtuellen Schaumes ist es möglich, systematisch die Beziehungen zwischen Struktur und resultierenden Eigenschaften zu untersuchen. Indem eine Vielzahl unterschiedlicher Strukturen eingestellt und erzeugt wird, lassen sich verschiedene Szenarien und Parametereinstellungen virtuell testen und Schaumeigenschaften präzise vorhersagen. Die Simulationen überbrücken damit die Kluft zwischen „polydispersen“ und „monodispersen“ experimentellen Forschungsansätzen [8] und eröffnen neue Wege zur gezielten Steuerung von Strukturen und Eigenschaften der resultierenden Schäume.

Digitale Zwillinge ermöglichen eine quantitative Analyse von Strukturparametern wie Porengrößenverteilungen, Porenformen und Porosität. Durch die Kopplung mit Simulationsmodellen können Prozesse wie Schaumalterung oder mechanische Eigenschaften virtuell untersucht werden. Ein wesentlicher Vorteil digitaler Zwillinge liegt in der Durchführung virtueller Experimente, die in der Realität schwer oder kostspielig wären. So können beispielsweise neue Schaummaterialien mit maßgeschneiderten Eigenschaften entwickelt werden. Durch die Kombination mit anderen computergestützten Methoden, wie der in dieser Arbeit verwendeten Phasenfeld-Methode, eröffnen sich neue Perspektiven für ein umfassendes digitales Materialdesign.

2.4.2 Modellierung und Simulation von flüssigen Schäumen

Die Komplexität der Schaumalterung erfordert Ansätze, die es ermöglichen, einzelne Alterungsprozesse isoliert zu untersuchen. Dabei stellen numerische Simulationen ein leistungsfähiges Werkzeug dar. Ein wichtiger Aspekt bei numerischen Simulationen von Schaumstrukturen ist eine akkurate Repräsentation der gesamten topologischen Entwicklung und des Skalierungsverhaltens [63]. Rechenmodelle für sich entwickelnde Schäume wurden mit unterschiedlichen Schwerpunkten vorgestellt. Kelager et al. entwickelten eine Methode, um 2D-Schäume für Computergrafikanwendungen darzustellen [64]. Andere 2D-Modelle für die Entwicklung trockener Schäume zielen auf eine physikalisch korrekte Darstellung ab und bilden sowohl Vergrößerung als auch Koaleszenz ab. Hierbei erwies sich das auf finiten Elementen basierende Werkzeug Surface Evolver von Brakke [65] als beliebtes Instrument zur Behandlung komplexer Schaumgeometrien. Das Modell von Chae et al. [63], das auf einer Kombination aus Massentransfer, Knotenpunktbewegung und Kantenrelaxation basiert, erfasst auch Oberflächenspannung und verfolgt Kanten. Kern et al. [66] schlugen ihr viskoses Schaummodell vor, das die 2D-Entwicklung simuliert, um die Dynamik von Schaum unter viskosen Widerstandskräften an den beweglichen Plateau-Kanten zu beschreiben. Neue Ansätze, die auf der *Immersed-Boundary-Methode* basieren, untersuchen das 2D-statistische Verhalten von trockenem Schaum [67]. Dieses Modell erfasst die Vergrößerung im Grenzfall des trockenen Schaums. Sayes Modell behandelt die unterschiedlichen Zeit- und Längenskalen der Prozesse mit einer Reihe von multiskaligen, miteinander verknüpften Algorithmen [68] und erzielt bemerkenswerte Darstellungen der Schaumdynamik. Viele Ansätze erfordern jedoch eine komplizierte Gittergenerierung oder Grenzflächenverfolgung und sind daher mit einem hohen Rechenaufwand verbunden. Folglich lösen numerische Experimente makroskopische Schäume oft nicht auf.

2.4.3 Modellierung und Simulation von festen Schäumen

Effiziente Algorithmen zur digitalen Generierung von Schaumstrukturen bilden die Grundlage für die Simulation der Eigenschaften von Schäumen. In diesem Kontext wird im Rahmen dieser Arbeit ein weitergehender Ansatz entwickelt, der auf einer kompakten, aber zufälligen Kugelpackung basiert und in einer früheren Arbeit vorgestellt wurde [69]. Dieser Algorithmus nutzt die Mittelpunkte generierter Kugeln als Ausgangspunkt für eine Voronoi-Zerlegung, gefolgt von einer einem detaillierten Aufbau der Stegformen. Diesem Algorithmus gingen viele rudimentärere Modelle zur Erzeugung offenenporiger Schaumstrukturen voraus. Ein einfaches kubisches Porenmodell zur Berechnung der relativen Dichte wurde von Gibson und Ashby entwickelt [70]. Hier weisen die Stege einen quadratischen Querschnitt mit konstanter Seitenlänge auf. Alle Poren besitzen das selbe Volumen, und die Stege stehen rechtwinklig zueinander. Ein weiteres Porenmodell von Zhang geht von einer Tetrakaidecaeder-Zellgeometrie aus [71]. Ein Tetrakaidecaeder hat 14 Flächen, davon sechs Vierecke und acht Sechsecke. Wie auch bei Gibson und Ashby kommt auch hier ein quadratischer Querschnitt für die Stege zum Einsatz. Durch die Aneinanderreihung dieser Polyederzellen entsteht eine sehr regelmäßige Struktur. Die Erzeugung von Schäumen mit unterschiedlichen Porengrößen ist jedoch nicht möglich, da sich Tetrakaidecaeder verschiedener Größen nicht nahtlos zu einer Struktur kombinieren lassen. Ein alternatives Porenmodell von Menges und Knipschild verwendet Zellen in Form eines pentagonalen Dodekaeders [72]. Diese Struktur füllt jedoch den Raum nicht vollständig aus, sodass sich die Polyeder nicht lückenlos aneinanderreihen lassen. Die Stege haben einen dreieckigen Querschnitt und auch eine konstante Dicke. An jedem Knotenpunkt treffen drei Stege aufeinander, was den Knoten die Form eines Tetraeders verleiht, das heißt einer Pyramide, deren Grundfläche ein gleichseitiges Dreieck bildet und deren drei Seitenflächen ebenfalls gleichseitige, zur Grundfläche kongruente Dreiecke sind. Einige andere Modelle [73–75] weisen gewisse Gemeinsamkeiten auf. Auch diese Arbeiten verfolgen ähnliche Ansätze wie die bereits beschriebenen geometrischen Modelle. Keine dieser Varianten geht detaillierter auf die Stegform oder die Porenverteilung ein. Bemerkenswerte Fortschritte erzielte Redenbach mit einem

Modell, das den Eigenschaften realer Schäume wie der lokalen Heterogenität von Poren und Stegen hinsichtlich Form und Größe sowie dem Vorhandensein geschlossener Wände weitaus besser gerecht wird [76]. In jüngeren Arbeiten kamen Strukturgenerierungsansätze basierend auf Voronoi-Zerlegung zur Modellierung verschiedener physikalischer Eigenschaften von geschlossen- und offenzelligen Schäumen zum Einsatz [77, 78]. Diese Ansätze liefern Schaummodelle, die die strukturellen Eigenschaften realer Schäume abbilden. Die Schaumkristallstruktur wird unter Berücksichtigung der zufälligen Verteilung der Porengrößen modelliert und erfasst so die Charakteristika realer Schäume gut [79]. Die vorliegende Arbeit stellt einen verbesserten Algorithmus zur digitalen Erzeugung von Schaumstrukturen vor. Dies ermöglicht die systematische Regulierung der Schaumtopologie und die präzise Kontrolle geometrischer Parameter. Zur Erfassung der stochastischen Natur und der morphologischen Eigenschaften realer offenporiger Schäume wird eine Reihe von Schäumen mit verschiedenen morphologischen Parametern erzeugt und in simulierten quasi-statischen Kompressionsexperimenten getestet.

Neben dem Metall, aus dem die Schäume bestehen, hat ihre Strukturgeometrie einen erheblichen Einfluss auf die resultierenden mechanischen Eigenschaften des Schaums [7]. Dabei spielt nicht nur der Volumenanteil des Metalls eine Rolle, sondern die mechanischen Eigenschaften hängen auch stark von der Schaumtopologie ab [80–82]. Die Klasse der Schäume umfasst eine große Vielfalt komplexer Strukturen mit einem breiten Spektrum geometrischer Parameter, die variieren können. Dazu gehören die Querschnittsgeometrie der Stege, die Stegausrichtung sowie die Verteilungen von Stegdicke und Porengröße [82]. Dies spannt einen großen Parameterraum auf, der einer Optimierung unterzogen werden kann, um eine günstige Kombination von mechanischen Eigenschaften und geringer Massendichte zu erzielen. Additive Fertigungsverfahren wie selektives Laserschmelzen ermöglichen heutzutage den 3D-Druck für eine breite Palette von Materialien, einschließlich Metallen vgl. [83, 84]. Dies bietet die Flexibilität, beliebig komplexe Strukturen zu realisieren. Die relativ hohen Kosten dieser Verfahren machen es jedoch wünschenswert, vielversprechende Geometrien zu identifizieren.

Digitale Methoden zur Erzeugung und Untersuchung von Schaumstrukturen bieten die Möglichkeit zur Erforschung des Designraums sowie zur systematischen

Untersuchung des Einflusses, den ein spezifischer geometrischer Parameter auf das effektive Materialverhalten hat. Die vorliegende Arbeit konzentriert sich dabei auf die mechanischen Eigenschaften, indem sie den Einfluss der Schaummorphologie auf die effektive Steifigkeit untersucht.

Numerische Simulationen im elastischen Bereich ermöglichen den Zugang zur effektiven Steifigkeit und Streckgrenze einer Struktur [85]. Da die im Rahmen dieser Arbeit erzeugten Schaumstrukturen eine sehr komplexe Topologie aufweisen, stellt die Simulation ihrer Reaktion auf mechanische Belastung eine herausfordernde Aufgabe hinsichtlich der numerischen Diskretisierung dar. Frühere Forschungsarbeiten nutzten Finite-Elemente-Strukturmechanik-Simulationen, um die mechanischen Eigenschaften spezifischer Schaumstrukturen zu untersuchen [80, 85, 86].

Mit dem Ziel, 3D-Simulationen für eine Vielzahl verschiedener Geometrien zu berücksichtigen, kommt für die vorliegenden Studien eine Phasenfeld-Methode zur Geometrieparametrisierung der Schaumstrukturen zum Einsatz. Aufgrund der Modellierung mit diffusen Grenzflächen ermöglicht dieser Ansatz eine numerische Behandlung auf beliebigen Gittern [87]. Insbesondere lässt sich jede Topologie auf einem kartesischen Gitter betrachten, wodurch eine komplizierte Netzgenerierung vermieden wird. Dies bietet die Flexibilität, verschiedene Strukturen ohne spezifische numerische Behandlung zu simulieren, und eröffnet somit auch Potenzial für Automatisierung. Die Struktursimulationen der erzeugten Schaumstrukturen erfolgen im elastischen Bereich unter Verwendung eines phasenfeldbasierten Lösers für Strukturmechanik innerhalb des PACE3D-Frameworks [88].

Die eingeführte Methode zur Homogenisierung der Vollfeldsimulationsergebnisse nimmt ein isotropes effektives Verhalten für Strukturen an, die auf statistisch isotrope Weise erzeugt wurden. Diese Methode basiert auf einer Kleinste-Quadrate-Anpassung für ein einzelnes Belastungsszenario. Im Gegensatz zu einer einfachen Homogenisierung, die lediglich die Hauptbelastungsrichtung berücksichtigt, wie in [80] beschrieben, bietet die Qualität der Kleinste-Quadrate-Anpassung einen aussagekräftigen Indikator zur Bewertung der Isotropieannahme und der Repräsentativität des untersuchten Bereichs. Darüber hinaus umgeht dieser Ansatz die

Notwendigkeit, verschiedene Belastungsszenarien für jede einzelne Struktur zu simulieren, was im allgemeinen Fall erforderlich wäre, wie beispielsweise in [89] dargestellt. Dadurch werden Rechenkosten eingespart, was ein wichtiger Faktor ist, wenn ein breiter Parameterraum hinsichtlich der Geometrie abgedeckt werden soll. Eine Validierung des Ansatzes zur Bestimmung der effektiven Steifigkeit wird durch die Anwendung des vorliegenden Homogenisierungsschemas auf Simulationsergebnisse umgesetzt. Zusätzlich erfolgt eine Untersuchung der repräsentativen Domänengröße, um Informationen über das Volumen zu erhalten, ab dem eine Schaumstruktur als isotrop betrachtet werden kann. Dies ist ein Schlüsselaspekt für numerische Simulationen, um möglichst viele Rechenkosten einzusparen, indem keine übermäßig großen Volumina gewählt werden, während gleichzeitig repräsentative und somit zuverlässige Ergebnisse erzielt werden.

2.4.4 Phasenfeld-Methode und Schäume

In den vergangenen Jahren erwies sich die Phasenfeld-Methode als vielseitiges Verfahren zur Simulation der zeitlichen Entwicklung von Strukturen und des Verlaufs von Grenzflächen in verschiedenen Anwendungsfeldern in den Materialwissenschaften. Die Methode ermöglicht numerische Berechnungen auf beliebig definierten Gittern durch den Ansatz der diffusen Grenzflächenmodellierung und vermeidet so eine komplizierte Netzgenerierung zur Auflösung der Schaumstruktur. Komplexe Topologien können auf einem kartesischen Gitter betrachtet werden, was große Flexibilität bietet.

Mehrere Arbeiten entwickelten bereits spezifische Phasenfeld-Modelle, um die komplexen Dynamiken flüssiger Schäume zu untersuchen und deren charakteristische Eigenschaften zu erfassen. Uehara [90] schlug ein Mehrphasenfeld-Modell zur Simulation der Strukturentwicklung eines trockenen 2D-Schaums vor. Das Modell erfasst sowohl disproportionalen Gastransfer als auch Koaleszenz gleichzeitig, berücksichtigt jedoch keinen Gasdruck. Das Multi-Phasenfeld-Modell für die Mikrostrukturbildung in metallischen Schäumen von Vakili et al. [91] ermöglicht die Simulation der Schaumstrukturbildung mit kontrollierter Koaleszenz für

nasse Schäume mit hohem Flüssigkeitsgehalt. Lavoratti et al. [92] präsentieren ein modifiziertes Phasenfeld-Modell und stellen numerische Studien zur Dynamik fließender 2D-Schäume vor, berücksichtigen jedoch kein Filmreißen und keine Koaleszenz.

Die Schaumdarstellung bleibt allerdings eingeschränkt und löst Schäume im trockenen Grenzfall oder statistisch und experimentell relevante Domänengrößen makroskopischer Schäume noch nicht vollständig auf. Zusätzlich bleibt der Gasdruck innerhalb der Schäume noch unberücksichtigt und sollte validiert werden. Daher entsteht der Bedarf sowohl an einem physikalisch realistischen Rechenmodell als auch an der Möglichkeit, makroskopische 2D- und 3D-Schäume zu simulieren.

Im Bereich der festen Schäume konzentrierten sich Untersuchungen auf die Modellierung von Mikrostrukturbildung und Strukturentwicklung, insbesondere bei metallischen Schäumen.

Zur Untersuchung der mechanischen bzw. elastischen Eigenschaften fester Schäume kommen in der aktuellen Forschung häufig geometrische Ersatzmodelle zum Einsatz, die auf idealisierten Einheitszellen basieren [80, 85, 86, 93]. Diese Modelle ermöglichen eine vereinfachte Darstellung der komplexen Schaumstruktur. Die mechanische Modellierung dieser Schäume erfolgt durch zwei Ansätze. Zum einen kommen vereinfachte Modelle zum Einsatz, die auf einem Netzwerk aus Biegebalken basieren [80, 82]. Zum anderen werden Vollfeldsimulationen mittels Finite-Elemente-Methode (FEM) durchgeführt [85, 86].

Bisher finden sich in der Literatur keine Untersuchungen auf Basis kontinuumsmechanischer Vollfeldsimulationen für stochastische Schaumgeometrien auf Basis der Phasenfeld-Methode. Bisherige Anwendungen der Phasenfeld-Methode im Kontext von Schäumen konzentrierten sich hauptsächlich auf die Untersuchung der Wärmeleitfähigkeit [2, 94–96] und Durchströmung [62]. Die Anwendung der Phasenfeld-Methode zur Analyse der mechanischen und elastischen Eigenschaften fester Schäume ermöglicht ein umfassendes Verständnis, indem die komplexe Struktur fester Schäume aufgelöst wird.

3 Methodik

3.1 Modellierung von Flüssigschaumstrukturen mit der Phasenfeld-Methode

Schaum altert durch sukzessive Koaleszenzereignisse von Blasen, die durch das Reißen des trennenden Schaumfilms verursacht werden, sowie durch die Relaxation der Struktur in einen energetisch günstigen Zustand. Die Energie eines Schaums hängt aufgrund der Oberflächenspannung direkt von der Grenzfläche ab, die die Blasen trennt. Aus Sicht der Modellierung kann die Entwicklung als eine Minimierung der Oberflächenenergie der Struktur betrachtet werden.

Es wird ein grundlegendes Modell zur Beschreibung von Schaumalterung vorgestellt. Dieses Modell berücksichtigt das spontane Reißen von Schaumfilmen, das mit der sukzessiven Koaleszenz von Blasenpaaren einhergeht. Dieser Modellierungsansatz basiert auf einer Allen-Cahn-Formulierung des Phasenfeld-Modells [97]. Die in dieser Arbeit präsentierte Formulierung enthält einen Energiedichtebeitrag, der sicherstellt, dass physikalischen Phasen Werte für den Gasdruck nach der Zustandsgleichung des idealen Gases zugewiesen werden.

3.1.1 Thermodynamische Beschreibung

Die Beschreibung berücksichtigt ein kompressibles Gas, das von einer inkompressiblen Flüssigkeit umgeben ist in einem zwei- oder dreidimensionalen Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ oder $\Omega \subset \mathbb{R}^3$. Die Gasphase wird durch Schaumfilme in einzelne Zellen aufgeteilt, die durch die Grenzflächen zwischen den Zellen definiert sind.

Das Phasenfeld $\phi(\mathbf{x}, t) = (\phi_1(\mathbf{x}, t), \phi_2(\mathbf{x}, t), \dots, \phi_N(\mathbf{x}, t))$ beinhaltet die Menge der N Ordnungsparameter ϕ_α , welche kontinuierliche Komponenten sind. Die Indizes α, β bezeichnen N verschiedene distinktive physikalische Phasen, die klar unterscheidbar sind. Unter der Voraussetzung, dass $\sum_{\alpha=1}^N \phi_\alpha = 1$ an jeder Stelle gilt, können die Ordnungsparameter des Phasenfeldes als Volumenanteile der entsprechenden physikalischen gasförmigen und flüssigen Phasen interpretiert werden. Da die Ordnungsparameter ϕ_α kontinuierlich zwischen 0 und 1 variieren, gibt es einen begrenzten Bereich zwischen den Phasen, in dem die Grenzfläche diffus ist. In diesem Bereich koexistieren die Phasen. Aufgrund der kontinuierlichen Variation des Ordnungsparameters ändert sich die Zusammensetzung der physikalischen Eigenschaften fließend und proportional zur Zusammensetzung der Phasen. Die Lage des Schaumfilms zwischen den Phasen α und β ist an der Stelle definiert, an der $\phi_\alpha = \phi_\beta = 0,5$ gilt. Da die Grenze implizit definiert ist und sich frei entwickelt, ist weder eine Grenzflächenverfolgung noch das Einbeziehen komplexer Randbedingungen erforderlich.

Für die vorliegende Studie wird das Gesamtfunktional der freien Energie auf dem Gebiet Ω aufgestellt als

$$\mathcal{F}(\phi, T, \mathbf{V}, \mathbf{N}) = \int_{\Omega} \left(\varepsilon a(\phi, \nabla \phi) + \frac{1}{\varepsilon} w(\phi) \right) d\Omega + \sum_{\alpha=1}^N F_\alpha(T, V_\alpha(\phi), n_\alpha). \quad (3.1)$$

Dabei ist der positive Parameter ε ein Skalierungsparameter, der die Breite des diffusen Grenzflächenbereichs bestimmt, wobei kleinere Werte von ε zu dünneren Grenzflächen führen. Das Funktional besteht aus zwei unterschiedlichen Teilen. Der erste Teil setzt sich zusammen aus den Dichten der beiden grenzflächenkontrollierenden Terme $\varepsilon a(\phi, \nabla \phi)$ und $1/\varepsilon w(\phi)$, die in ihrer Summe die Oberflächenenergie zwischen den verschiedenen Phasen abbilden. Die erste für die Grenzflächenenergie relevante Größe ist die Gradientenenergiedichte $\varepsilon a(\phi, \nabla \phi)$, die formuliert wird als

$$a(\phi, \nabla \phi) = \sum_{\alpha < \beta} \gamma_{\alpha\beta} |q_{\alpha\beta}|^2, \quad (3.2)$$

wobei $\gamma_{\alpha\beta}$ die Oberflächenspannung zwischen zwei Blasen ist und $q_{\alpha\beta} = \phi_\alpha \nabla \phi_\beta - \phi_\beta \nabla \phi_\alpha$, nach [97]. Der zweite Term stellt eine freie Oberflächenenergiedichte dar, die gewählt wird als ein sogenanntes *multi-obstacle potential* – ein Potenzial mit mehreren Hindernissen – der Form

$$w(\phi) = \begin{cases} \frac{16}{\pi^2} \sum_{\alpha < \beta}^N \gamma_{\alpha\beta} \phi_\alpha \phi_\beta + \sum_{\alpha < \beta < \delta}^N \gamma_{\alpha\beta\delta} \phi_\alpha \phi_\beta \phi_\delta & \text{wenn } \phi_{\alpha,\beta} \in [0, 1], \\ \infty & \text{sonst,} \end{cases} \quad (3.3)$$

und $\gamma_{\alpha\beta\delta}$ ist ein Term, der eingeführt wird, um das Auftreten von unerwünschten Drittphasenbeiträgen in Zweiphasengebieten zu vermeiden.

Der zweite Teil des Funktionals ergibt sich aus der Summation der integralen Beiträge zur freien Energie $F_\alpha(T, V_\alpha(\phi), n_\alpha)$ für jede Phase und berücksichtigt die verbleibenden energetischen Beiträge – d. h. ohne die Oberflächenenergie – des Gases innerhalb jeder Blase. Neben der Temperatur T und der Stoffmenge n_α als festen Parametern hängt dieser Beitrag zur Bulk-Energiedichte indirekt vom Phasenfeld ϕ durch die Definition des jeder Phase entsprechenden Volumens V_α ab.

In seiner einfachsten Form kann dieses Volumen definiert werden als

$$V_\alpha(\phi) := \int_{\Omega} \phi_\alpha(\mathbf{x}) \, d\Omega. \quad (3.4)$$

Allgemeiner lässt sich unter Verwendung von Gewichtungsfunktionen $h_\alpha(\phi)$, wie $h_\alpha(\phi) = \phi_\alpha^2 / \|\phi\|^2$ mit $0 \leq h_\alpha(\phi) \leq 1$ und $\sum_\alpha h_\alpha(\phi) = 1$ zur Interpolation, alternativ definieren

$$V_\alpha(\phi) := \int_{\Omega} h_\alpha(\phi(\mathbf{x})) \, d\Omega. \quad (3.5)$$

Die erstgenannte Definition entspricht am ehesten der Interpretation, dass es sich bei den Ordnungsparametern ϕ_α um lokale Volumenanteile handelt, und hat den Vorteil, dass sie ausschließlich von den Phasenfeldwerten ϕ_α der jeweils betrachteten Phase α abhängt. Die zweitgenannte Definition dagegen kann aus numerischer Sicht vorteilhaft sein, da die Interpolationsfunktionen in der Regel so gewählt

werden, dass sie $\partial h_\alpha / \partial \phi = 0$ in allen Bulk-Bereichen erfüllen, d.h. es müssen keine Ableitungsbeiträge außerhalb der Grenzflächenbereiche berücksichtigt werden. Trotz dieser geringfügigen Unterschiede führen beide Ansätze zu sehr ähnlichen Werten für die Volumen der Phasen, da die jeweiligen Integrale im Allgemeinen weitgehend von den Bulk-Bereichen dominiert werden, so dass die jeweilige Wahl in erster Linie eine Frage der Zweckmäßigkeit ist.

3.1.2 Evolutionsgleichung für Phasenfeld

Um das Funktional der freien Energie in Gleichung (3.1) zu minimieren, wird die Evolutionsgleichung für das Phasenfeld nach dem Variationsansatz als Gradientenfluss postuliert, der durch

$$\varepsilon \tau \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} = - \left(\frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi_\alpha} - \lambda \right), \quad (3.6)$$

mit dem Zeitrelaxationsparameter τ gegeben ist. Der Lagrange-Multiplikator

$$\lambda = \frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^N \frac{\delta \mathcal{F}}{\delta \phi_\alpha} \quad (3.7)$$

wird hinzugefügt, um die Nebenbedingung $\sum_\alpha^N \partial \phi_\alpha / \partial t = 0$ einzuhalten. Die Ableitung des ersten Beitrags aus den Oberflächenenergietermen in \mathcal{F} [97] ist gegeben durch

$$\varepsilon \left(\frac{\partial a(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi_\alpha} - \nabla \cdot \frac{\partial a(\phi, \nabla \phi)}{\partial \nabla \phi_\alpha} \right) + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial w(\phi)}{\partial \phi_\alpha}. \quad (3.8)$$

Für den zweiten Beitrag führt, bedingt durch $F_\beta(T, V_\beta(\phi), n_\beta)$, eine einfache Anwendung der Kettenregel zu

$$\frac{\delta}{\delta \phi_\alpha} \sum_{\beta=1}^N F_\beta(T, V_\beta(\phi), n_\beta) = \sum_{\beta=1}^N \frac{\partial F_\beta}{\partial V_\beta}(T, V_\beta(\phi), n_\beta) \frac{\partial V_\beta}{\partial \phi_\alpha}(\phi), \quad (3.9)$$

da V_β nicht von $\nabla \phi$ abhängt.

Gemäß der thermodynamischen Relationen [98] lässt sich der erste Term als der negative thermodynamische Druck verstehen

$$P_\beta = - \left(\frac{\partial F_\beta}{\partial V_\beta} \right)_{T,n_\beta}, \quad (3.10)$$

während die Differentiation der Definition des Volumens $V_\beta(\phi)$ in Gleichung (3.5) zur Dichte führt $\frac{\partial V_\beta(\phi)}{\partial \phi_\alpha} = \frac{\partial h_\beta}{\partial \phi_\alpha}$ im allgemeinen Fall, mit der entsprechenden Vereinfachung zur konstanten Dichte 1 nur für $\alpha = \beta$ für die einfache Wahl $h_\beta(\phi) = \phi_\beta$ wie in Gleichung (3.4).

Aus der Kombination beider Beiträge ergibt sich abschließend die Phasenfeld-Evolutionsgleichung zu

$$\varepsilon \tau \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial t} = - \left(\underbrace{\varepsilon \left(\frac{\partial a(\phi, \nabla \phi)}{\partial \phi_\alpha} - \nabla \cdot \frac{\partial a(\phi, \nabla \phi)}{\partial \nabla \phi_\alpha} \right) + \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial w(\phi)}{\partial \phi_\alpha} - \sum_{\beta=1}^N P_\beta \frac{\partial h_\beta}{\partial \phi_\alpha} - \lambda}_{\text{rhs}_\alpha} \right) \quad (3.11)$$

mit $\lambda = 1/N \sum_{\alpha=1}^N \text{rhs}_\alpha$.

Es gilt noch, die genaue Form der Werte für den Druck in Gleichung (3.11) zu bestimmen. Obwohl die Relation 3.10 allgemeiner gilt, werden wir nur den besonders einfachen Fall idealer Gase betrachten, da er für unsere Zwecke ausreichend ist. Da in diesem Fall stets die Beziehung $P_\alpha V_\alpha = n_\alpha RT$ gilt und die Phasenvolumina durch Gleichung (3.5) berechnet werden können, genügt es, entweder anfangs die gewünschte Stoffmenge n_α jeder Phase anzugeben. Alternativ kann für jede Phase ein Anfangsdruck P_α^{init} festgelegt werden, der zusammen mit dem Anfangsvolumen der Phasen implizit die Stoffmengen jeder der Phasen bestimmt. Ausgehend von diesen Anfangswerten und dem aktuellen Volumen $V_\alpha(\phi)$ folgt der ideale Gasdruck direkt aus der Beziehung

$$P_\alpha = P_\alpha^{\text{init}} \cdot \frac{V_\alpha^{\text{init}}}{V_\alpha(\phi)}. \quad (3.12)$$

3.1.3 Modellierung der Schaumentwicklung: Reißende Filme und sukzessive Koaleszenz

Die Vorhersage der Schaumentwicklung erfolgt durch numerisches Lösen der Phasenfeldgleichungen, Gleichung (3.11), mit dem leistungsstarken Phasenfeld-Simulationspaket PACE3D. Die Entwicklung des Schaums basiert unter anderem auf dem Alterungsmechanismus der sukzessiven Koaleszenz, bei dem das Platzen von Schaumfilmen zur Koaleszenz benachbarter Blasen führt. Hier wird ein Algorithmus vorgestellt, der diesen Alterungsprozesses unter der Annahme spontanen, isolierten Reißens von Filmen beschreibt. Das Reißen führt zur Vereinigung von zwei zuvor getrennten Blasen zu einer einzigen (siehe Abbildung 3.1), wobei das ideale Gasgesetz erfüllt wird.

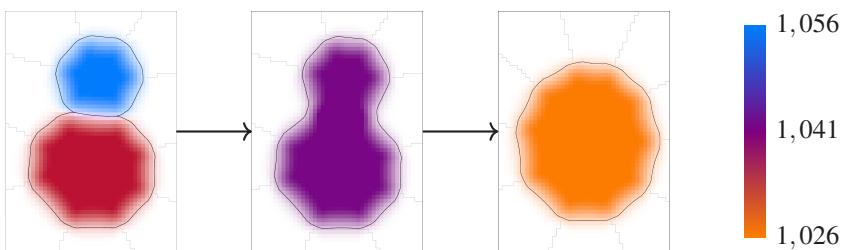


Abbildung 3.1: Das Reißen eines Filmes und die Vereinigung zweier zuvor getrennter Blasen zu einer einzigen, begleitet von der Relaxierung der Struktur. Der Algorithmus stellt sicher, dass das Gas als ideales Gas behandelt wird und das ideale Gasgesetz für die Vereinigung erfüllt ist. Die Farben kennzeichnen verschiedene Werte für den Gasdruck. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

Der Algorithmus für das Platzen eines Filmes und die Koaleszenz basiert darauf, dass aus allen vorhandenen Filmen ein Schaumfilm, der ein benachbartes Paar von Blasen trennt, ausgewählt wird. Als Grundlage für die Auswahl dient ein Kriterium, das die Wahrscheinlichkeit für das Platzen der Filme abbildet. Dieses wird in jedem Iterationsschritt ausgewertet. Diese Auswahl erfolgt zufällig, wobei die Wahrscheinlichkeit mit einem Zufallsfaktor gewichtet wird, um die zeitliche und räumliche stochastische Verteilung eines Filmrisses zu modellieren. Die

Gewichtung berücksichtigt sowohl die intrinsische Wahrscheinlichkeit, dass ein Film reißt und sich das Blasenpaar verbindet, als auch die räumliche Heterogenität der Rissbildung, um realistische Zerfallsmuster abzubilden. Wird ein Film bzw. ein Blasenpaar ausgewählt, so werden die beiden zu einer vereinigt. Dieses Vorgehen bildet den Mechanismus des spontanen isolierten Reißens von Schaumfilmen ab.

Schaumfilme werden durch die diffuse Grenzfläche zwischen zwei Phasen dargestellt, also durch jene Bereiche, in denen zwei Phasen vorhanden sind.

In jedem Volumenelement werden benachbarte Blasen durch die beiden höchsten Phasenfeld-Ordnungsparameter definiert, ϕ_α und ϕ_β . Jedem Volumenelement innerhalb der diffusen Grenzfläche wird ein stochastisches Kriterium zugewiesen. Dieses Kriterium bildet die Wahrscheinlichkeit des Reißens eines Films an diesem spezifischen Ort ab. Ist das Kriterium erfüllt, so wird das Reißen des Filmes und das damit verbundene Koaleszenzereignis ausgelöst. Der Ausdruck ist eine Funktion $p_{\alpha\beta}^{\text{burst}}(\phi, \nabla\phi, \gamma, \dots)$, die der Wahrscheinlichkeit des Platzens eines einzelnen Schaumfilms entspricht, was zur Koaleszenz der Blase α mit der Blase β führt. Ein zur Größe der Grenzfläche und damit zur Filmgröße proportionales Filmplatzen wird durch die Wahl des Kriteriums $p_{\alpha\beta}^{\text{burst}} = \phi_\alpha \cdot \phi_\beta$ modelliert.

Um ein räumlich stochastisches Auftreten der Initiierungspunkte der Risse in Schaumfilmen zu modellieren, wird die Wahrscheinlichkeit $p_{\alpha\beta}^{\text{burst}}$ durch Multiplikation mit einer gleichverteilten Zufallszahl z gewichtet: $p_{\alpha\beta}^{\text{burst}} \cdot z$, $z \in [0, 1]$. Zudem bestimmt ein vordefinierter Schwellenwert K eine zeitliche Gesamtwahrscheinlichkeit dafür, dass das Kriterium erfüllt ist. Dies ermöglicht es, die Häufigkeit des Auftretens von reißenden Filmen zu steuern, da die Größe von K die Gesamtwahrscheinlichkeit beeinflusst. Hohe Werte von K verringern die Gesamthäufigkeit, während niedrige Werte sie erhöhen. Wenn die randomisierte Wahrscheinlichkeit einen Wert annimmt, der größer ist als der gewählte kritische Wert,

$$p_{\alpha\beta}^{\text{burst}} \cdot z > K, \quad (3.13)$$

wird das Platzen des Films initiiert, und die beiden ursprünglich angrenzenden Phasen werden zu einer zusammenhängenden Phase vereinigt, mit dem finalen

Volumen $V_{\alpha\beta} = V_\alpha + V_\beta$. Diese Vereinigung zweier zuvor getrennter Volumina wird durch Aufsummierung der beiden größten Ordnungsparameter in jedem Volumenelement im gesamten Simulationsgebiet realisiert, $\phi_{\alpha\beta} = \phi_\alpha(\mathbf{x}, t) + \phi_\beta(\mathbf{x}, t)$. Da in der diffusen Grenzfläche, wo das Koaleszenzereignis ausgelöst wird, nur zwei Phasen vorhanden sind, wird der ehemalige diffuse Bereich zum Bulk. Der Wegfall der diffusen Grenzfläche entspricht dem abrupten Zerplatzen und der vollständigen Auflösung des Schaumfilms. Die Addition der Ordnungsparameter ϕ_i führt zu einem zusammenhängenden Volumen, das aus den Volumina der zuvor getrennten Blasen gebildet wird,

$$V_{\alpha\beta} = \int_{\Omega} (\phi_\alpha(\mathbf{x}, t) + \phi_\beta(\mathbf{x}, t)) d\Omega. \quad (3.14)$$

Nach der Vereinigung wird der Gasdruck in der entstandenen Phase nach dem idealen Gasgesetz berechnet,

$$P_{\alpha\beta} = \frac{V_\alpha P_\alpha + V_\beta P_\beta}{V_{\alpha\beta}}. \quad (3.15)$$

3.1.4 Modellierung der Schaumentwicklung: Gas-Diffusion und Ostwald-Reifung

Der Gasaustausch über dünne Flüssigkeitsfilme zwischen benachbarten Blasen ist ein wesentlicher Mechanismus in der Schaumentwicklung und treibt die Ostwald-Reifung an. In diesem Zusammenhang wird ein Algorithmus vorgestellt, der diesen Entwicklungsprozess detailliert modelliert und den Gasaustausch explizit berücksichtigt. Der charakteristische Prozess beschreibt das Wachstum größerer Blasen auf Kosten kleinerer Nachbarblasen durch Diffusion des Gases aus den kleinen Blasen in die Großen. Dieser Prozess wird durch den Druckunterschied zwischen den Blasen getrieben, der aus der Krümmung der Blasenoberfläche resultiert und durch die Young-Laplace-Gleichung beschrieben wird.

Der Gasaustausch zwischen zwei Blasen wird durch einen kontinuierlichen Gasfluss durch den Flüssigkeitsfilm modelliert. Für den Algorithmus wird zur Beschreibung des Gastransfers dieser kontinuierliche Fluss in eine diskretisierte Form überführt. Eine partielle Gasflussrate beschreibt für jedes Volumenelement im Schaumfilm den jeweiligen lokalen Gasfluss. Der Übertrag des Gases erfolgt im Modell dadurch, dass die Volumina der benachbarten Blasen basierend auf den berechneten lokalen Gasflussraten iterativ aktualisiert werden. So bildet der Algorithmus den gesamten Gasfluss durch die Grenzfläche (den Film) zwischen den Blasen ab, und gewährleistet eine entsprechende Anpassung der Blasenvolumina. Dabei ist sichergestellt, dass das ideale Gasgesetz für das Gesamtsystem erfüllt ist, und dass der Nettogasfluss Null ist.

Diffusive Prozesse bestimmen primär den Gasaustausch zwischen zwei Blasen α und β . Die Gasflussrate J durch die Schaumfilme lässt sich approximativ durch ein vereinfachtes Fick'sches Gesetz beschreiben, mit

$$J = -cS\Delta Ph^{-1}. \quad (3.16)$$

Hierbei stellt S die Fläche des Filmes, c eine von der Art des Gases abhängige Konstante, h die Filmdicke und $\Delta P = P_\alpha - P_\beta$ die Druckdifferenz zwischen den Blasen dar. Diese Druckdifferenz zwischen zwei unterschiedlich großen Blasen ist stets nicht Null, weil der Druck in einer Blase umgekehrt proportional zu ihrem Radius und damit proportional zu ihrer Krümmung ist. Kleinere Blasen haben somit einen höheren Innendruck.

Die Diffusion des Gases zwischen den Blasen wird im Modell abgebildet, indem der kontinuierliche Gasfluss in diskrete Einheiten zerlegt wird. Die Schaumfilme werden durch die diffuse Grenzfläche zwischen benachbarten Blasen repräsentiert. Entsprechend der räumlichen Diskretisierung wird der Gasaustausch inkrementell modelliert. Für jedes Volumenelement, in dem gilt $\phi_\alpha \cdot \phi_\beta \neq 0$, wird eine partielle Gasflussrate $f_\alpha(\mathbf{x}) = \kappa\Delta P$ berechnet, wobei κ eine Konstante ist, die entsprechend der chemischen und physikalischen Eigenschaften des betrachteten Materialsystems kalibriert werden kann. Da der resultierende Gesamtfluss aus dem Bereich der diffusen Grenzfläche berechnet wird, und es sich bei dieser um

ein Volumen handelt, ist es nötig, diesen auf eine Oberfläche abzubilden. Dazu wird eine Normierung auf eine geeignete Einheitslänge durchgeführt.

Der Wert $f_\alpha(\mathbf{x})$ repräsentiert die Gasmenge, die pro diskretem Zeitschritt durch ein Volumenelement des Schaumfilms fließt. Der Gasfluss wird durch einen Übertrag von Blase β zu Blase α umgesetzt, wobei die Volumina beider Blasen entsprechend angepasst werden. Dieser Prozess umfasst zwei iterative Abläufe. Zunächst erfolgt eine räumliche Iteration über alle Volumenelemente des Schaumfilms, bei der die Gasvolumina der benachbarten Blasen aktualisiert werden gemäß

$$V_{\alpha,t+1} = V_{\alpha,t} + f_\alpha(\mathbf{x}). \quad (3.17)$$

Das Volumen $V_{\beta,t+1}$ der zweiten Blase wird entsprechend angepasst. Dieses Vorgehen entspricht der Integration des Gasflusses über die gesamte Grenzfläche, also den Film. Die räumliche Iteration wird dann in einer übergeordneten zeitlichen Iteration für jeden diskreten Zeitschritt wiederholt. Somit erfolgt die Berechnung iterativ sowohl über alle Volumenelemente des Schaumfilms als auch über alle Zeitschritte.

Diese diskrete Formulierung ermöglicht eine effiziente Berechnung des Gasaus tauschs und erlaubt die Simulation der Ostwald-Reifung in Schaumsystemen. Der Algorithmus gewährleistet die Volumenerhaltung und einen Nettogasfluss von Null, während er gleichzeitig sicherstellt, dass das Gas als ideales Gas behandelt wird. Der Gasfluss sowie der beschriebene Ansatz sind in Abbildung 3.2 illustriert.

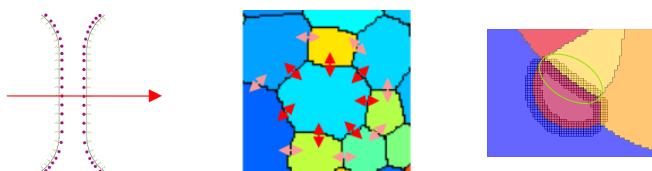


Abbildung 3.2: Darstellungen des Gastransfers durch einen einzelnen Schaumfilm, des Gasflusses in einem Blasenensemble in einem trockenen Schaum und des Modellierungsansatzes: Für jedes Volumenelement in der hervorgehobenen Grenzfläche wird die Gasflussrate berechnet, und der Gastransfer erfolgt durch eine Aktualisierung der Volumina der angrenzenden Blasen.

Das Modell ist als Teil des phasenfeldbasierten Multiphysik-Lösers PACE3D [88] implementiert. Er löst die zwei- oder dreidimensionale Evolutionsgleichung auf einem kartesischen Gitter. Auf Grundlage eines Finite-Differenzen-Schemas wird Gleichung (3.11) mit expliziten Zeitschritten diskretisiert und auf einem diskreten numerischen Gitter gelöst, das in kubische Zellen gleichen Volumens unterteilt ist. Durch die Verwendung eines Schemas mit lokal reduzierten Ordnungsparametern für eine große Anzahl von Phasen [100, 101] wird eine hohe Rechenleistung erreicht. Darüber hinaus wird eine effiziente Berechnung für große Strukturen und Gebietszerlegung gewährleistet, indem parallele Berechnungsschemata zur Lösung der Evolutionsgleichungen auf der Grundlage der Message-Passing-Schnittstelle (MPI) implementiert sind. Die nachfolgenden Abschnitte stellen parallele Simulationen mit MPI vor. Diese Simulationen wurden auf dem Parallelrechnersystem bwUniCluster 2.0+GFB-HPC durchgeführt, dem High-Performance-Computing-System, das durch bwHPC vom Land Baden-Württemberg gefördert wird.

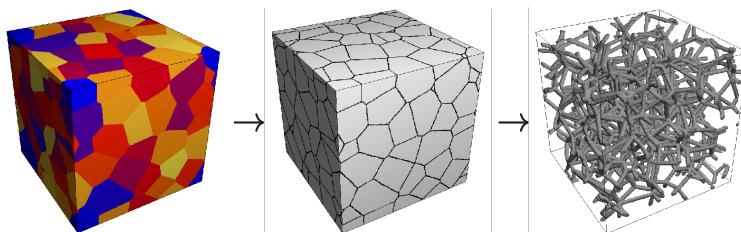
3.2 Algorithmische Generierung von offenporigen Schaumstrukturen

Dieser Abschnitt beschreibt die Konstruktion digitaler Modelle poröser Strukturen, die in den in Kapitel 5 vorgestellten numerischen Simulation der Druckversuche verwendet werden. Um offenporige Schaumstrukturen mit einer großen morphologischen Vielfalt digital zu erzeugen, wurden algorithmische Generierungs routinen verwendet, mit dem Ziel, den Raum in eine zelluläre Struktur zu unterteilen. Diese sind als Teil des Softwarepaketes PACE3D [88] implementiert. Die Generierungs routinen umfassen eine große Bandbreite an Strukturmerkmalen, wie beispielsweise verschiedene Zellgrößenverteilungen oder Stegformen. Die resultierenden generierten Strukturen bilden die morphologischen und topologischen Eigenschaften realer Schaumstrukturen nach.

Die allgemeine Routine zur Erzeugung einer einzelnen Struktur basiert auf der Anordnung von Punkten im dreidimensionalen Raum gemäß einer räumlichen Voronoi-Zerlegung. Die Routine kann in die folgenden vier Schritte unterteilt werden:

1. Erzeugung einer Menge von Generatorpunkten im Gebiet.
2. Erstellung einer Voronoi-Zerlegung: Unterteilung des Gebiets in Teilgebiete (polyedrische Zellen), die durch Voronoi-Diagramme gebildet werden. Ein Voronoi-Diagramm besteht aus dem Ort der Punkte im Gebiet, die zu mindestens zwei nächstgelegenen Generatorpunkten äquidistant sind.
3. Identifikation von Zellkanten.
4. Generierung von Stegen entlang der Kanten.

Die Schritte 2 bis 4 der Schaumgenerierung sind in Abbildung 3.3 für eine Beispielstruktur dargestellt. Die Anwendung dieser Routine führt zur Unterteilung des Gebiets in zwei Teilgebiete, von denen eines aus miteinander verbundenen Stegen und das andere aus dem Porenraum besteht.



(a) Voronoi-Zerlegung; zufällig verteilte polyedrische Zellen. (b) Zellkanten der Voronoi-Struktur. (c) Stegstruktur; offenporiges Schaummodell.

Abbildung 3.3: Schematische Darstellung des algorithmischen Generierungsverfahrens für offenporige Schaumstrukturen: (a) zufällig verteilte Voronoi-Zellen, die um Generatorpunkte herum erzeugt werden, (b) Zellkanten und Eckpunkte, und (c) Erzeugung von Stegen entlang der Zellkanten von (b). Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22].

Die Anzahl der Generatorpunkte entspricht der Anzahl der Zellen, in die die Struktur unterteilt ist, was wiederum das mittlere Volumen einer Zelle und damit die resultierende Porengröße der Struktur bestimmt. Um die Schwankungen der Längen der Zelldurchmesser von Schäumen zu berücksichtigen, kommen grundsätzlich zwei verschiedene Ansätze mit unterschiedlichen Möglichkeiten für die Definition der Zellverteilung zum Einsatz (Schritt 1 und 2). Die erste Routine erzeugt eine räumliche Zufallsverteilung von Generatorpunkten. Diese statistische Verteilung führt zu einer generischen Voronoi-Zerlegung des Gebiets und zur Bildung von Zellen mit beliebigem Zellvolumen. Die zweite Routine zielt darauf ab, Schaumstrukturen mit vordefinierter Zellgrößenverteilung zu erzeugen. Die Menge der Generatorpunkte, die die anschließende Zerlegung ermöglicht, wird durch einen Algorithmus erhalten [69], der auf einer kompakten, aber zufälligen Kugelpackung basiert. Nach Auswahl einer Verteilung der Zelldurchmesser wird innerhalb des Gebiets eine dichte Packung von Kugeln mit der vordefinierten Durchmesserverteilung erzeugt. Die Voronoi-Verteilung verwendet die Kugelmittelpunkte als Generatorpunkte.

Die durch die beschriebene Routine generierten Strukturen können weiterentwickelt werden. Dazu dienen die Zellstrukturen als Basis für einen Anpassungsprozess. Im Anschluss an Schritt 2 wird ein weiterer Algorithmus angewandt, um diese Strukturen zu modifizieren. Die angewandte Methode erzeugt zentroidale Zerlegungen mit Hilfe des Lloyd-Algorithmus [102]. Für eine generierte Zellstruktur wird der Generatorpunkt jeder Zelle iterativ neu gesetzt und zum Schwerpunkt der jeweiligen Zelle verschoben. Die Grundlage hierfür bildet eine durch Voronoi-Zerlegung eines Gebiets entstandene Zellstruktur. Ein Schleifendurchlauf des iterativen Prozesses lässt sich in den folgenden Schritten zusammenfassen:

1. Berechnung des Schwerpunkts jeder Zelle.
2. Verschieben der Generatorpunkte in Richtung des jeweiligen Schwerpunkts.
3. Neuberechnung der Gebietszerlegung.

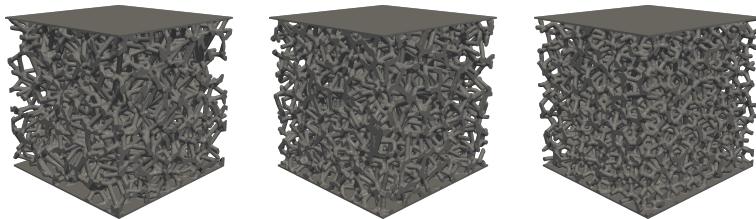
Weitere Algorithmen werden angewandt, um aus der Gebietszerlegung Strukturen offenporiger Schäume mit kreisförmigem und dreieckigem Stegprofil zu erzeugen. Zelluläre Strukturen können beispielsweise durch ihre Porosität θ oder den Volumenanteil c_s des festen Materials charakterisiert werden. Sie sind definiert als

$$c_s = V_f / V_d, \quad (3.18a)$$

$$\theta = (V_d - V_f) / V_d = 1 - c_s \quad (3.18b)$$

wobei V_d das Gesamtvolumen des Gebiets darstellt und V_f das Volumen der Schaumstruktur angibt. Die vorgestellte Methode erlaubt es, die Porosität beliebig zu wählen und damit die Strukturen frei einzustellen. Im Rahmen dieser Arbeit werden Strukturen generiert und untersucht, die Werte für die Porosität im Bereich 74 % bis 83 % aufweisen. Die effektive Massendichte $\rho = \rho_s c_s$ eines Schaums wird durch die Dichte ρ_s des verwendeten Metalls, sowie durch den festen Anteil des Volumens c_s (oder die Porosität θ) bestimmt. Folglich lässt der Vergleich der Eigenschaften von Schäumen gleicher Porosität ausschließlich den Einfluss der Strukturgeometrie erkennen, da das Gewicht konstant bleibt. Bei offenporigen Schäumen bilden Porosität, Stegdicke und Porengröße einen Satz geometrischer Variablen, von denen nur zwei unabhängig wählbar sind. Um eine bestimmte Porosität zu erzielen, gibt es zwei mögliche iterative Vorgehensweisen. Der erste Ansatz erfolgt bei fester gegebener Porengrößenverteilung, und basiert darauf, die Profile der Stege schrittweise zu vergrößern oder zu verkleinern, bis die gewünschte Porosität erreicht ist. Alternativ kann die Stegdicke konstant gehalten werden, während die Porengröße iterativ verändert wird, um so die gewünschte Porosität zu erhalten. Gegenstand dieser Studie sind drei Typen von Schaumstrukturen mit verschiedenen zugrunde liegenden zufälligen Verteilungen der Zellen. Dazu werden insgesamt 54 Schaummodelle mit generischen sowie vordefinierten Zellgrößenverteilungen erstellt. Für die Strukturen mit vordefiniertem Zelldurchmesser wird eine Normalverteilung verwendet, um die Kugelpackung zu generieren. Alle Modelle basieren auf einem kubischen Gebiet, das durch ein kartesisches Gitter mit $400 \times 400 \times 400$ Gitterzellen diskretisiert ist. Beispiele von drei generierten

Strukturen mit verschiedenen Porengrößenverteilungen bei konstantem festen Volumenanteil c_s sind in Abbildung 3.4 dargestellt.



(a) Schaumstruktur auf Basis einer zufälligen Verteilung von Zellen. (b) Schaumstruktur auf Basis normalverteilter Zelldurchmesser. (c) Schaumstruktur auf Basis einer zentroidalen Verteilung von Zellen.

Abbildung 3.4: Drei beispielhafte Schaumstrukturen mit gleichem festen Volumenanteil $c_s = 0,2$ und variierenden Geometrien, die durch die entsprechenden geometrischen Parameter der Porengrößenverteilung definiert sind: (a) generische Verteilung, (b) Normalverteilung, (c) zentroidale Verteilung. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22].

3.3 Ermittlung und Homogenisierung mechanischer Eigenschaften fester Schäume

3.3.1 Methode für das mechanische Randwertproblem

Zur Lösung des mechanischen Randwertproblems wird der phasenfeldbasierte Multiphysik-Löser PACE3D [88] eingesetzt. Es wird eine stationäre Impulsbilanz für kleine Verschiebungen

$$\operatorname{div} \boldsymbol{\sigma} = 0 \quad (3.19)$$

angenommen, wobei σ den Cauchy'schen Spannungstensor bezeichnet. Die Geometrie wird mithilfe der Phasenfeld-Methode parametrisiert. Daher werden als Feldvariablen Ordnungsparameter ϕ^α für jede Phase α eingeführt, die dem lokalen Volumenanteil der Phase α entsprechen. Der Übergang zwischen zwei Phasen erfolgt nicht sprunghaft, sondern über einen schmalen Übergangsbereich, in dem die Ordnungsparameter einen steilen und gleichzeitig glatten Übergang im Intervall von Null zu Eins aufweisen. Der Spannungstensor wird nach Khachaturian [103] mit Hilfe einer linear interpolierten Steifigkeit berechnet,

$$\mathcal{C} = \sum_{\alpha=1}^N \phi^\alpha \mathcal{C}^\alpha, \quad (3.20)$$

wo \mathcal{C}^α die konstanten phasenspezifischen Steifigkeitstensoren sind. Im Falle fester Schäume wird ein Zweiphasenproblem betrachtet, bei dem die Phase, die den Porenraum darstellt, eine verschwindende Steifigkeit aufweist. Dies führt zu einem linearen Abfall der Steifigkeit des Metalls mit der Phasenvariablen. Mit der interpolierten Steifigkeit ergeben sich die Materialmodelle zu

$$\sigma = \mathcal{C}[\epsilon], \quad \epsilon = \frac{1}{2} \left(\text{grad } \mathbf{u} + \text{grad}^\top \mathbf{u} \right), \quad (3.21)$$

wobei der infinitesimale Verzerrungstensor ϵ der symmetrische Teil des Verschiebungsgradienten ist und die Klammern $[\cdot]$ die lineare Abbildung eines Tensors zweiter Stufe durch einen Tensoren vierter Stufe bezeichnen. Die Lösungsvariable ist das Verschiebungsfeld \mathbf{u} . Die Impulsbilanz wird auf einem kartesischen Gitter unter Verwendung einer Finite-Elemente-Diskretisierung mit linearen Basisfunktionen und dem Verfahren der konjugierten Gradienten zur Lösung des resultierenden linearen Systems für die Knotenverschiebungen gelöst.

3.3.2 Effektive elastische Eigenschaften durch Homogenisierungsmethode

Ein Teilziel dieser Arbeit ist es, effektive elastische Eigenschaften von Metallschäumen durch numerische Simulationen zu bestimmen. Aus den durchgeföhrten Simulationen liegen Felddaten als Ergebnisse vor. Um aus diesen Lösungsfeldern die effektive Steifigkeit des Schaums zu ermitteln, ist eine Homogenisierungsmethode erforderlich. Dazu werden die volumengemittelten Werte des Cauchy'schen Spannungstensors σ und des infinitesimalen Verzerrungstensors ϵ über das Berechnungsgebiet Ω mithilfe von

$$\bar{\sigma} := \langle \sigma \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \sigma \, dV \quad (3.22a)$$

$$\bar{\epsilon} := \langle \epsilon \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \epsilon \, dV \quad (3.22b)$$

definiert, wobei $\langle \cdot \rangle$ das Volumenmittel angibt. Für den Fall, dass das Gebiet Ω ein repräsentatives Volumenelement des betrachteten Metallschaums ist, so sind diese Mittelwerte geeignete Darstellungen der effektiven Spannung bzw. der Dehnung. Hierbei ist zu beachten, dass sowohl das Spannungs- als auch das Dehnungsfeld durch Simulationen ermittelt werden und die entsprechenden Mittelwerte durch numerische Integration auf Grundlage dieser Felder berechnet werden können. Die Annahme, dass die *Hill-Mandel*-Bedingung [104] gilt, setzt die Energieäquivalenz zwischen der effektiven Spannung und Dehnung und der integralen Energie der lokalen Felder voraus, und somit gilt

$$\langle \sigma \cdot \epsilon \rangle = \bar{\sigma} \cdot \bar{\epsilon}, \quad (3.23)$$

was impliziert, dass die innere Leistung der Spannungs- und Dehnungsfluktuationen $\langle (\sigma - \bar{\sigma}) \cdot (\epsilon - \bar{\epsilon}) \rangle$ verschwindet. Diese Bedingung ist für verschiedene Randbedingungen erfüllt vgl. Saeb et al. [105]. Die Randbedingungen für konstante Spannung, die in dieser Arbeit verwendet werden, gehören dazu. Damit kann das Homogenisierungsproblem dahingehend formuliert werden, dass eine

effektive Steifigkeit $\bar{\mathcal{C}}$ gefunden werden kann, die die effektive Dehnung auf die effektive Spannung abbildet über

$$\bar{\boldsymbol{\sigma}} = \bar{\mathcal{C}} [\bar{\epsilon}]. \quad (3.24)$$

Dies kann als eine Suche nach den elastischen Parametern eines homogenen Materials angesehen werden, das das gleiche Materialverhalten bezüglich der makroskopischen mittleren Dehnung aufweisen würde, wie der betrachtete Verbundwerkstoff.

Der Steifigkeitstensor weist eine links- und rechtsseitige Untersymmetrie auf. Da ein linear-hyperelastischer Festkörper betrachtet wird, folgt für den Steifigkeitstensor die Hauptsymmetrie. Daher kann er im Allgemeinen mit 21 Steifigkeitskomponenten beschrieben werden. Diese reduzierte Anzahl an unabhängigen Parametern gilt es zu bestimmen. Da die betrachteten Schäume mittels eines statistisch isotropen Verfahrens generiert werden, ist es naheliegend, auch für die resultierenden effektiven Eigenschaften Isotropie anzunehmen. Diese Annahme gilt natürlich nur für ein repräsentatives Volumenelement. Dieses wird in Abschnitt 5.2.3 näher untersucht. Unter Annahme einer isotropen Steifigkeit reduziert sich die Anzahl der unbekannten Parameter auf zwei, sodass ein einziger Lastfall zur Bestimmung dieser ausreicht. Der isotrope Steifigkeitstensor ist gegeben durch

$$\mathcal{C} = \lambda \mathbf{1} \otimes \mathbf{1} + 2\mu \mathcal{I}^S, \quad (3.25)$$

wobei λ und μ die Lamé-Konstanten sind, $\mathbf{1}$ der Einheitstensor zweiter Stufe und

$$\mathcal{I}^S = \frac{1}{2} \left[(\mathbf{1} \square \mathbf{1}) + (\mathbf{1} \square \mathbf{1})^{\top_R} \right]$$

der Einheitstensor vierter Stufe, der symmetrisch und orthogonal ist. Hierbei bezeichnet der hochgestellte \top_R die Transponierung des rechten Indexpaares eines

Tensors vierter Stufe. Das Box-Produkt \square ist so definiert, dass die Gleichung $(A\square B)[C] = ABC$ erfüllt ist. In Indexnotation ergibt sich daraus

$$(\mathbf{1}\square\mathbf{1})_{ijkl} = \delta_{ik}\delta_{lj},$$

wobei δ_{ij} das *Kronecker-Delta* darstellt. Die tensorielle Gleichung (3.24) ergibt in diesem Fall

$$\bar{\sigma} = \bar{\lambda} \operatorname{Spur}(\bar{\epsilon}) \mathbf{1} + 2\bar{\mu}\bar{\epsilon}. \quad (3.26)$$

Zur Lösung dieser Gleichung findet eine Methode der kleinsten Quadrate (engl. *least squares method*, LSQ) Anwendung. Im Fall, dass das effektive Materialverhalten exakt isotrop ist, sind lediglich zwei der sechs Gleichungen linear unabhängig. Allerdings ist nicht anzunehmen, dass dies zutrifft, da in der Regel approximative Ergebnisse numerischer Simulationen betrachtet werden. Zudem ist das betrachtete Volumen endlich, sodass die für die Homogenisierung getroffenen Annahmen nur näherungsweise erfüllt sind. Die Zielfunktion für die LSQ lautet

$$S(\bar{\lambda}, \bar{\mu}) = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^j \left[-\bar{\sigma}_{ij} + 2\bar{\epsilon}_{ij}\bar{\mu} + \delta_{ij} \operatorname{Spur}(\bar{\epsilon}) \bar{\lambda} \right]^2. \quad (3.27)$$

Ihre Minimierung erfolgt, indem die notwendige Bedingung gefordert wird, dass die Gradienten bezüglich der Parameter verschwinden. Die entsprechenden partiellen Ableitungen sind

$$\frac{\partial S}{\partial \bar{\mu}} = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^j 4\bar{\epsilon}_{ij} \left[-\bar{\sigma}_{ij} + 2\bar{\epsilon}_{ij}\bar{\mu} + \delta_{ij} \operatorname{Spur}(\bar{\epsilon}) \bar{\lambda} \right], \quad (3.28)$$

$$\frac{\partial S}{\partial \bar{\lambda}} = \sum_{i=1}^3 2 \operatorname{Spur}(\bar{\epsilon}) \left[-\bar{\sigma}_{ii} + 2\bar{\epsilon}_{ii}\bar{\mu} + \operatorname{Spur}(\bar{\epsilon}) \bar{\lambda} \right]. \quad (3.29)$$

Aus den Randbedingungen $\partial_{\bar{\mu}} S = 0$ und $\partial_{\bar{\lambda}} S = 0$ ergibt sich das Gleichungssystem

$$\bar{\mu} \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^j 2\bar{\epsilon}_{ij}^2 + \bar{\lambda} \operatorname{Spur}^2(\bar{\epsilon}) = \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^j \bar{\epsilon}_{ij} \bar{\sigma}_{ij} \quad (3.30)$$

$$2\bar{\mu} \operatorname{Spur}(\bar{\epsilon}) + 3\bar{\lambda} \operatorname{Spur}(\bar{\epsilon}) = \operatorname{Spur}(\bar{\sigma}). \quad (3.31)$$

Dessen Lösung hinsichtlich der effektiven Lamé-Konstanten ist

$$2\bar{\mu} = \frac{3 \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^j \bar{\epsilon}_{ij} \bar{\sigma}_{ij} - \operatorname{Spur}(\bar{\epsilon}) \operatorname{Spur}(\bar{\sigma})}{3 \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^j \bar{\epsilon}_{ij}^2 - \operatorname{Spur}^2(\bar{\epsilon})} \quad (3.32)$$

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{3} \left[\frac{\operatorname{Spur}(\bar{\sigma})}{\operatorname{Spur}(\bar{\epsilon})} - 2\bar{\mu} \right]. \quad (3.33)$$

Damit werden Effektivwerte für die elastischen Materialkonstanten Elastizitätsmodul E , Poissonzahl ν und Kompressionsmodul K berechnet aus

$$\bar{\nu} = \frac{1}{2} \frac{\bar{\lambda}}{\bar{\mu} + \bar{\lambda}}, \quad \bar{E} = \bar{\mu} \frac{2\bar{\mu} + 3\bar{\lambda}}{\bar{\mu} + \bar{\lambda}}, \quad \bar{K} = \bar{\lambda} + \frac{2}{3} \bar{\mu}. \quad (3.34)$$

Um die Qualität der Methode der kleinsten Summe der Abweichungsquadrate von (3.24) zu bewerten, erfolgt eine Quantifizierung mittels Fehlergrößen. Die Wurzel aus der Summe der Quadrate (engl. *Root Mean Square*, RMS) bezüglich der Abweichungen ist

$$e^{\text{rms}} = \sqrt{\frac{1}{6} \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^j \left[-\bar{\sigma}_{ij} + 2\bar{\epsilon}_{ij}\bar{\mu} + \delta_{ij} \operatorname{Spur}(\bar{\epsilon})\bar{\lambda} \right]^2}. \quad (3.35)$$

Eine Normierung mit dem Effektivwert RMS des Spannungstensors

$$\sigma^{\text{rms}} = \sqrt{\frac{1}{6} \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^j \bar{\sigma}_{ij}^2} \quad (3.36)$$

ergibt die relative Abweichung

$$e^{\text{rel}} := \frac{e^{\text{rms}}}{\sigma^{\text{rms}}}. \quad (3.37)$$

Dieses Fehlermaß wird als Indikator für die Qualität der approximierten Lösung verwendet und damit als Maß dafür, wie zutreffend die Annahme einer isotropen effektiven Steifigkeit ist. Eine Validierung des vorgestellten Homogenisierungsansatzes im Hinblick auf das Eshelby-Problem mit einfacher Inhomogenität findet sich in Abschnitt 5.2.1.

4 Simulation alternder flüssiger Schäume

4.1 Setup für die Generierung flüssiger Schäume

In diesem Abschnitt wird die Konstruktion digitaler Modelle von Schaumstrukturen beschrieben. Diese Modelle dienen als Grundlage für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten numerischen Simulationen der Schaumalterung, die hauptsächlich durch zwei Prozesse bestimmt wird, nämlich durch das spontane Reißen von Filmen und den diffusiven Gastransfer zwischen Blasen. Zur digitalen Generierung von Schaumstrukturen mit vielfältigen Morphologien wird eine dreistufige Routine angewendet, die aus zwei algorithmischen Generierungsschritten und einem anschließenden Relaxationsschritt besteht. Simulationsaufnahmen einzelner Zeitschritte der Morphologieentwicklung sind in Abbildung 4.1 dargestellt. Die Generierungsroutinen liefern ein breites Spektrum struktureller Merkmale, insbesondere verschiedene verschiedene Blasengrößenverteilungen. Durch die Anwendung dieser Routinen werden die morphologischen und topologischen Eigenschaften realer Schaumstrukturen nachgebildet.

Als Simulationsgebiet für alle zweidimensionalen Simulationssetups dient ein quadratisches Gebiet mit quadratischer Zelldiskretisierung. Die Kantenlänge des Gebiets beträgt $N_x = N_y = 1400$ Gitterzellen. Der Schaum wird initial durch einen Satz von $N_B = 2025$ Gasblasen repräsentiert.

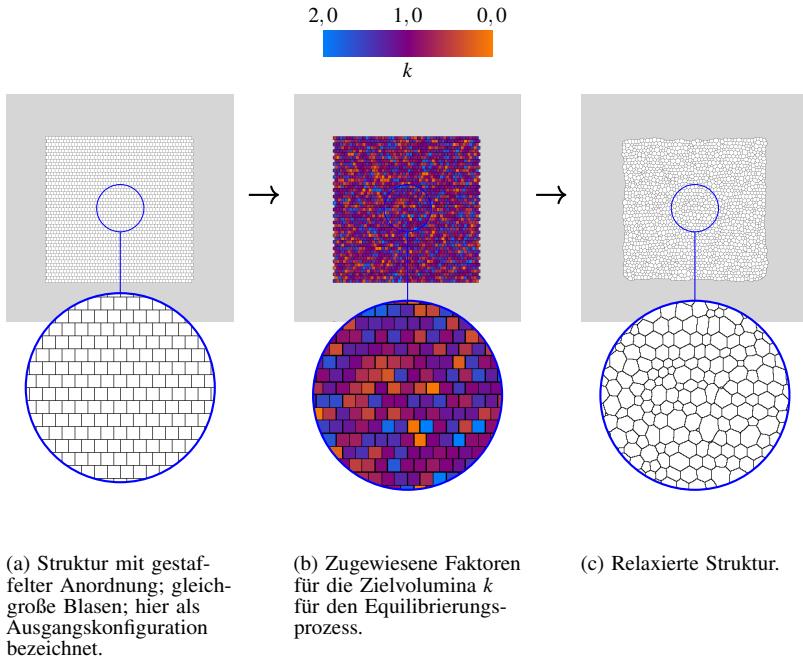


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung des dreistufigen Generierungsroutine für Schaumstrukturen inklusive des Equilibrierungsprozesses: (a) Vorläufige Anordnung des Blasenensembles. (b) Aufgeprägte Verteilung der Zielvolumina auf die Blasen. (c) Relaxierte Struktur im energetisch günstigen Zustand, erreicht durch Verringerung und Vergrößerung der Blasenvolumina. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

Im ersten Schritt der Generierungsroutine (Abbildung 4.1 (a)) werden die Blasen als Quadrate aus jeweils 400 Gitterzellen in einer gestaffelten Anordnung, einem Ziegelsteinmuster, angeordnet, um eine Ausgangskonfiguration zu erzeugen. Diese Blasen sind in eine flüssige Matrix eingebettet. Jede Blase sowie die flüssige Matrix wird durch einen eindeutigen Ordnungsparameter ϕ_α repräsentiert. Da die Blasen während der Simulation eine polyedrische Form annehmen, lässt sich ihre Größe am besten durch das Volumen bzw. die Fläche in 2D beschreiben, $V_\alpha = A_\alpha = \int_\Omega \phi_\alpha(\mathbf{x}) d\Omega$. Der Fokus dieser Arbeit liegt auf trockenem Schaum, bei dem die Gasphase den größten Teil des Volumens ausmacht. In diesem Grenzfall eines trockenen Schaums sind die Schaumfilme im Vergleich zur Blasengröße

vernachlässigbar klein und werden dahingehend genähert, dass sie keine Flüssigkeit enthalten. Die flüssigen Filme, die das Gas zwischen zwei Gaszellen trennen, werden implizit durch die Position der Isolinie $\phi_\alpha = 0,5$ definiert.

Im zweiten Schritt (Abbildung 4.1 (b)) werden vorgegebene Verteilungen auf die Blasengrößen aufgeprägt, um durch eine stochastische Transformation eine Unordnung in der Morphologie einzuführen. Dies erfolgt durch Manipulation einzelner Blasen. Dazu wird der Wert des Zielvolumens V jeder Blase mit einem Faktor k multipliziert, der aus einer Normalverteilung $k \sim \mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$, $\mu = 1$, mit der Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{1}{2} \left(\frac{x-\mu}{\sigma}\right)^2\right),$$

entnommen wird. Dabei werden ausschließlich positive Werte berücksichtigt, indem eine Grenze implementiert wird und die Verteilung de facto bei Null abgeschnitten wird, um negative Werte für V zu vermeiden.

Im dritten Schritt (Abbildung 4.1 (c)) muss die erzeugte vorläufige Struktur in einen energetisch günstigen Gleichgewichtszustand relaxieren, um die Initialkonfiguration für die Zerfallsimulationen zu bilden. Für den Relaxationsschritt wird Gleichung (3.11) numerisch auf einem kartesischen Gitter gelöst. Der in Kapitel 3 vorgestellte Formalismus gewährleistet die Einhaltung des idealen Gasgesetzes, indem ein konstantes Produkt aus Druck und Zielvolumen $P_\alpha V_\alpha$ für jede einzelne Blase aufrechterhalten wird. Dies wird erreicht, indem der Beitrag der Oberflächenenergie zur gesamten freien Energie des Systems berücksichtigt wird, Gleichung (3.1). Folglich nehmen die Blasenvolumina während des Prozesses zu oder ab. Dadurch entsteht eine polydisperse Struktur während der Relaxation. Abbildung 4.2 stellt die freie Energie für den Equilibrierungsprozess dar und beschreibt so die Relaxation der Struktur in einen energetisch günstigen Zustand.

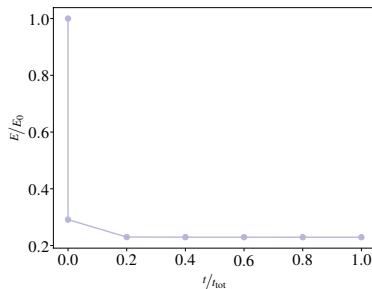


Abbildung 4.2: Entwicklung der freien Energie während des Equilibrierungsprozesses, normierte Werte. Gezeigt für eine exemplarische Struktur während der Relaxation. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

Für die in Abschnitt 4.2 präsentierten Simulationen des Schaumzerfalls dienen die erhaltenen Gleichgewichtszustände der Schaumstrukturen als Ausgangskonfigurationen. Dabei charakterisieren unterschiedliche Dispersitätsgrade eine Vielfalt initialer Schaumstrukturen, wodurch es möglich wird, Beziehungen von Unordnung zu strukturellen Eigenschaften abzuleiten. Um Konfigurationen mit unterschiedlicher Dispersität zu erzeugen, werden der vorläufigen Konfiguration verschiedene Sätze von Werten für die Volumina aufgeprägt, siehe Tabelle 4.1. Für diese Ausgangskonfigurationen kommen Normalverteilungen mit Standardabweichung σ und Variationskoeffizient $CV = \sigma/\mu$ zum Einsatz. Die Relaxation der Struktur führt über die zugewiesenen Zielvolumenfaktoren zu einer Unordnung in den Blasenvolumina. Das resultierende mittlere Volumen μ_V und die Standardabweichung σ_V sind ein Maß für diese Unordnung. Abbildung 4.3 veranschaulicht die Volumenverteilung des Blasenensembles für die fünf in Abbildung 4.4 dargestellten Anfangskonfigurationen. Die Morphologie der Strukturen variiert in Abhängigkeit von der Anfangsverteilung von V_α . Die Momentaufnahmen der Morphologie der erzeugten trockenen Schäume lassen eine erhebliche Variation in der Blasenstruktur erkennen. Neben der Blasengröße variieren auch die Blasenformen. Dies kann auf eine größere Streuung der Volumina und die Relaxation in eine energetisch günstige Konfiguration zurückgeführt werden. Bei höherer Unordnung treten Blasen mit abweichender Eckenzahl auf. Bei geringer Dispersität nehmen die Blasen eine unregelmäßige hexagonale Form an. Mit zunehmender Dispersität zeigt sich

Tabelle 4.1: Strukturelle Eigenschaften der Ausgangskonfigurationen der Schäume. Als Eingabeparameter werden Werte für den Variationskoeffizienten des Blasenvolumens, $CV_{in} = \sigma/\mu$, vorgegeben. Aus der Analyse des Gleichgewichtszustands des relaxierten Blasenensembles ergeben sich das mittlere Blasenvolumen μ_V und der resultierende Variationskoeffizient $CV_{res} = \sigma_V/\mu_V$. Die verschiedenen, unterschiedlich stark ungeordneten Strukturen sind wie gelistet bezeichnet. Eigene Tabelle; vorveröffentlicht in [99]; sprachlich angepasst.

CV_{in}	μ_V	σ_V	CV_{res}	Bezeichnung
0,00	382,73	7,93	0,02	σ_0
0,10	382,07	37,87	0,10	σ_1
0,20	382,90	74,52	0,19	σ_2
0,30	383,42	116,63	0,30	σ_3
0,40	372,88	154,71	0,42	σ_4

die Unordnung in der Struktur stärker, und Blasen mit einer abweichenden Anzahl an Kanten treten auf.

Für die Studie des Schaumzerfalls werden elf unterschiedliche Filmstabilitäten modelliert, indem die Wahrscheinlichkeit für das Reißen eines Filmes definiert wird. Dazu wird jedem Volumenelement eines Filmes eine spezifische Wahrscheinlichkeit Gleichung (3.13) zugewiesen, repräsentiert durch $p_i, i = 0, \dots, 10$. Diese Stabilitäten werden auf die fünf Ausgangskonfigurationen angewendet, die in Tabelle 4.1 und Abbildung 4.4 dargestellt sind. Es werden folglich insgesamt 55 verschiedene Schaumzerfallsprozesse simuliert, wie in Abbildung 4.5 skizziert. Durch diese Variation der Filmstabilität können unterschiedliche Zerfallsgeschwindigkeiten bzw. -raten modelliert werden. Um die dynamische Entwicklung des Schaums während des Zerfalls zu beschreiben, wird Gleichung (3.11) gelöst. Hierbei wird die Relaxation durch das Platzen von Schaumfilmen und die anschließende Blasenkoaleszenz lokal unterbrochen, was zu einer lokalen Störung des Relaxationsprozesses führt und verhindert, dass das System vollständig in einen energetisch günstigen Zustand übergeht. Zwischen den Koaleszenzereignissen entwickelt sich die Struktur durch Relaxation zu einem neuen Energieminimum. Gleichgewichtszustände werden während der dynamischen Simulation kaum erreicht. Abbildung 4.6 zeigt die Energie während des Zerfallsprozesses, also die dynamische Entwicklung des Schaums unter dem Einfluss der reißenden Filme.

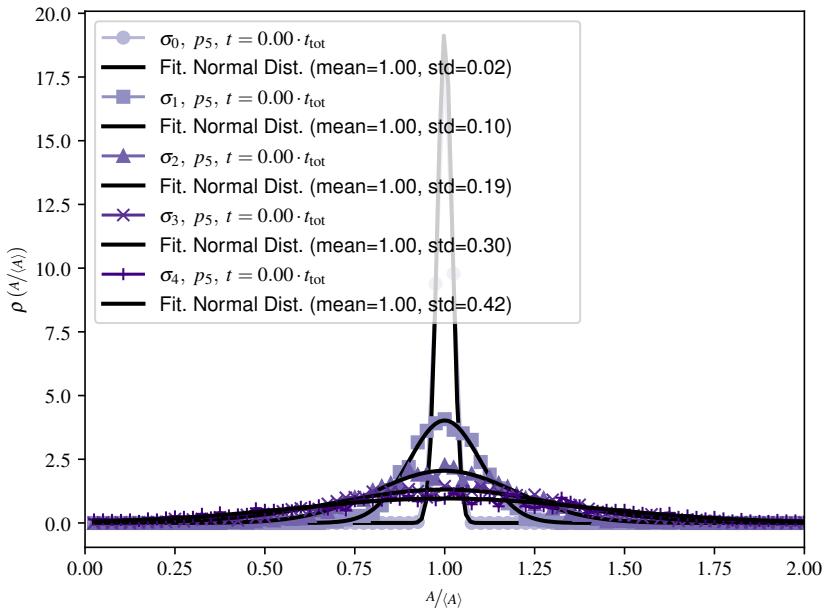


Abbildung 4.3: Charakterisierung des Blasenensembles. Blasengrößenverteilung verschiedener Anfangskonfigurationen $\sigma_0 - \sigma_4$, für die die Dispersität variiert. Blasenvolumen normiert mit mittlerem Blasenvolumen $\langle A \rangle$. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

4.2 Numerische Modellierung als Mittel zur Analyse und Vorhersage

In diesem Abschnitt werden die zentralen Fähigkeiten des numerischen Ansatzes herausgestellt. Diese umfassen sowohl einen Überblick zu den prädiktiven Möglichkeiten durch numerische Simulationen, als auch die Validierung des vorgestellten Modells zur Mikrostrukturentwicklung. Die als Teil des Softwarepaketes PACE3D implementierte Methode zielt darauf ab, die mikrostrukturelle Entwicklung zerfallender Schäume abzubilden, die durch das Reißen von Filmen und Koaleszenzereignissen sowie von diffusivem Gastransfer bestimmt wird. Sie

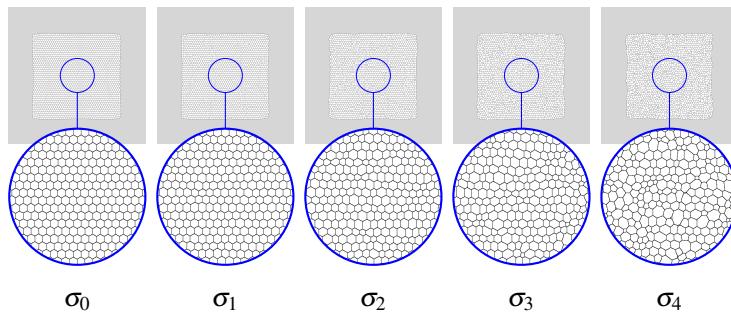


Abbildung 4.4: Schaumstrukturen mit variierender Dispersitt, die als Ausgangsstrukturen fr Zerfallsimulationen dienen. Dargestellt sind quasi-monodisperse (σ_0) und polydisperse Schaumstrukturen ($\sigma_1 - \sigma_4$) mit steigender Heterogenitt. Eigene Abbildung; vorverffentlicht in [99].

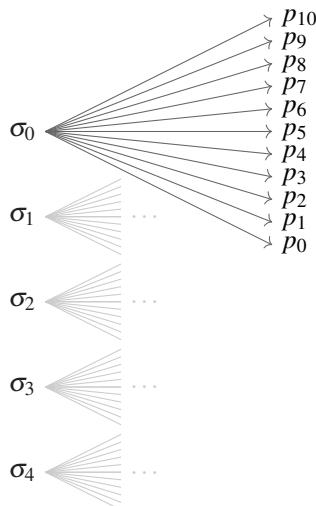
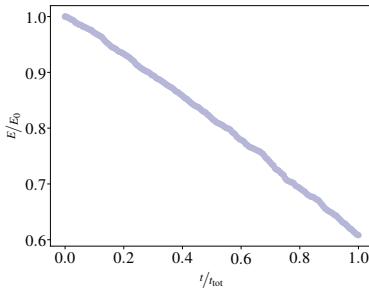
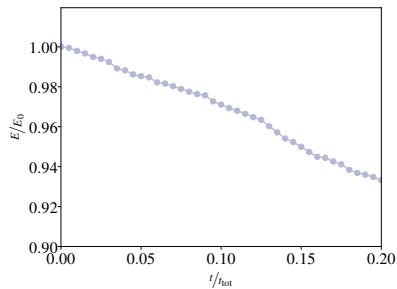


Abbildung 4.5: Skizze aller im Rahmen der Studie durchgefhrten Simulationen des Schaumzerfalls. Ausgehend von fnf Strukturen mit unterschiedlicher Dispersitt ($\sigma_0 - \sigma_4$) werden Simulationen fr jeweils elf verschiedene Filmstabilitten durchgefhrt, $p_0 - p_{10}$. Eigene Abbildung; vorverffentlicht in [99].



(a) Freie Energie über Zeit.



(b) Detail von (a).

Abbildung 4.6: Entwicklung der freien Energie während des Zerfallsprozesses, beispielhaft gezeigt für Struktur σ_2 und Wahrscheinlichkeit für das Reißen von Filmen p_5 (mittel). Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

eignet sich besonders für eine systematische Untersuchung verschiedener Schaumgeometrien mittels umfangreicher Parameterstudien und demonstriert so in der Anwendung ihre Vielseitigkeit. Durch den Zugang zu einem breiten Spektrum struktureller Eigenschaften eröffnet die Methode neue Möglichkeiten, komplexe Phänomene, die in Schäumen auftreten, mithilfe von Simulationen und Auswertungen zu verstehen. Eine detaillierte Einführung in die numerische Methode findet sich in Kapitel 3. Der Überblick an dieser Stelle stellt den Zusammenhang her, um die Relevanz für die in diesem Abschnitt präsentierten Ergebnisse zu unterstreichen.

Der Kern der Studie liegt in der Einführung und Validierung des hergeleiteten Modells zur Mikrostrukturentwicklung mittels numerischer Simulationen. Der Einsatz einer Phasenfeldmethode ermöglicht es, die dynamische Entwicklung eines Schaums unter Berücksichtigung spontan reißender Schaumfilme und der Koaleszenz von Blasen sowie von Vergrößerungsprozessen abzubilden. Die Studie ermöglicht den Zugang zu vier zentralen Aspekten präzise abgebildeter Schäume.

1. Die Methode berücksichtigt inhärent den Gasdruck innerhalb der Blasen, was zu einer detaillierten Abbildung eines Schaums beiträgt.

2. Die vorgestellten Routinen erlauben die digitale Generierung vielfältiger Schaumstrukturen, die sich jeweils durch einzigartige morphologische Merkmale und unterschiedliche Grade an Ordnung in den Blasengrößen auszeichnen.
3. Das Modell umfasst eine variable Wahrscheinlichkeit für das Reißen von Schaumfilmen, die unterschiedliche Stabilitäten modelliert und verschiedene Zerfallsraten abbildet. Das Reißen von Filmen treibt strukturelle Veränderungen an, die der dynamischen Natur der Mikrostrukturentwicklung entsprechen.
4. Der vorgestellte Ansatz zeichnet sich dadurch aus, die komplexen morphologischen und topologischen Eigenschaften von Schaumstrukturen zu bestimmen. Indem digital erzeugte Schaumstrukturen Simulationen des Zerfallss durchlaufen, lässt sich der Einfluss der Schaumgeometrie und der Wahrscheinlichkeit für das Reißen einzelner Filme auf die Gesamtstruktur des Schaums ermitteln.

Die vielseitige Anwendbarkeit der Methode zur Simulation von Ensembles mehrerer tausend Blasen ermöglicht die Untersuchung statistischer Eigenschaften von Schäumen basierend auf Charakteristika auf der Skala einzelner Blasen und Schaumfilme. Empirische Daten aus den Simulationen etablieren skalenübergreifend Wechselwirkungen verschiedener Parameter und belegen die logische Kohärenz und Gültigkeit des Modells. Der numerischen Ansatz zeichnet sich durch seine Effizienz bei der Mikrostruktursimulation aus, wodurch er für großskalige Anwendungen geeignet ist. Seine Fähigkeit, große Schaumgebiete zu simulieren, ermöglicht den Zugang zu Mustern, die aus dem kollektiven Verhalten einzelner Blasen entstehen, und zeigt sich als besonders nützlich für die Untersuchung statistischer Eigenschaften von Schäumen. Die Ergebnisse aus den numerischen Experimenten bieten sowohl visuelle als auch quantitative Einblicke in die zeitliche Entwicklung des Schaumzerfalls. Eine statistische Analyse vertieft das Verständnis der Wechselwirkungen zwischen mikrostrukturellen Parametern.

Zur Charakterisierung der Mikrostruktur liegt der Fokus auf verschiedenen Parametern: Volumen der Blasen, Gasdruck, Form der Blasen hinsichtlich Kanten und Nachbarschaftsbeziehungen. Die vorliegende Untersuchung dient einem doppelten Zweck. Sie ermöglicht es, die Fähigkeit des Modells zu Vorhersagen der Mikrostruktur umfassend zu bewerten und definiert die Grenzen seiner Anwendbarkeit.

Der folgende Abschnitt widmet sich der statistischen Analyse der Mikrostrukturentwicklung von Schäumen. Die probabilistischen Dynamiken des Zerfalls beeinflussen das Zusammenspiel verschiedener Parameter. Durch die effektive Integration des Filmreißens stellt das vorliegende Framework ein leistungsstarkes Werkzeug dar, um Einblicke in das komplexe Verhalten von zerfallenden flüssigen Schaumstrukturen zu gewinnen. Das vorgestellte Modell für die Mikrostrukturentwicklung ermöglicht eine systematische Korrelation von Prozessen auf verschiedenen Längenskalen, indem stochastische Filmrisse auf der Mikroebene mit empirischen Beobachtungen des gesamten makroskopischen Blasenensembles verknüpft werden. Dies wird anhand einer Reihe von Schäumen mit unterschiedlichen morphologischen Eigenschaften in simulierten Zerfallsexperimenten getestet.

4.3 Validierung: Stabilisierung einer einzelnen Gasblase

Um die in Abschnitt Kapitel 3 beschriebene Methode zu validieren, werden hier Ergebnisse numerischer Simulationen einer Blase in einer Flüssigkeit präsentiert und die Fähigkeit der Methode evaluiert, den Gasdruck im Gleichgewichtszustand präzise vorherzusagen. Das Simulationssetup für die Validierung besteht aus einer inkompressiblen Flüssigkeitsmatrix mit einer eingebetteten kompressiblen Gasblase unter Annahme eines idealen Gases. Zur Initialisierung der Simulationen wird ein Satz von Konfigurationen generiert. Jede dieser Konfigurationen wird auf einem Gebiet untersucht, das durch quadratische Zellen diskretisiert ist, und es gilt $\varepsilon = 3$. Dabei werden die Gasblase und die Flüssigkeit jeweils als Phase definiert.

Der Ordnungsparameter ϕ_α beschreibt die Gasblase und ϕ_β die Flüssigkeit. Um einen repräsentativen Parameterraum abzudecken und die Anwendbarkeit der Methode auf verschiedene Szenarien sicherzustellen, werden sowohl der initiale Blasenradius r_0 als auch die Oberflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ systematisch variiert. Durch Oberflächenminimierung relaxiert das System in ein energetisches Minimum und erreicht durch diesen Equilibrierungsprozess einen stabilen Zustand. Dieser ist durch ein Gleichgewicht zwischen den durch Gasdruck und Oberflächenspannung bedingten Kräften charakterisiert. Anhand der Gleichgewichtskonfiguration werden der numerisch berechnete Gasdruck der Blase $P_{\text{eq.}}$ und der Druck der flüssigen Matrix P_0 als methodeninhärente Größen bestimmt. Für die gesamte Reihe der Simulationen nimmt der Druck der Flüssigkeit konstante Werte von $P_0 = 1$ an. Die Druckdifferenz zwischen Blase und Matrix $\Delta P = P_{\text{eq.}} - P_0$ dient als zentrales Kriterium zur Validierung der Genauigkeit der Methode. Diese berechneten Druckdifferenzen werden mit der analytischen Lösung verglichen, die sich aus der Young-Laplace-Gleichung ergibt. Der theoretische Druckunterschied für $d \in \{2, 3\}$ Dimensionen ist gegeben durch

$$\Delta P = \frac{\gamma_{\alpha\beta}}{r_{\text{eq.}}} (d - 1). \quad (4.1)$$

Abbildung 4.7 vergleicht die berechneten Druckdifferenzen mit den theoretischen Werten für ein zweidimensionales Setup. Die Validierungsergebnisse zeigen eine Übereinstimmung zwischen berechneten und theoretischen Druckdifferenzen über verschiedene Blasenvolumina und Oberflächenenergien hinweg. Geringfügige Abweichungen bei großen reziproken Radien lassen sich auf die numerische Auflösung zurückführen. Insgesamt demonstrieren die Ergebnisse die Eignung der Methode, das Verhalten von Gasblasen als ideales Gas in einer flüssigen Matrix zu simulieren. Um die Stabilität der Methode bei der Anwendung auf Schäume zu gewährleisten, beschränken sich die in dieser Arbeit vorgestellten Untersuchungen auf Blasengrößen innerhalb eines angemessenen Bereichs.

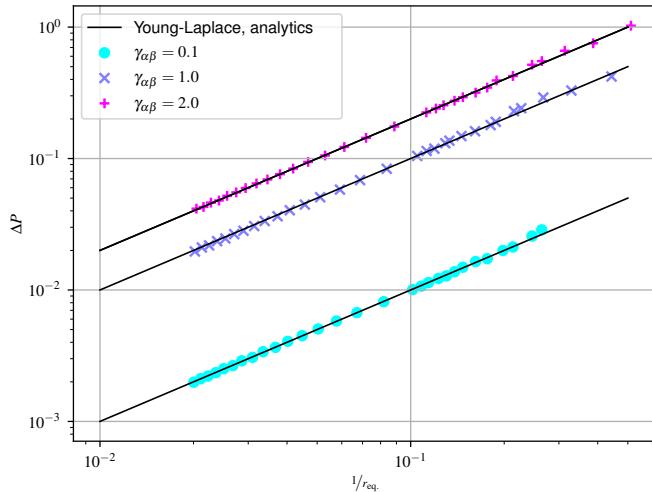


Abbildung 4.7: Druckdifferenz ΔP als Funktion des reziproken Radius r_{eq} einer in einer flüssigen Matrix eingebetteten Blase im Gleichgewicht. Die Daten zeigen Ergebnisse für drei verschiedene Werte der Oberflächenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ in einem zweidimensionalen Setup. Die schwarze Linie stellt die Lösung dar, die sich aus der theoretischen Young-Laplace-Gleichung ergibt. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

4.4 Vorhersage der Mikrostrukturentwicklung (Koaleszenz)

Dieser Abschnitt analysiert die Mikrostrukturentwicklung zerfallender Schaumstrukturen im Grenzfall trockener Schäume und umfasst sowohl eine visuelle Darstellung der Simulationsstudien als auch eine statistische Charakterisierung. Die Untersuchung beginnt mit einer visuellen Dokumentation der dynamischen Entwicklung von Schaumstrukturen während des Zerfallsprozesses, wie beispielhaft in Abbildung 4.8 für eine mäßig ungeordnete Ausgangsmorphologie mit Dispersität σ_2 und einer mittleren Wahrscheinlichkeit für das Reißen von Filmen p_5 dargestellt. Beobachtungen der Morphologie ermöglichen es, die zeitliche Entwicklung des gesamten Blasenensembles nachzuverfolgen. Auf Basis dieser visuellen Bewertung lassen sich Strukturdynamiken erfassen, die dem Schaumzerfall

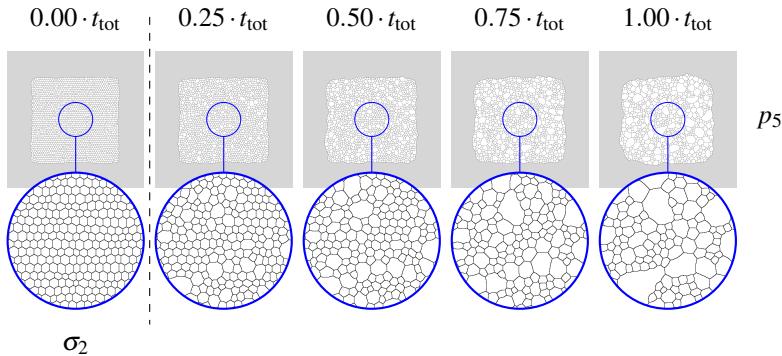


Abbildung 4.8: Serie von Einzelaufnahmen aus der Simulation, die die zeitliche Entwicklung des Blasenensemble zeigen. Die Morphologie ist für eine mäßig ungeordnete Anfangsstruktur mit Dispersität σ_2 und mittlerer Wahrscheinlichkeit für das Reißen von Filmen p_5 dargestellt. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

zugrunde liegen. Unterschiedliche mikrostrukturelle und physikalische Parameter beeinflussen die Ausbildung der Struktur sowohl in statischen als auch in dynamischen Konfigurationen. Die Untersuchung der Auswirkungen verschiedener Wahrscheinlichkeiten für das Filmplatzen zeigt charakteristische Veränderungen in der Morphologie des Schaums über die Zeit. Als Grundlage für diese Studie dient ein konsistentes initiales Setup. Abbildung 4.9 stellt grafisch die zeitlichen Verläufe dar, die drei verschiedenen Wahrscheinlichkeiten des Filmplatzens entsprechen. Dies bildet unterschiedliche Zerfallsraten ab, für die Unterschiede in den Blasengrößen und der Musterbildung deutlich werden. Ein Zugriff auf diese morphologischen Veränderungen erfolgt auch in experimentellen Untersuchungen. Um den Einfluss der Wahrscheinlichkeit des Filmplatzens auf die Dynamik des Schaumzerfalls zu untersuchen, werden in dieser Studie Variationen dieses Parameters durchgeführt.

Bei hohen Platzwahrscheinlichkeiten kommt es zur Bildung von unkonventionellen Blasenformen. Niedrigere Platzwahrscheinlichkeiten begünstigen dagegen eine allmähliche Entwicklung, die eine Relaxierung der Schaumstruktur ermöglicht. Dieser Kontrast unterstreicht das Zusammenspiel zwischen der Platzwahrscheinlichkeit und der sich entfaltenden Dynamik der Schaumentwicklung. Die

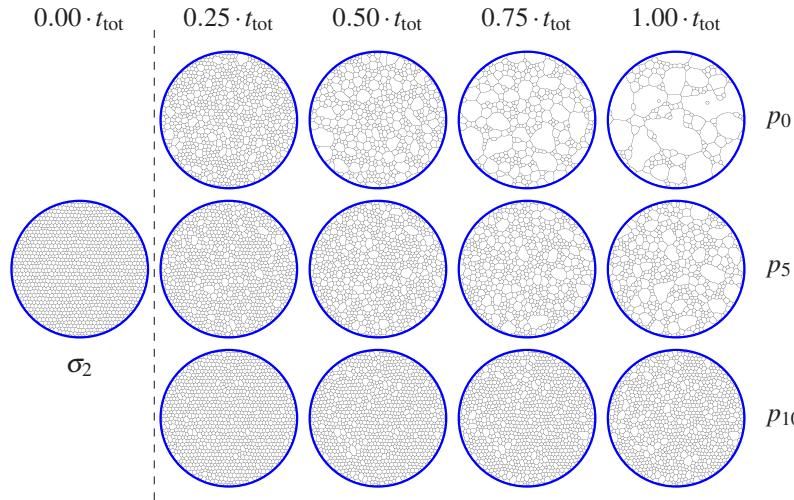


Abbildung 4.9: Serie von Simulationssnapshots, die die zeitliche Entwicklung des Blasenensembles zeigen. Die Morphologie ist für die Anfangsstruktur σ_2 dargestellt, mit drei verschiedenen Wahrscheinlichkeiten für das Reißen von Filmen, p_0 (hoch), p_5 (mittel) und p_{10} (niedrig). Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

Platzwahrscheinlichkeit lässt sich flexibel wählen, was eine präzise Kalibrierung der Zerfallsrate ermöglicht. Der Einfluss variierender Ausgangskonfigurationen (verschiedene Dispersitäten) auf die Schaummorphologie zeigt sich unter gleicher Filmplatzwahrscheinlichkeit, siehe Abbildung 4.10. Die simulierten Zerfallsprozesse weisen eine hohe Ähnlichkeit auf, wobei lediglich geringe Unterschiede zwischen den gewählten Strukturen visuell erkennbar sind. Variierende Startkonfigurationen und Dispersitäten scheinen die morphologische Entwicklung nur marginal zu beeinflussen.

Strukturen mit größerer Dispersität weisen eine höhere Inhomogenität der Filmlängen auf. Die Wahrscheinlichkeit für das Reißen eines Films hängt mit der Filmlänge zusammen. So zeigen Filme unterschiedlicher Länge abweichende Platzwahrscheinlichkeiten. Damit entspricht die Variation der Filmlänge einer

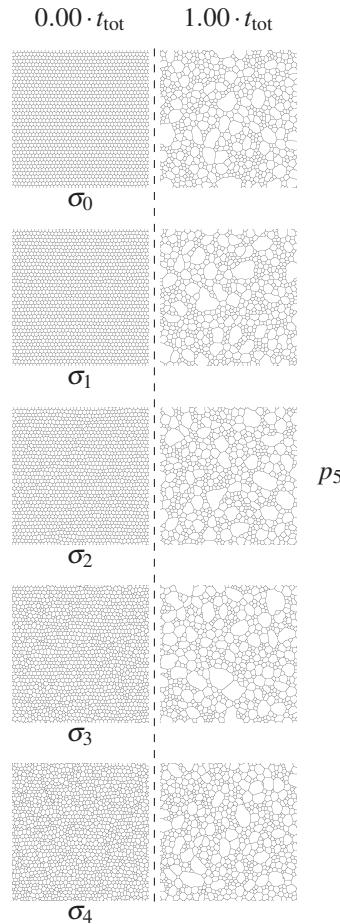


Abbildung 4.10: Zeitliche Entwicklung des Blasenensembles. Die Morphologie ist für variierende Anfangsdispersitäten bei gleicher mittlerer Wahrscheinlichkeit für das Reißen von Filmen, p_5 , dargestellt. Snapshots zeigen die Anfangskonfigurationen (erste Spalte) und die Konfigurationen am Ende der Simulation (zweite Spalte). Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

variierenden Platzwahrscheinlichkeit für den gesamten Film. Dieser Zusammenhang unterstreicht die Bedeutung der Filmlänge als entscheidenden Faktor für das dynamische Verhalten und die Entwicklung des Schaums.

4.5 Statistische Charakterisierung von Mikrostrukturparametern

4.5.1 Datenanalyse

Eine detaillierte statistische Analyse der mikrostrukturellen Parameter ergänzt die visuelle Untersuchung, um die innere Struktur des Schaums und seine dynamischen Eigenschaften zu verstehen. Diese Struktur wird durch Blasenvolumen, Gasdruck, Blasenform und Nachbarschaftsbeziehungen charakterisiert, die jeweils unterschiedlich auf Variationen der Wahrscheinlichkeiten für das Reißen von Filmen und Anfangskonfigurationen ansprechen. Daher konzentrieren sich die Analysen auf diese wesentlichen Eigenschaften. Die Anwendung statistischer Methoden ermöglicht es zudem, Trends und charakteristische Kurven abzuleiten, um die zeitliche Entwicklung systematisch zu analysieren.

4.5.2 Zerfallsdynamik von Schäumen

Die statistische Analyse offenbart Tendenzen in der zeitlichen Entwicklung des Blasenensembles, wobei diese durch die Anzahl der Blasen quantifiziert wird. Diese Untersuchung ermöglicht es, den Einfluss variierender Wahrscheinlichkeiten für das Platzen von Filmen und unterschiedlicher Ordnungsgrade in der Schaumstruktur zu identifizieren. Die zeitliche Entwicklung der Blasenanzahl dient als Maß für die Zerfallsrate. Abbildung 4.11 zeigt die Anzahl der Blasen in Abhängigkeit von der Zeit während der Simulation des Zerfalls für die Struktur σ_2 . Die Blasenanzahl nimmt monoton mit der Zeit ab, wobei die Steigung für verschiedene Wahrscheinlichkeiten variiert; je höher die Wahrscheinlichkeit, desto schneller

die Abnahme. Der Verlauf ist nicht linear, wobei die schnellere Reduktion der Blasenanzahl zu Beginn des Prozesses auf einen beschleunigten Zerfall hindeutet. Ein ähnliches Verhalten lässt sich für Strukturen mit unterschiedlich dispersen Ausgangskonfigurationen beobachten. Die einzelnen Verläufe variieren aufgrund der probabilistischen Natur des Algorithmus und aufgrund von unterschiedlich ungeordneten Konfigurationen, die während der Simulation erreicht werden. Im

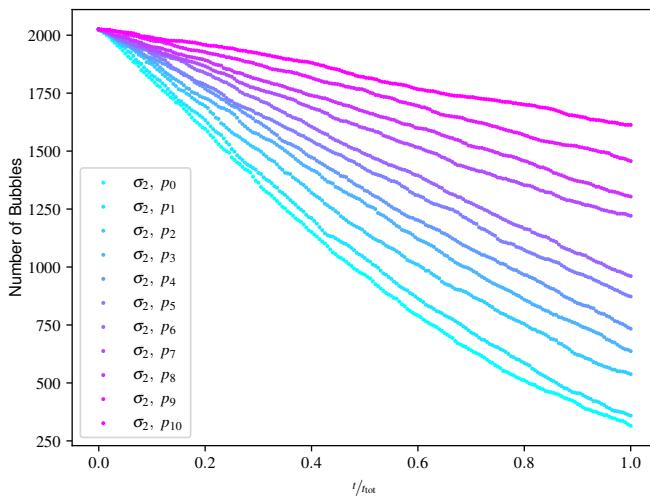


Abbildung 4.11: Zeitliche Entwicklung des Blasenensembles. Gezeigt die zeitabhängige Anzahl der Blasen unter parametrischer Variation der Wahrscheinlichkeit für das Platzen von Filmen p_n , exemplarisch für die Ausgangskonfiguration σ_2 . Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

Verlauf der Zerfallssimulation wird der Einfluss der Ausgangskonfiguration anhand der Entwicklung der Blasenanzahl deutlich, siehe Abbildung 4.12. Zwischen Strukturen mit unterschiedlichen Graden initialer Ordnung variiert die Zerfallsrate merklich, obwohl die Wahrscheinlichkeit für das Reißen eines Filmes pro Volumenelement konstant bleibt. Innerhalb der gewählten Simulationsreihe bleiben in stark ungeordneten Strukturen mehr Blasen über einen längeren Zeitraum erhalten. Im Vergleich dazu existieren bei Strukturen mit geringeren Unordnungsgraden nur

marginale Unterschiede, und der Einfluss des Unordnungsgrades ist nicht messbar. Angesichts dieser Beobachtungen erweist sich die Analyse zusätzlicher aussage-

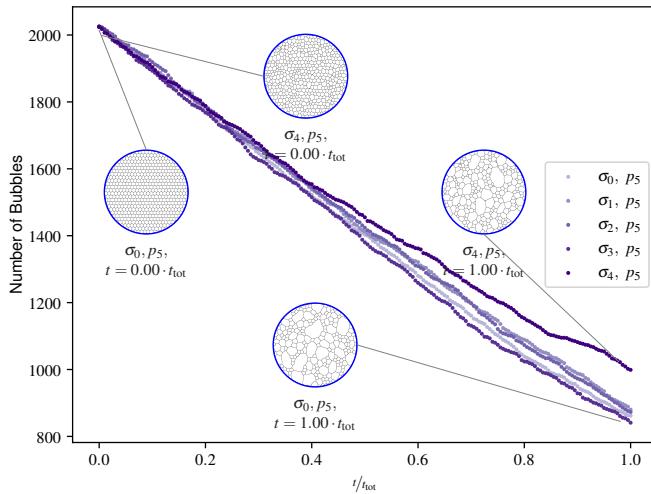


Abbildung 4.12: Entwicklung unterschiedlich dispergierter Ausgangsstrukturen bei gleicher mittlerer Wahrscheinlichkeit für das Platzen von Filmen p_5 , mit dem Resultat unterschiedlicher Zerfallsraten. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

kräftiger Parameter als empfehlenswert, um potenziell deutlichere Variationen in den Einflussfaktoren zu identifizieren und zu quantifizieren.

4.5.3 Blasenvolumen und -verteilung

Die statistische Analyse der Blasenvolumina dient dazu, die Schaummorphologie quantitativ zu beschreiben und ermöglicht so, die Mikrostruktur des Schaumes zu bewerten. Anhand von Volumenverteilungen und Mittelwerten wird der Einfluss unterschiedlicher Wahrscheinlichkeiten für das Reißen von Filmen und Anfangskonfigurationen auf die Schaumstruktur deutlich. Ein zentraler Aspekt der Analyse ist die zeitliche Entwicklung des mittleren Blasenvolumens. Dieses

ergibt sich aus der Anzahl der vorhandenen Blasen $N(t)$ zum Zeitpunkt t gemäß $\langle A \rangle = \frac{1}{N(t)} \sum_{\alpha=1}^{N(t)} A_{\alpha}$. Die in Abbildung 4.13 dargestellte Entwicklung weist verschiedene Charakteristika auf, die durch unterschiedliche Wahrscheinlichkeiten für das Reißen von Filmen bedingt sind. Das mittlere Blasenvolumen nimmt mit der Zeit zu, wobei dieser Anstieg bei höheren Wahrscheinlichkeiten für das Reißen von Filmen stärker ausgeprägt ist. Mit fortschreitendem Zerfallsprozess zeigt sich ein zunehmend stärkerer Anstieg des mittleren Blasenvolumens. Eine

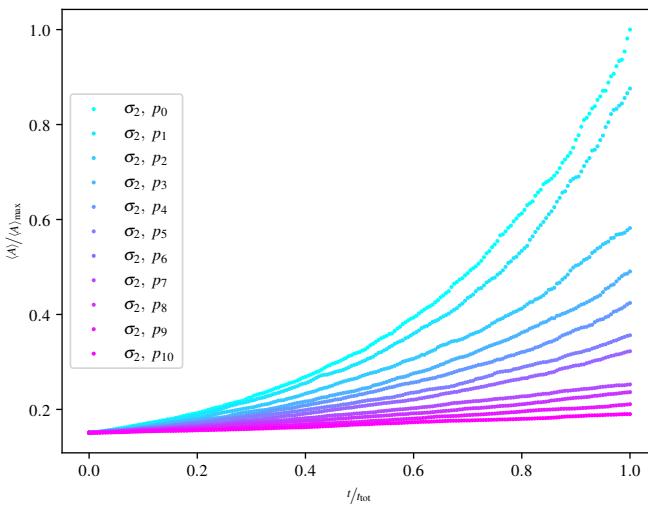


Abbildung 4.13: Entwicklung des Blasenensembles mit der Zeit. Zeitabhängige mittlere Blasenvolumina der Ensembles sind unter parametrischer Variation der Filmplatzwahrscheinlichkeit p_n für die Ausgangsstruktur σ_2 dargestellt. Das mittlere Volumen ist auf das maximale mittlere Volumen normiert. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

detaillierte Analyse der Schaummorphologie basiert auf der zeitlichen Entwicklung der Volumenverteilung der Blasen. Dazu wird zu verschiedenen Zeitpunkten des Zerfallsprozesses die zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung der Volumina des Blasenensembles betrachtet, wie in Abbildung 4.14 dargestellt. Im Verlauf nimmt nicht nur das mittlere Volumen des Blasenensembles zu, auch weitere Trends zeichnen sich ab. Der Anstieg des mittleren Blasenvolumens ist

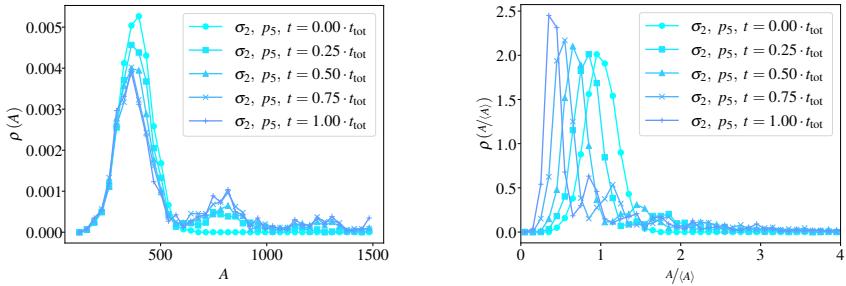


Abbildung 4.14: Entwicklung der Blasenvolumina für die Ausgangsstruktur σ_2 unter einer mittleren Filmplatzwahrscheinlichkeit p_5 . Das Ensemble ist zu verschiedenen Zeitschritten während der Evolution charakterisiert, wobei Absolutwerte für das Volumen A und auf das mittlere Volumen normierte Werte gezeigt sind, $A/\langle A \rangle$. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

begleitet von einer allmählichen Verbreiterung und Abflachung der Verteilung der Volumina, Abbildung 4.14, was auf eine Veränderung der Morphologie hinweist. Die Anzahl von Blasen mit großem Volumen nimmt zu, da das kontinuierliche Reißen von Filmen und die Koaleszenz von Blasen zu einer Volumenzunahme führen. Die Peaks konzentrieren sich tendenziell auf ganzzahlige Vielfache des Ausgangsvolumens. Diese beobachtete Verdopplung der Volumina steht in Zusammenhang mit den Koaleszenzeignissen. Zur standardisierten Bewertung der Größenvariationen innerhalb des Schaumensembles dient das auf das mittlere Volumen normierte Blasenvolumen, wie dargestellt in Abbildung 4.13. Diese Normierung erleichtert es, Trends in der Verteilungsform zu erkennen, die mit dem Blasenwachstum zusammenhängen. Anhand dieser Verteilung zeigt sich eine graduelle Verschiebung der Peaks zu kleineren Werten, was für einen sich entwickelnden Schaum zu erwarten ist. Diese Verschiebung bedeutet also, dass sich die Blasengrößen insgesamt zu größeren Werten hin ausweiten. Eine weiterführende Analyse der Blasengrößenverteilung zu verschiedenen Zeitpunkten ergänzt das Verständnis der Schaumdynamik in Abhängigkeit von variierenden Wahrscheinlichkeiten für das Platzen von Filmen. Dabei zeigen sich signifikante Unterschiede in der Blasenvolumenverteilung zu verschiedenen Zeitschritten für Schäume mit unterschiedlicher Filmstabilität. Abbildung 4.15 veranschaulicht den Vergleich der Volumenverteilungen für die gleiche Ausgangskonfiguration von σ_4 , während

Abbildung 4.16 die Entwicklung für die Ausgangskonfiguration von σ_2 gegenüberstellt. Die Verteilungen der Blasenvolumina zu einem bestimmten Zeitpunkt unterscheiden sich in Abhängigkeit von der Wahrscheinlichkeit für das Platzen.

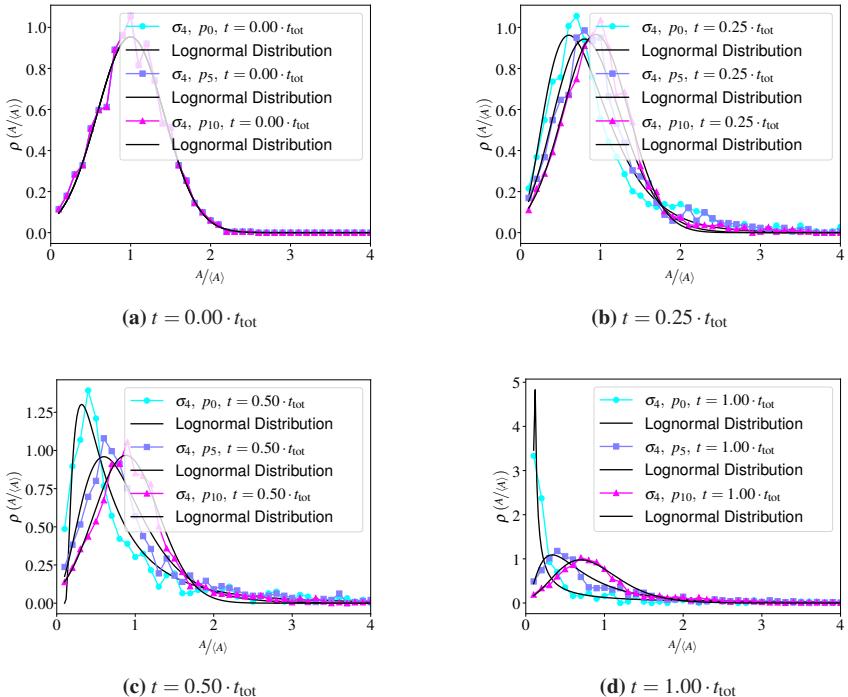


Abbildung 4.15: Vergleich der Volumenverteilungen bei konstanter initialer Dispersität der heterogenen Struktur σ_4 für drei verschiedene Platzwahrscheinlichkeiten: hoch p_0 , mittel p_5 , niedrig p_{10} . Die Teilabbildungen (a) – (d) zeigen die Wahrscheinlichkeitsdichte des normierten Blasenvolumens $A/Ā$ zu vier verschiedenen Zeitpunkten. Ein Fit auf eine logarithmische Normalverteilung ist als Orientierungshilfe enthalten. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

Die in den Abbildungen zu festen Zeitschritten dargestellte zeitliche Entwicklung zeigt eine differenzierte Dynamik. Je nach Filmplatzwahrscheinlichkeit divergieren die Peaks und flachen in unterschiedlichem Maße ab. Blasenensembles mit höherer Platzwahrscheinlichkeit weisen im Vergleich zu solchen mit niedrigerer

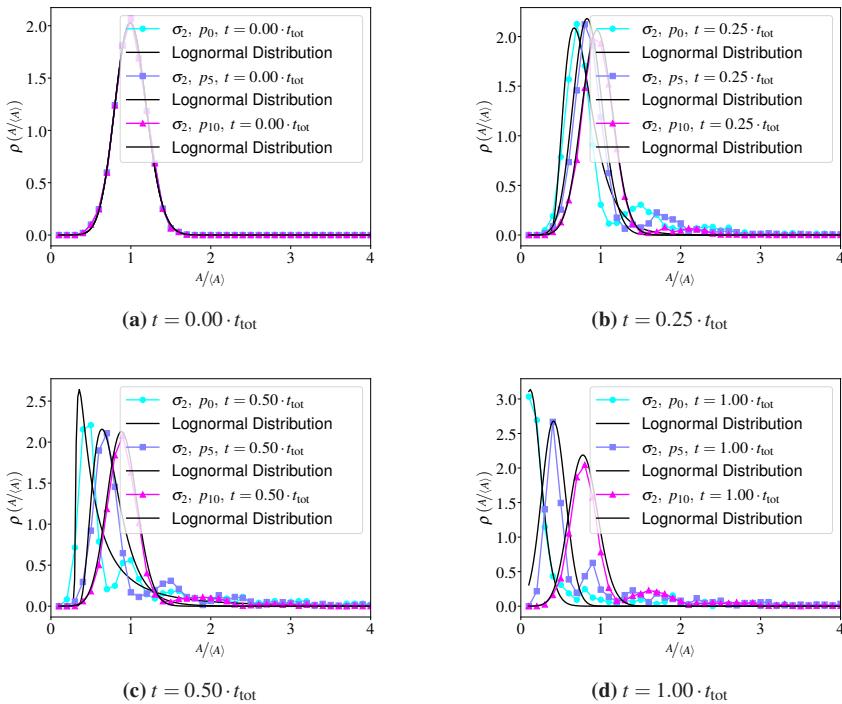
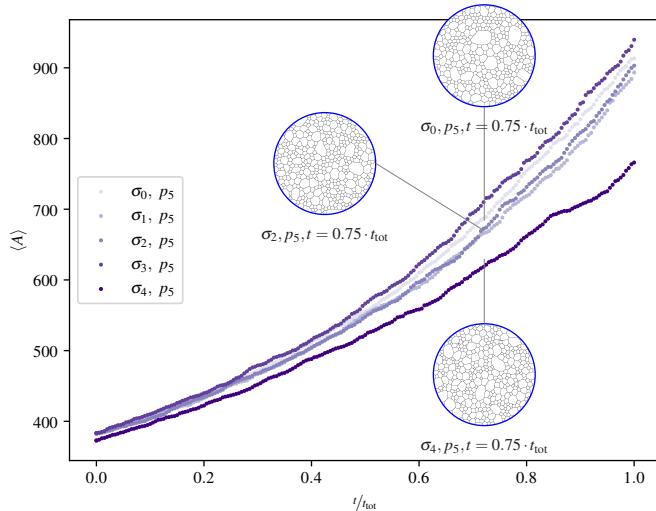


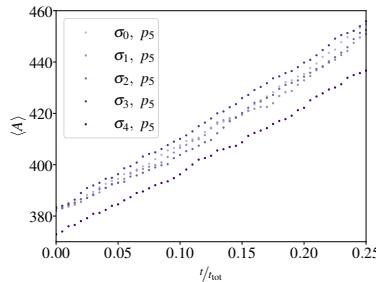
Abbildung 4.16: Vergleich der Volumenverteilungen bei konstanter initialer Dispersität der heterogenen Struktur σ_2 für drei verschiedene Platzwahrscheinlichkeiten: hoch p_0 , mittel p_5 , niedrig p_{10} . Die Teilabbildungen (a) – (d) zeigen die Wahrscheinlichkeitsdichte des normierten Blasenvolumens $A/\langle A \rangle$ zu vier verschiedenen Zeitpunkten. Ein Fit auf eine logarithmische Normalverteilung ist als Orientierungshilfe enthalten. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

Wahrscheinlichkeit vergrößerte mittlere Volumina auf. In der Verteilung geht eine höhere Platzwahrscheinlichkeit mit einer Verschiebung des Peaks zu kleineren Werten einher. Diese Beobachtungen verdeutlichen, wie stark die Struktur des Schaumes auf Veränderungen in der Wahrscheinlichkeit des Filmplatzens reagiert.

Der Vergleich des Zerfalls für verschiedene Ausgangskonfigurationen ermöglicht es, deren Einfluss auf das mittlere Blasenvolumen zu analysieren. Abbildung 4.17 stellt dies für die Platzwahrscheinlichkeit von p_5 dar. Die Entwicklung verläuft für alle untersuchten Strukturen weitgehend ähnlich und zeigt einen Anstieg des mittleren Blasenvolumens mit der Zeit. Bei der Ausgangskonfiguration mit der höchsten Dispersität σ_4 fällt jedoch ein Unterschied auf. Das mittlere Blasenvolumen weist niedrigere Werte auf und ihr Verlauf zeigt eine geringere Steigung. Für die anderen Konfigurationen mit niedrigerer Dispersität lässt sich kein eindeutiger Einfluss auf die Entwicklung der Blasenvolumina feststellen. Diese Abweichung unterstreicht, dass das System bei hohen Unordnungsgraden in der Ausgangskonfiguration besonders stark von den Anfangsbedingungen beeinflusst wird. Die stark ungeordnete Startkonfiguration prägt maßgeblich die nachfolgende Dynamik des Blasenensembles. Im Gegensatz dazu zeigen sich für Konfigurationen mit geringerer Dispersität vernachlässigbare Auswirkungen auf den weiteren Verlauf. Für eine detaillierte Analyse der Blasenvolumina bei Strukturen mit variablen Grad an Unordnung bietet Abbildung 4.18 einen Überblick über die Volumenverteilungen zu verschiedenen Zeitpunkten. Strukturen mit geringer Dispersität zeigen ausgeprägte Peaks bei ganzzahligen Vielfachen des initialen mittleren Volumens (Abbildung 4.3), wohingegen Strukturen mit mittlerer und hoher Dispersität ein Abflachen dieser Peaks aufweisen. In Strukturen mit geringer Dispersität und damit einheitlichen Blasengrößen führt ein reißender Film und das damit verbundene Koaleszenzereignis oft zu einer Verdopplung des resultierenden Blasenvolumens. Im Gegensatz dazu ist bei stark dispergierten Strukturen mit variierenden Blasengrößen die resultierende Volumenzunahme weniger vorhersehbar, da heterogene Größen unterschiedlich zum Endvolumen beitragen. Dies verdeutlicht den Einfluss der Dispersität auf strukturelle Merkmale und offenbart das Zusammenspiel zwischen Unordnung und Reorganisation während der Entwicklung.

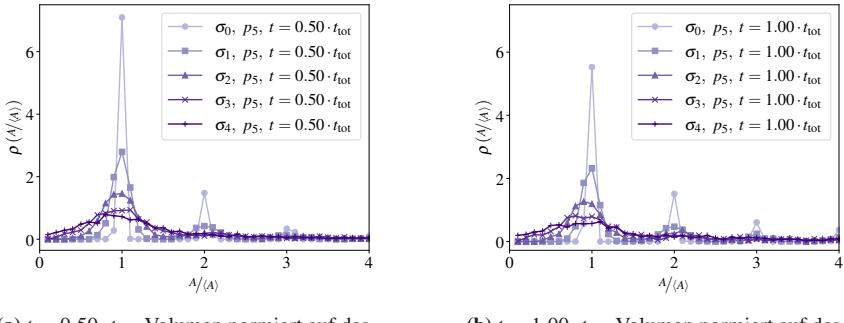


(a) Vollständige Zeitreihe.



(b) Detail von (a).

Abbildung 4.17: Entwicklung des Blasenensembles mit der Zeit. Zeitabhängige mittlere Blasenvolumina $\langle A \rangle$ für fünf verschiedene Ausgangskonfigurationen mit Dispersitäten $\sigma_0 - \sigma_4$. Die Filmplatzwahrscheinlichkeit ist mittel, p_5 . Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].



(a) $t = 0.50 \cdot t_{\text{tot}}$, Volumen normiert auf das mittlere Volumen, $\langle A \rangle$.

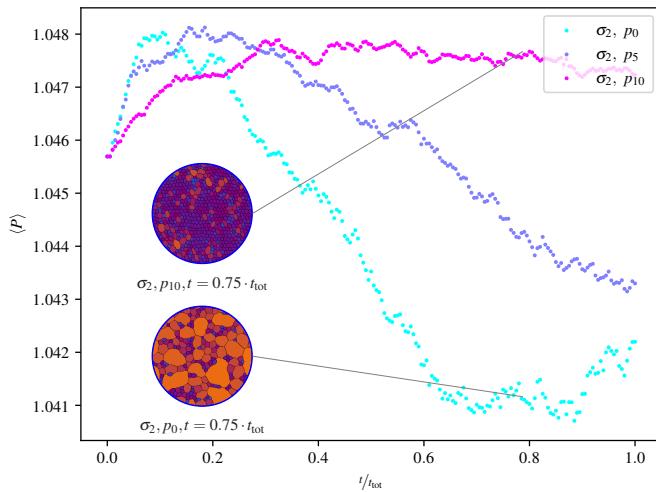
(b) $t = 1.00 \cdot t_{\text{tot}}$, Volumen normiert auf das mittlere Volumen, $\langle A \rangle$.

Abbildung 4.18: Charakterisierung des Blasenensembles. Blasenvolumenverteilung verschiedener Ausgangskonfigurationen mit Dispersität $\sigma_0 - \sigma_4$ bei fester mittlerer Platzwahrscheinlichkeit p_5 . Analyse des Blasenvolumens zu zwei verschiedenen Zeitpunkten während der Entwicklung. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

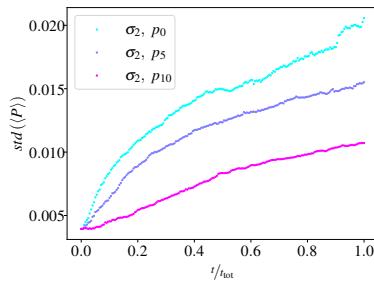
4.5.4 Gasdruck und Druckfeld

Die Untersuchung des Gasdrucks innerhalb der Blasen ermöglicht Einblicke in die Charakteristika des sich entwickelnden Schaums, die mit dem Grad an Ordnung der Struktur einhergehen. Hier gewähren Simulationsergebnisse Zugang zu Druckvariationen einzelner Blasen sowie des gesamten evolvierenden Schaums. Die in Kapitel 3 vorgestellte Methodik zeichnet sich dadurch aus, dass sie den Gasdruck innerhalb der einzelnen Blasen in jedem Zeitschritt berechnet, und dabei das Verhalten als ideales Gas berücksichtigt. Diese Werte für den Druck werden während der gesamten Simulation kontinuierlich aktualisiert, wodurch ein Druckfeld mitgehalten wird, das das gesamte Blasenensemble umfasst. Die Methode ermöglicht einen direkten Einblick in den Druck einzelner Blasen des Ensembles, ohne dass komplexe zusätzliche Berechnungsmethoden erforderlich sind. Es sei angemerkt, dass sich die Struktur nach der Initialisierung der Simulation mit einer aufgeprägten Druckverteilung relaxiert, siehe Abschnitt 4.1. Im Verlauf der Zerfallssimulation gewährleistet die Methode Druckwerte gemäß dem idealen Gasgesetz. Abbildung 4.19 stellt die Analyse des Gasdrucks für die exemplarische Struktur σ_2 mit parametrisch varierter Platzwahrscheinlichkeit dar.

Während der gesamten Simulation bleibt der mittlere Gasdruck in den Blasen nahezu konstant, was der Methode inhärent ist. Allerdings lassen sich im zeitlichen Verlauf in Abbildung 4.19a geringfügige Schwankungen erkennen. Es ist anzunehmen, dass diese Schwankungen durch lokale Störungen infolge reißender Filme entstehen, da diese von anschließende Neuordnungen und Relaxationen in lokale Energieminima begleitet sind. Der leichte Gesamt Rückgang, der mit hoher und mittlerer Platzwahrscheinlichkeit einhergeht, spiegelt wider, dass das Blasenensemble zu einer sphärischen Form tendiert, was mit der Entwicklung hin zu einem energetischen Minimum verbunden ist. Bei niedriger Platzwahrscheinlichkeit ist dieser Rückgang im analysierten Simulationszeitraum nicht erkennbar. In Abbildung 4.19b zeigt die Standardabweichung des mittleren Gasdrucks innerhalb der Schaumblasen einen starken Anstieg über den beobachteten Zeitraum. Diese erhebliche Zunahme der Standardabweichung tritt auf, obwohl die gemessenen absoluten Werte des mittleren Gasdrucks während über den gesamten Simulationszeitraum hinweg nur geringfügig schwanken. Der Anstieg in der Breite der Verteilung des Gasdrucks deutet auf eine zunehmende Heterogenität in der Druckverteilung der Blasen im zeitlichen Verlauf hin. Dies impliziert, dass bei relativ stabilem mittleren Druck die Streuung der einzelnen Druckwerte der Blasen ausgeprägter wird, was aus der zugrundeliegenden Dynamik und Strukturbildung im Schaum resultiert. Der stärkste Anstieg ist für die Entwicklung unter höchster Platzwahrscheinlichkeit der Filme zu erkennen. Hier kommt es zu einer Vervierfachung. Bei geringeren Platzwahrscheinlichkeiten fällt der Anstieg weniger ausgeprägt aus. Abbildung 4.20 stellt die zeitliche Entwicklung für unterschiedlich geordnete Ausgangsstrukturen mit gleicher Platzwahrscheinlichkeit dar. Im zeitlichen Verlauf weisen diese Strukturen ähnliche Charakteristika auf. Zunächst erfolgt ein leichter Anstieg des Drucks, dem sich insgesamt ein Abfall des Drucks anschließt. Bemerkenswert ist dabei, dass die Struktur mit der höchsten Unordnung, repräsentiert durch σ_4 , die am wenigsten gleichmäßige Entwicklung aufweist. Das Auftreten von Sprüngen im Druck für diese Konfiguration lässt sich auf die Koaleszenz von Paaren aus großen und kleinen Blasen zurückführen, die ausgeprägtere Relaxationsdynamiken zur Folge haben.



(a) Mittlerer Gasdruck.



(b) Standardabweichung von (a).

Abbildung 4.19: Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks in den Blasen. Ensemblewerte für die Schaumstruktur σ_2 , variierte Wahrscheinlichkeit für das Platzen von Filmen. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

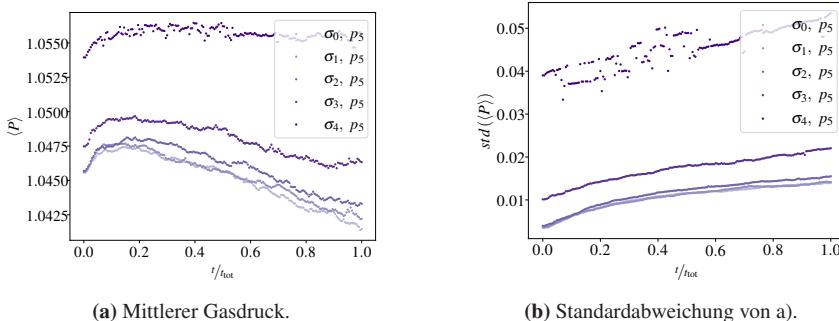


Abbildung 4.20: Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks in den Blasen. Ensemblewerte für Schaumstrukturen mit unterschiedlichem Grad an Ordnung. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

Die in Abbildung 4.20b dargestellte Standardabweichung veranschaulicht die zeitliche Entwicklung verschiedener Ausgangsstrukturen mit unterschiedlichen Ordnungsgraden, jedoch bei identischer Filmplatzwahrscheinlichkeit. Strukturen mit geringer initialer Dispersität zeichnen sich durch einen gleichmäßigen Verlauf aus, wobei die Standardabweichung im Laufe der Zeit nur geringfügig zunimmt. Dies deutet auf eine relativ homogene Druckverteilung in den Blasen innerhalb dieser geordneten Strukturen hin. Strukturen mit hoher anfänglicher Dispersität hingegen zeigen initial erhöhte Standardabweichungen, was auf eine ausgeprägte Heterogenität der Druckverteilung innerhalb des Blasenensembles hindeutet. Diese Schwankungen treten vermutlich in Zeitschritten auf, in denen ein oder mehrere Filmplatz- und Koaleszenzereignisse stattfanden und die Struktur noch nicht in einen lokalen Energieminimumzustand relaxiert ist. Mit fortschreitender Zeit stabilisieren sich diese Schwankungen jedoch, was auf eine Konvergenz zu einer einheitlicheren Druckverteilung innerhalb der Schaumstruktur hinweist. Neben der Betrachtung von Ensemblewerten ist die Druckvariation innerhalb des Ensembles von besonderem Interesse. Die verwendete Methode ermöglicht eine präzise Analyse der Druckwerte einzelner Blasen. Für fünf verschiedene Zeitschritte wird in Abbildung 4.21 eine detaillierte Analyse der Gasdruckverteilungen der Blasen gezeigt. Die sich entwickelnde Struktur weist zu Beginn des Zerfallsprozesses eine nahezu symmetrische Verteilung der Druckwerte auf, während die Verteilung im

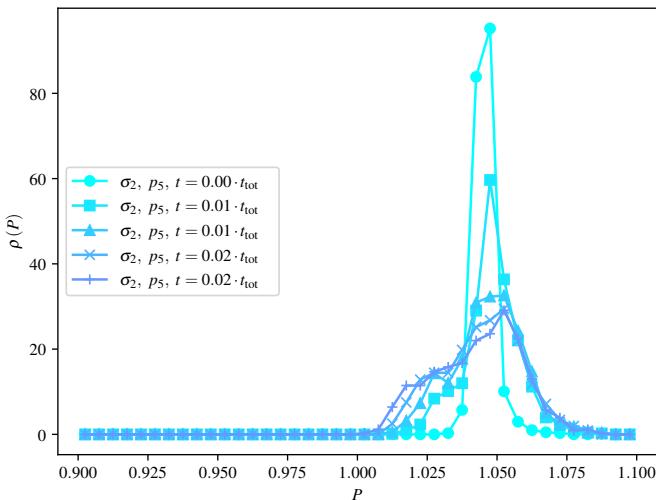


Abbildung 4.21: Verteilung des Gasdrucks der Blasen zu verschiedenen Zeitpunkten der Schaumentwicklung. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

zeitlichen Verlauf asymmetrischer wird. Neben der allgemeinen Verbreiterung und Abflachung der Verteilung treten Blasen mit geringerem Druck häufiger auf. Diese Entwicklung des Ensembles steht im Einklang mit der in Abbildung 4.14 analysierten Volumenentwicklung, bei der eine Zunahme größerer Blasen beobachtet wird. Dies entspricht dem idealen Gasgesetz, das für jede Blase ein konstantes Produkt aus Druck und Volumen ($P \cdot V$) gewährleistet.

Die Druckverteilung im Blasenensemble für die Ausgangskonfiguration σ_2 ist in Abbildung 4.22a für drei unterschiedliche Filmplatzwahrscheinlichkeiten zum spezifischen Zeitpunkt $t = 1,00 \cdot t_{\text{tot}}$ dargestellt. Bei niedriger Platzwahrscheinlichkeit p_{10} bleibt die Verteilung weitgehend symmetrisch und weist nur eine leichte Asymmetrie für kleinere Werte auf. In diesem Fall ist nur eine relativ geringe Anzahl von Filmen gerissen. Die höchste Platzwahrscheinlichkeit p_0 führt zur markantesten Abweichung von der initial vorwiegend symmetrischen Verteilung. Hierbei verschiebt sich ein erheblicher Teil der Werte in Richtung niedrigeren

Drucks. Diese Verschiebung resultiert aus der erhöhten Anzahl geplatzter Schaumfilme, die eine Zunahme von Blasen mit größerem Volumen bewirkt. Gemäß dem idealen Gasgesetz korreliert dies mit der Tendenz zu niedrigeren Druckwerten. Um die Unterschiede zwischen verschiedenen dispergierten Strukturen genauer zu charakterisieren, stellt Abbildung 4.22b die Druckverteilung für die mittlere Filmplatzwahrscheinlichkeit p_5 zum Zeitpunkt $t = 1,00 \cdot t_{\text{tot}}$ dar. Dabei werden geringfügige Abweichungen in den Verteilungen erkennbar. Bei den Strukturen

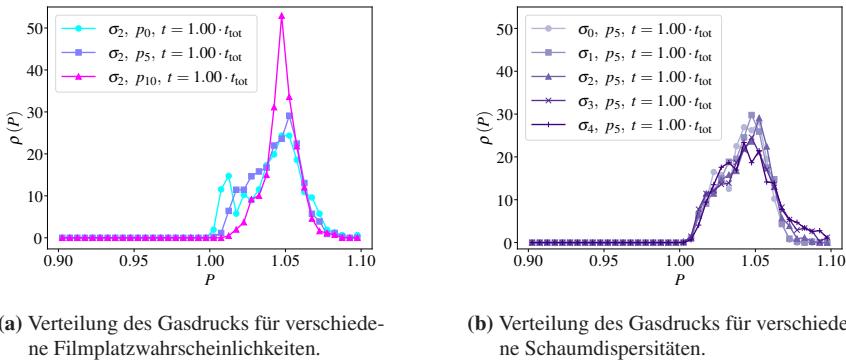


Abbildung 4.22: Analyse des Gasdrucks in Blasen für verschiedene Schwerpunkte zu ausgewählten Zeitpunkten der Entwicklung. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

mit höherem Grad an Ordnung, die durch eine geringe initiale Dispersität gekennzeichnet sind, zeigt die Verteilung vorwiegend symmetrische Eigenschaften, weist jedoch eine leichte Schiefe zu niedrigeren Werten hin auf. Mit zunehmender Dispersität lässt sich eine stärker ausgeprägte Abflachung und Verbreiterung der Verteilung beobachten. Es treten also vermehrt Blasen mit höherem Gasdruck auf. Dies verdeutlicht, dass der Einfluss der initialen Dispersität während der gesamten Simulation erkennbar bleibt. Zu Beginn existiert eine breitere Spanne von Volumina und folglich auch Gasdrücken, was einen nachhaltigen Einfluss auf die Simulationsdynamik ausübt.

4.5.5 Blasenformen

Die statistische Charakterisierung der Blasenformen, insbesondere durch das Merkmal der Kantenanzahl, bietet einen umfassenden Einblick in die sich verändernde Schaumgeometrie. Diese Analyse ermöglicht es, das Zusammenspiel zwischen der lokalen Topologie auf der Ebene einzelner Blasen und der Gesamtstruktur in Abhängigkeit von variierenden Parametern zu verstehen. Für die hier untersuchten Schäume im Grenzfall trockener Schäume sind die Blasen dicht gepackt und in direktem Kontakt miteinander. Die Anzahl der Kanten ergibt sich dabei aus der Anzahl der unmittelbaren Nachbarn.

Die zeitliche Entwicklung für eine Ausgangskonfiguration unter dem Einfluss dreier unterschiedlicher Filmplatzwahrscheinlichkeiten ist in Abbildung 4.23 veranschaulicht. In jedem der drei untersuchten Zerfallsprozesse verschiebt sich die mittlere Kantenanzahl einer einzelnen Blase mit fortschreitender Schaumentwicklung zu kleineren Werten. Die Entwicklung für Schäume unter geringer Platzwahrscheinlichkeit verläuft langsam, die Anzahl ändert sich also nur geringfügig. Im Gegensatz dazu zeigt sich bei hoher Platzwahrscheinlichkeit p_0 eine ausgeprägte Abnahme der Kantenanzahl. Es sei angemerkt, dass die Werte für die mittlere Kantenanzahl durch Blasen an den Rändern des Clusters, die in die Berechnung des Mittelwerts einfließen, leicht verringert werden. Diese Blasen haben naturgemäß weniger benachbarte Blasen und somit weniger Kanten. Darüber hinaus erstreckt sich die Untersuchung auf die Kantenanzahl jeder Blase in Abhängigkeit von der initialen Dispersität, siehe Abbildung 4.24. In den frühen Stadien der Entwicklung weisen Blasen in der relativ stark ungeordneten Struktur σ_4 tendenziell eine geringere Kantenanzahl auf als jene in vergleichsweise geordneten Strukturen. In späteren Stadien der Entwicklung hingegen zeigen die Schäume zunehmend vergleichbares Verhalten. Unterschiede in der mittleren Kantenanzahl für die verschiedenen Strukturen werden weniger deutlich. Die zeitliche Entwicklung der Verteilungsbreite verdeutlicht zudem dieses Verhalten, wie in Abbildung 4.24b ersichtlich. In frühen Entwicklungsstadien zeigen sich für die Strukturen unterschiedlich dispergierte Ausgangskonfigurationen deutlich unterscheidbare Standardabweichungen. Mit fortschreitender Zeit nähern sich

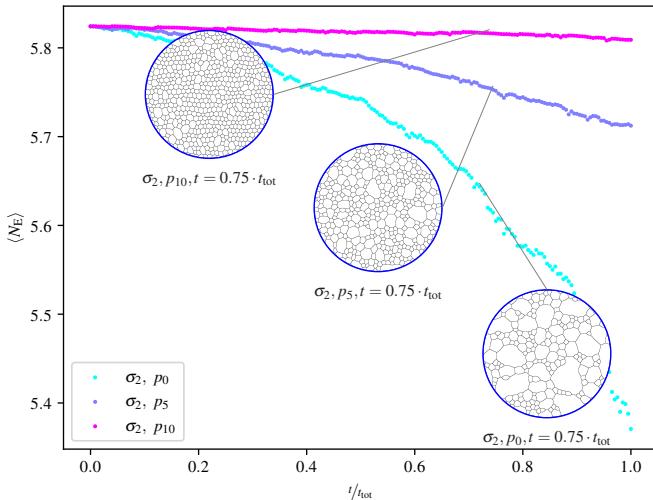


Abbildung 4.23: Zeitliche Entwicklung der mittleren Anzahl von Blasenkanten für eine Ausgangsdispersität und drei verschiedene Filmplatzwahrscheinlichkeiten. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

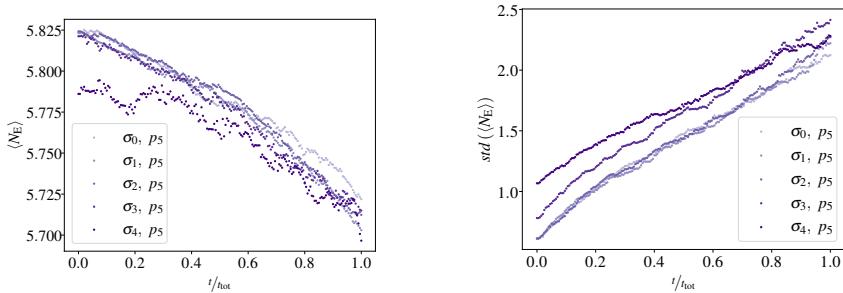
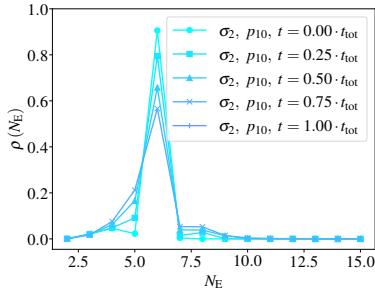


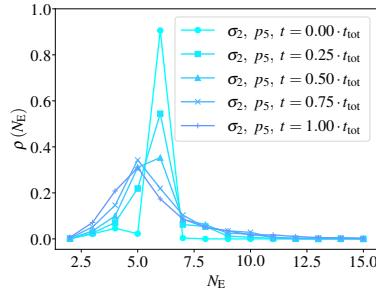
Abbildung 4.24: Zeitliche Entwicklung der Blasenkanten für verschiedene Ausgangsdispersitäten. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

diese Werte einander an und werden weniger unterscheidbar. Im untersuchten Parameterbereich hat die Dispersität des Schaumes nur einen geringfügigen Einfluss auf die Kantenanzahl der Blasen. Abbildung 4.25 zeigt die Verteilung der Anzahl an Kanten für ausgewählte Zeitschritte während der Entwicklung der Ausgangskonfiguration σ_2 unter drei verschiedenen Filmplatzwahrscheinlichkeiten. Wie zu erwarten bei einem sich entwickelnden Schaum mit mittlerer initialer struktureller Unordnung besitzen die meisten Blasen anfangs sechs Kanten, wobei die Verteilung relativ eng ist. Im zeitlichen Verlauf verschieben sich die Maxima der Verteilung zu kleineren Werten. Dabei lässt sich eine Zunahme von $\rho(N_E)$ für $N_E < 5$ und eine Abnahme für $N_E > 5$ beobachten. Blasen mit fünf Kanten ($N_E = 5$) zeigen ein abweichendes Verhalten: zunächst einen Anstieg, gefolgt von einer Abnahme. In späteren Stadien dominieren vierseitige Blasen. Aufgrund ihrer geringen statistischen Relevanz werden Blasen mit einer hohen Kantenanzahl ($N_E > 8$) nicht in die Interpretation einbezogen. Bei hoher Platzwahrscheinlichkeit wird der Übergang am deutlichsten sichtbar und neigt zu einer homogeneren Verteilung. Abbildung 4.25d veranschaulicht die Daten für die Ausgangskonfiguration σ_4 , die als repräsentatives Beispiel für eine Struktur mit erhöhtem Grad an Unordnung dient. Im Vergleich zu Abbildung 4.25b macht sich ein Einfluss der Ausgangsstruktur auf die Gesamtverteilung der Kantenanzahlen im Verlauf der zeitlichen Entwicklung bemerkbar.

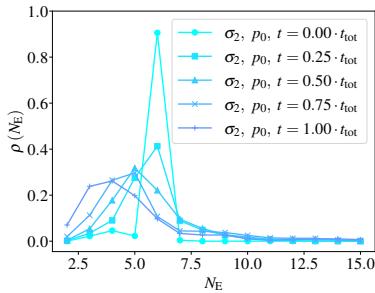
Abbildung 4.26 illustriert die zeitliche Entwicklung der Kantenanzahl für $3 \leq N_E \leq 8$ in zwei unterschiedlich dispergierten Ausgangsstrukturen bei identischer mittlerer Filmplatzwahrscheinlichkeit. Die Daten repräsentieren die Wahrscheinlichkeit, dass eine zufällig ausgewählte Blase N_E Kanten aufweist. Hinsichtlich der zeitlichen Entwicklung der Struktur σ_2 , gezeigt in Abbildung 4.26a, wird die initial größte Anzahl von Blasen mit sechs Kanten sukzessive von jener mit fünf Kanten überholt. Mit fortschreitender Entwicklung nimmt der Anteil vierseitiger Blasen zu. Sowohl für fünf- als auch sechskantige Blasen zeigt sich anfänglich eine steilere Ab- und Zunahme der Häufigkeit, die sich im weiteren Verlauf abflacht. Blasen mit vier Kanten weisen hingegen ein gegenläufiges Entwicklungsmuster auf. Im Vergleich zu den in Abbildung 4.26b dargestellten Daten für Struktur σ_4 zeigt die Analyse, dass diese Veränderung der dominierenden Kantenanzahl zu



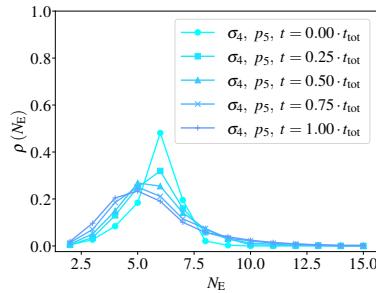
(a) Ausgangskonfiguration σ_2 , niedrige Filmplatzwahrscheinlichkeit p_{10} .



(b) Ausgangskonfiguration σ_2 , mittlere Filmplatzwahrscheinlichkeit p_5 .



(c) Ausgangskonfiguration σ_2 , hohe Filmplatzwahrscheinlichkeit p_0 .



(d) Ausgangskonfiguration σ_4 , mittlere Filmplatzwahrscheinlichkeit p_5 .

Abbildung 4.25: Verteilungen der Anzahl an Blasenkanten. Darstellung des zeitlichen Verlaufs für verschiedene Ausgangskonfigurationen und Filmplatzwahrscheinlichkeiten. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

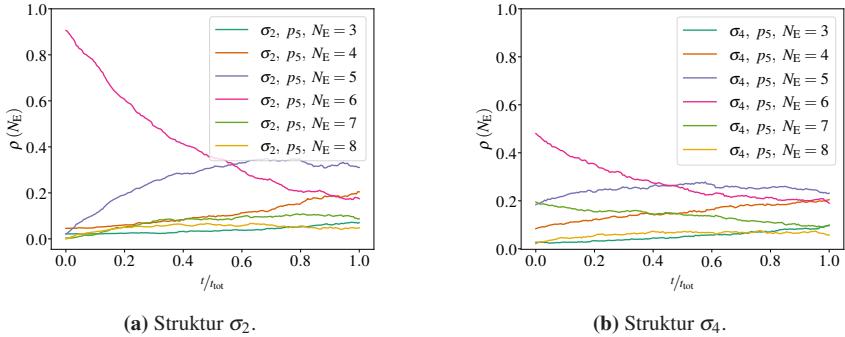


Abbildung 4.26: Details zur zeitlichen Entwicklung der Blasenkanten, aufgeschlüsselt nach dem Anteil der Blasen pro Kantenanzahl. Darstellung für zwei unterschiedliche Ausgangsdispersitäten der Struktur. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

unterschiedlichen Zeitpunkten erfolgen. Ferner verläuft die zeitliche Entwicklung der Kantenzahlen in der geordneteren Struktur gleichmäßiger, im Gegensatz zu den stärkeren Schwankungen, die bei Struktur σ_4 beobachtet werden. Diese Unterschiede implizieren, dass eine höhere initiale Dispersität mit stärker ausgeprägten Relaxationsprozessen einhergeht.

4.5.6 Verbindung und Abstand benachbarter Blasen

Die Analyse der Schaumkomplexität geht über die Bewertung der Kantenanzahl einzelner Blasen hinaus. Auch ist für zahlreiche Anwendungen von Schäumen das Verständnis der Konnektivität einzelner Blasen von Bedeutung. Das entwickelte Framework ermöglicht es, den Schwerpunkt jeder Blase und die Verbindungen der Schwerpunkte effizient zu erfassen, wodurch die Homogenität des Schaumes beurteilt werden kann. Häufig dienen die Dispersität der Blasenvolumina oder die Filmlänge als Indikatoren für die Homogenität. Als ergänzende Metrik wird hier der Abstand zwischen den Schwerpunkten benachbarter Blasen eingeführt, der ein umfassenderes Bild der Schaumkomplexität und -unordnung liefert.

Für die Simulationen mit Variation der Filmlatzwahrscheinlichkeit wird der mittlere Abstand von jeder einzelnen Blase zu ihren benachbarten Blasen, $\langle D \rangle$,

analysiert. Abbildung 4.27 veranschaulicht den zeitlichen Verlauf dieser Größe. Die beobachtete Entwicklung stimmt qualitativ mit den Trends überein, die für die Entwicklung der Blasenvolumina beobachtet werden, wie in Abbildung 4.13 dargestellt, wobei eine Beziehung über die Quadratwurzel angenommen wird. Abbildung 4.28 zeigt den Vergleich für Strukturen mit unterschiedlicher Ausgangsdispersität. In allen untersuchten Fällen steigt der mittlere Abstand der Schwerpunkte mit fortschreitendem Zerfall an. Diese Erkenntnisse stehen im

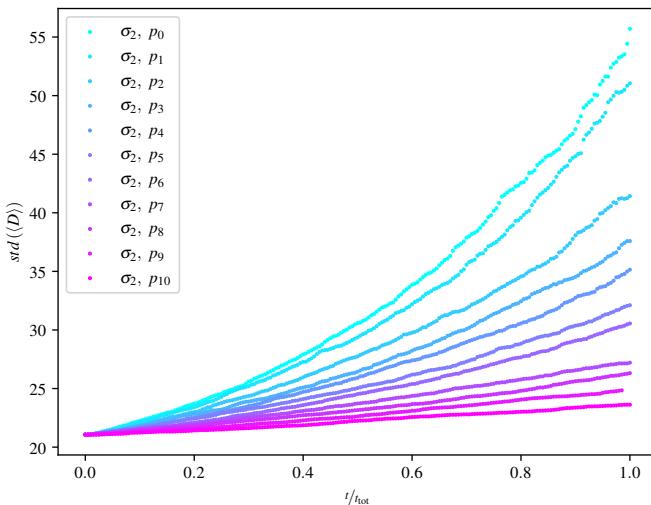
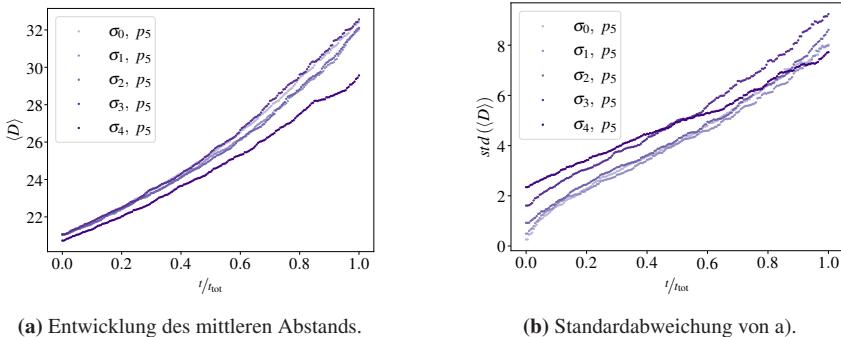


Abbildung 4.27: Entwicklung des mittleren Abstands zwischen benachbarten Blasen für eine Schaumdispersität bei variabler Filmplatzwahrscheinlichkeit. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

Einklang mit den vorgestellten Beobachtungen zur zeitlichen Entwicklung der Volumina. Allerdings lassen sich keine signifikanten Unterschiede für Schäume mit verschiedenen Ausgangsstrukturen feststellen, da innerhalb des untersuchten Parametersatzes keine eindeutige Differenzierung erkennbar ist.

Die Messung und Korrelation der Blasenfläche mit ihrer Kantenanzahl wurde als Metrik von Roth et al. [48] vorgeschlagen. Die vorliegende Arbeit greift dieses



(a) Entwicklung des mittleren Abstands.

(b) Standardabweichung von a).

Abbildung 4.28: Entwicklung des Abstands zwischen benachbarten Blasen für verschiedene strukturelle Dispersitäten bei gleicher Filmplatzwahrscheinlichkeit. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

Konzept auf und führt den auf der Kantenanzahl basierenden Parameter $\langle D_N \rangle$ ein. Dieser repräsentiert den mittleren Abstand zwischen dem Schwerpunkt einer Blase mit N Kanten und den Schwerpunkten ihrer Nachbarblasen. Es wird angenommen, dass der mittlere Abstand $\langle D_N \rangle$ in Abhängigkeit von N variiert.

Abbildung 4.29 zeigt die Abhängigkeit für drei unterschiedlich geordnete Strukturen zu einem identischen Zeitpunkt ihrer Entwicklung. Alle Daten sind auf den mittleren Abstand einer sechsseitigen Blase normiert. Wie erwartet korreliert der mittlere Abstand mit der Kantenanzahl der Blasen und steigt mit zunehmender Anzahl an Kanten N_E an.

In der homogensten Schaumstruktur σ_0 übersteigt der mittlere Abstand zu den Nachbarblasen jenen der inhomogeneren Strukturen deutlich. Im Gegensatz dazu weist die am stärksten ungeordnete Struktur σ_4 eine ausgeprägtere Abhängigkeit des mittleren Abstands von N_E auf, wobei der mittlere Abstand geringer ausfällt.

Über den gesamten Verlauf der Schaumentwicklung hinweg zeigt sich ein signifikanter Einfluss der initialen Dispersität auf die Dynamik innerhalb der untersuchten Strukturenensembles. Die Studie demonstriert, dass die vorgestellte Metrik den Einfluss struktureller Veränderungen auf die Homogenität im zeitlichen Verlauf quantifizierbar macht. Um das volle Potenzial dieser Metrik auszuschöpfen, sind

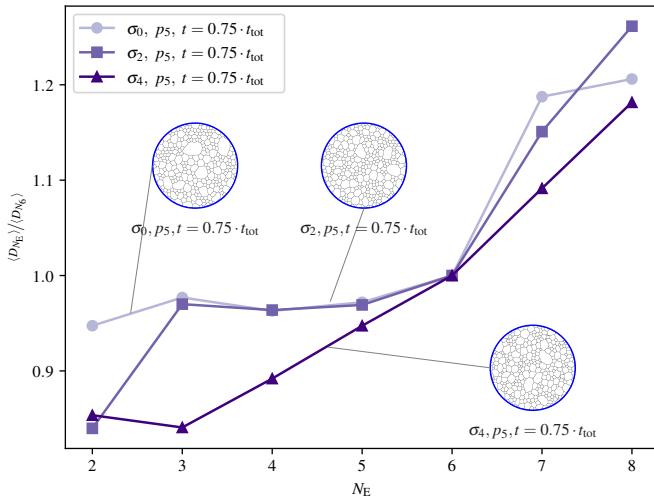


Abbildung 4.29: Mittlerer Abstand zwischen benachbarten Blasen für Blasen mit N_E Kanten bei variabler Ausgangsstruktur. Die Daten sind auf den mittleren Abstand einer sechsseitigen Blase normiert. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].

weiterführende Untersuchungen verschiedener Geometrien und Randbedingungen, wie etwa Schäume in begrenzten Räumen, erforderlich. Derartige Studien könnten erhebliche Abweichungen aufzeigen und somit tiefere Einblicke in die Dynamik von Schaumstrukturen ermöglichen.

4.6 Vorhersage der Mikrostrukturentwicklung (Ostwald-Reifung)

4.6.1 Schaumvergrößerung mit geringer Blasenanzahl

Die Mikrostrukturentwicklung vergrößernder Schaumstrukturen steht im Fokus dieses Abschnitts.

Zur Untersuchung der Vergrößerung bzw. Ostwald-Reifung werden Simulationsstudien unter Verwendung der neu entwickelten Methode vorgestellt. Diese Studien konzentrieren sich auf Schäume mit einer geringen Anzahl von Blasen, um die Funktionalität der Methode zu demonstrieren. Dieser Schaum ist in Abbildung 4.30 dargestellt. Die Wahl eines Systems mit wenigen Blasen ermöglicht eine präzise Beobachtung und Analyse der Vergrößerungsdynamik auf mikrostruktureller Ebene.

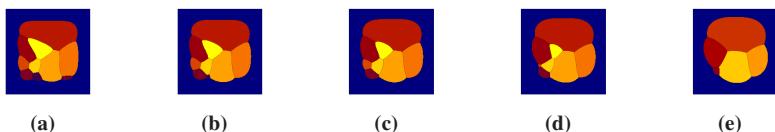


Abbildung 4.30: Visualisierung der Simulation eines sich entwickelnden Schaums mit Vergrößerungsverhalten. Die Teilbilder (a) – (e) zeigen aufeinanderfolgende Zeitschritte der Simulation. Größere Blasen wachsen auf Kosten kleinerer, die schrumpfen und schließlich verschwinden.

Die initiale Analyse der Simulationsergebnisse bestätigte die erfolgreiche Umsetzung des Konzepts und die Einhaltung der gesetzten Randbedingungen. Abbildung 4.30 visualisiert den Vergrößerungsprozess eines alternden Schaums in aufeinanderfolgenden Zeitschritten. Die Darstellung veranschaulicht deutlich, wie größere Blasen auf Kosten kleinerer wachsen, wobei letztere schrumpfen und schließlich verschwinden.

An einem Schaum mit nur wenigen Blasen lässt sich der zeitliche Verlauf des Volumens einzelner Blasen nachvollziehen. Zur quantitativen Analyse wurde das Vergrößerungsverhalten eines Blasenensembles von zehn Blasen untersucht, wie in Abbildung 4.31 dargestellt. Diese Grafik zeigt die zeitliche Entwicklung der Blasenvolumina, normiert auf das Volumen der verbleibenden Blase im Gleichgewichtszustand. Zu Beginn des Vergrößerungsprozesses weisen die Blasen eine heterogene Größenverteilung auf, und die Volumen unterscheiden sich bis um das Zehnfache. Hieran kann die Entwicklung der einzelnen Blasen im Ensemble detailliert nachvollzogen werden. Abschnittsweise wird für einzelne Blasen eine Zu- oder Abnahme des Volumens deutlich. Eine Zunahme bedeutet einen Netto-gasfluss in die jeweilige Blase, wodurch sie an Volumen zunimmt. Der Verlauf

weist eine Krümmung auf. Dies ist bedingt durch die Zunahme der Größe der Schaumfilme: Da der Gasfluss proportional zur Fläche des Films ist, nimmt die Wachstumsrate mit zunehmender Blasengröße zu. Bemerkenswert sind die unterschiedlichen Wachstumsraten der Blasen. Einige Blasen zeigen Phasen schnellen Wachstums, gefolgt von Phasen des Schrumpfens. Diese Übergangspunkte zeigen sich jeweils folgend auf das Verschwinden einer Blase. Außerdem können sie durch topologische Prozesse bedingt sein, bei denen sich die Nachbarschaftsbeziehungen ändern. Die schrumpfenden Blasen, erkennbar an den abfallenden Kurven, verlieren kontinuierlich Gas an ihre Nachbarn und verschwinden schließlich ganz. Diese Wechsel im Nettogasfluss markieren die Größenverhältnisse der Blasen. Eine Blase kann relativ zum Ensemble bzw. zu ihren direkten Nachbarn als groß oder klein definiert sein, in dieser Betrachtung jedoch nicht absolut. Der Gleichgewichtszustand ist als derjenige definiert, in dem nur noch eine Blase übrig bleibt, deren Volumen sich nicht mehr ändert.

Die Methode erweist sich als geeignet, um die Schaumentwicklung während des Vergröberungsprozesses präzise abzubilden, und erfasst den Verlauf der Volumina mit dem Schrumpfen der Blasen bis zu ihrem vollständigen Verschwinden. Diese Fähigkeit unterstreicht das Potenzial der Methode für detaillierte Untersuchungen der Mikrostrukturentwicklung unter Einbezug der Gasdiffusion zwischen Blasen in Schäumen.

4.6.2 Zeitliche Entwicklung und Charakterisierung des Blasenensembles

Aufbauend auf den Simulationen von kleineren Blasenensembles richtet sich zur quantitativen Analyse des Vergröberungsverhaltens von Schäumen der Fokus auf die Untersuchung einer größeren Anzahl an Blasen. Dabei besteht das Ziel darin, die Dynamik der Schaumentwicklung und -stabilität für experimentell relevante Bedingungen und Probengrößen abzubilden. Dies ist nötig für eine weitere Validierung und einen Vergleich mit analytischen Modellen, für verschiedene Schaumkonfigurationen. Anhand dieser Simulationsstudien von Blasenensembles können die zeitabhängige Anzahl und Größenverteilung der Blasen evaluiert

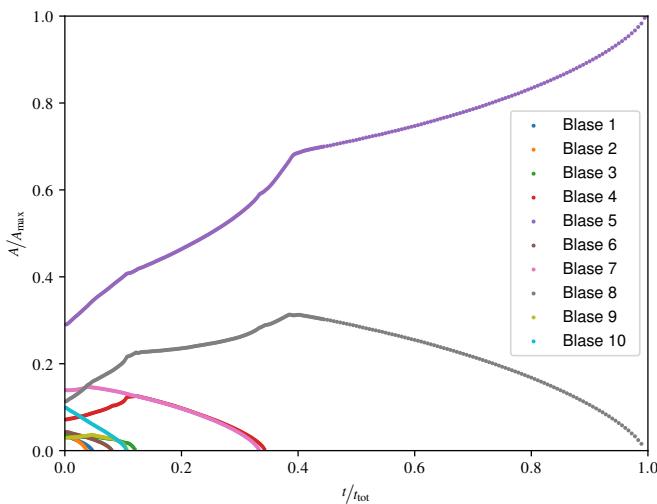


Abbildung 4.31: Blasenvolumina A , normiert auf das Gleichgewichtsvolumen der verbleibenden Blase A_{\max} , als Funktion der Zeit, normiert auf die Gleichgewichtszeit, für die Simulation eines vergrößernden Ensembles von zehn Blasen. Die Farben kennzeichnen die verschiedenen Blasen.

werden. Für ein umfassendes Verständnis des Vergrößerungsverhaltens spielt die statistische Analyse eine wichtige Rolle. Die Simulationen größerer Blasenensembles, bestehend aus 225 Blasen, bieten einen adäquaten Datensatz für solche Analysen. Abbildung 4.32 visualisiert das Vergrößerungsverhalten und zeigt Momentaufnahmen dieses initialen Blasenensembles zu drei verschiedenen Zeitpunkten. Diese Darstellung ermöglicht einen Einblick in die komplexen Prozesse und morphologischen Veränderungen während der Schaumentwicklung. Im Laufe dieses Prozesses nimmt die Anzahl der Blasen im Schaum ab, während gleichzeitig die Größe der verbleibenden Blasen zunimmt. Dies resultiert in einer insgesamt größeren Schaumstruktur und einer erkennbar veränderten Gesamtmorphologie. Außerdem sind Veränderungen in der Struktur dahingehend zu erkennen, dass insgesamt die Anzahl großer Schaumfilme steigt. Diese Änderungen der Morphologie vermitteln einen ersten Eindruck von den Auswirkungen der Gasdiffusion zwischen Blasen auf die Schaumstruktur.

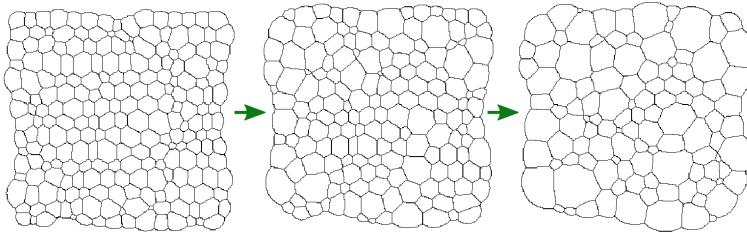


Abbildung 4.32: Serie von Einzelaufnahmen der Morphologie eines vergrößernden Schaumes. Das initiale Ensemble besteht aus 225 Blasen. Die drei Teilbilder zeigen Aufnahmen aus dem Simulationsverlauf zu den Zeitpunkten $t = 0.0 \cdot t_{\text{tot}}$, $t = 0.5 \cdot t_{\text{tot}}$ und $t = 1.0 \cdot t_{\text{tot}}$.

Ein wichtiger Aspekt bei der Untersuchung makroskopischer Schäume ist die zeitliche Entwicklung der Größenverteilung der Blasen innerhalb des Ensembles. Diese Analyse ermöglicht es, die Veränderungen der Schaumstruktur im Laufe der Zeit zu quantifizieren und die Dynamik der Vergrößerung zu charakterisieren. Abbildung 4.33 zeigt die Verteilung der auf die mittlere Blasengröße normierten Blasengrößen zu verschiedenen Zeitpunkten der Vergrößerung des Schaums. Diese Verteilung dient als Maß für die Heterogenität der Schaumstruktur während ihrer zeitlichen Entwicklung. Zu Beginn zeigt sich eine relativ enge, nahezu symmetrische Verteilung.

Im Laufe der Zeit verschiebt sich der Peak der Verteilung erwartungsgemäß zu kleineren Werten, während größere Blasen zunehmend häufiger auftreten, was die wachsende Asymmetrie der Verteilung widerspiegelt. Auch erscheint die Verteilung deutlich heterogener, was damit einhergeht, dass Blasen mit sehr unterschiedlichen Volumina vorhanden sind.

Die zeitliche Entwicklung der mittleren Blasengröße dient als zentraler Parameter, anhand dessen sich der Verlauf der Vergrößerung für Schäume mit unterschiedlich geordneter Struktur vergleichen lässt. In der vorliegenden Simulationsstudie dienen drei Schaumstrukturen mit unterschiedlicher Dispersität als initiale Strukturen, deren Vergrößerungsverhalten verglichen wird. Abbildung 4.34 illustriert den Verlauf der mittleren Blasengröße für diese Strukturen. Aus den zeitlichen Verläufen für diese verschiedenen Anfangsverteilungen der Blasengrößen lassen

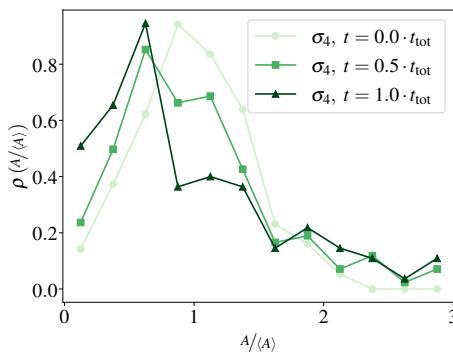


Abbildung 4.33: Verteilung des Blasenvolumens A normiert auf die mittleren Blasengröße $\langle A \rangle$ für Konfigurationen zu drei verschiedenen Zeiten. Die entsprechende Morphologie ist in Abbildung 4.32 gezeigt.

sich Trends ableiten, die den Vergröberungsprozess begleiten. Schäume mit einer initial breiteren Größenverteilung neigen zu einer beschleunigten Vergröberung, was sich in einer vergleichsweise starken Zunahme der mittleren Blasengröße zeigt. Bedingt ist dies dadurch, dass der Gastransfer durch vergrößerte Filme und größeren Druckunterschieden zwischen Blasen unterschiedlicher Größe stärker ist. Dahingegen weisen Schäume mit einer anfänglich engeren Größenverteilung eine moderatere Zunahme der mittleren Blasengröße, und damit Vergröberungsrate, auf. Die Ergebnisse unterstreichen den Einfluss der initialen Blasengrößeverteilung auf die Entwicklung von vergröbernden Schäumen unter Annahme einer konstanten Gastransferrate.

4.7 Zusammenfassung

Diese Arbeit präsentiert eine innovative numerische Methode zur Simulation des Zerfalls von flüssigen Schäumen, basierend auf einem Phasenfeld-Modell. Die Methode berücksichtigt den Gasdruck innerhalb der Blasen unter der Annahme eines idealen Gases. Sie ermöglicht eine umfassende Abbildung, Analyse und Kontrolle der zeitlichen Entwicklung des Zerfallsprozesses von Schäumen. Zur

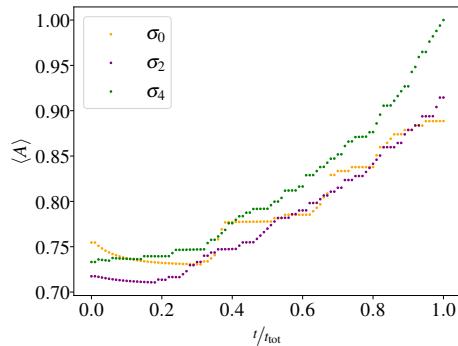


Abbildung 4.34: Zeitliche Entwicklung des mittleren Blasenvolumens $\langle A \rangle$ für drei verschiedene Ausgangsstrukturen mit verschiedenen initialen Blasengrößenverteilungen (Dispersitäten), σ_0 , σ_2 , σ_4 .

Darstellung der dynamischen Entwicklung der Schaumkristallstruktur nutzt die Methode einen Algorithmus, der das spontane Reißen trennender Filme und die Koaleszenz von Blasen berücksichtigt. Zusätzlich integriert diese Methode die Ostwald-Reifung als Alterungsmechanismus und beschreibt den Gastransfer zwischen Blasen. Die vorliegende Studie führt das Modell zur Beschreibung der Mikrostrukturentwicklung ein und validiert es anhand numerischer Simulationen. Um die Hauptfunktionen des Ansatzes zu demonstrieren, wurde das Modell zur systematischen Untersuchung verschiedener Geometrien trockener Schäume mit quasi-mono- und polydispersen Strukturen angewandt. Die Simulation des Zerfalls dieser Schäume, der durch spontan reißende Filme getrieben wird, ermöglicht tiefgreifende Einblicke in den Einfluss der initialen Schaumgeometrie und der Filmplatzwahrscheinlichkeit auf die Entwicklung der gesamten Schaumstruktur. Dabei modellieren unterschiedliche Filmplatzwahrscheinlichkeiten verschiedene Zerfallsraten. Auf dieser Grundlage untersuchen umfassende Parameterstudien die Schaumentwicklung und die dynamischen Eigenschaften, wobei statistische Analysen die Mikrostrukturentwicklung quantifizieren und charakterisieren. Des Weiteren wird die Alterung auf Basis von Vergrößerung bzw. Ostwald-Reifung simuliert, wozu die Gasdiffusion zwischen Blasen modelliert ist.

Die numerischen Ergebnisse zeigen, dass das Modell die Mikrostrukturentwicklung in flüssigen Schäumen im Grenzfall trockener Schäume akkurat vorhersagt, und dabei die Zerfallsdynamik des Schaums durch aufeinanderfolgende Koaleszenzereignisse detailliert abbildet. Der Ansatz eröffnet einen effektiven Zugang zu den komplexen morphologischen und topologischen Eigenschaften, die Schaumstrukturen inhärent sind. Das entwickelte Framework eröffnet durch seine besondere Eignung für großskalige Mikrostruktursimulationen Einblicke in das komplexe Verhalten zerfallender Schäume. Dies ermöglicht die Analyse statistischer Eigenschaften basierend auf den Charakteristika des Blasenensembles. Mit diesem Ansatz lassen sich verschiedene Ausgangsbedingungen, wie unterschiedlich dispergierte initiale Mikrostrukturen und Filmplatzwahrscheinlichkeiten, präzise und individuell spezifizieren. Dadurch kann ihr Einfluss sowohl in der Wechselwirkung, als auch isoliert voneinander untersucht werden. Die vorgestellten detaillierten Untersuchungen konzentrieren sich auf verschiedene resultierende Mikrostrukturparameter wie Volumen, Gasdruck, Blasenform und -konnektivität. Die Analysen dienen dazu, die prädiktive Fähigkeit des Modells aufzuzeigen und dessen Anwendbarkeit für die Untersuchung und eingehende Betrachtung der Schaumentwicklung zu demonstrieren. Indem die kritische Rolle jedes einzelnen Parameters für die Strukturbildung betont wird, verdeutlicht die zentrale Bedeutung dieser Analyse für das Verständnis des Parameterzusammenspiels. Zusammenfassend bietet die Methode effektiv Einblicke in die Auswirkungen grundlegender Faktoren, die die Entwicklung und Dynamik zerfallender flüssiger Schäume bestimmen. Darüber hinaus verknüpft sie erfolgreich stochastische Filmrisse mit empirischen Beobachtungen des gesamten Blasenensembles, wie in simulierten Zerfallsexperimenten über verschiedene morphologische Schaumparameter hinweg gezeigt wurde. Somit ermöglicht der vorgestellte Ansatz die Implementierung vorhersagbarer und maßgeschneiderter Mikrostrukturen. Dies führt zu einer verbesserten Prozesskontrolle, da aus den Simulationsergebnissen verfeinerte Parameter für die Auslegung von Mikrostrukturen abgeleitet werden können. Das Potenzial des Ansatzes entfaltet sich besonders im gezielten Materialdesign, da die strukturellen Parameter die resultierenden physikalischen Eigenschaften bestimmen. Allerdings zeigen sich in einigen der aus den numerischen Experimenten abgeleiteten Trends auch die Grenzen des Modells, woraus sich

Hinweise auf potenzielle Verbesserungen für zukünftige Entwicklungen ableiten lassen. Das aktuelle Modell, das auf dem stochastischen Auftreten von platzenden Filmen basiert, bietet die Flexibilität, alternative Wahrscheinlichkeitsfunktionen zu integrieren. Damit wäre es möglich, komplexere Prozesse zu modellieren und dadurch ein breiteres Spektrum an physikalischen Phänomenen auf verschiedenen Längenskalen abzubilden. Ein vorgeschlagenes Merkmal für eine zukünftige Modellformulierung und weiterführende Studien ist die Kopplung der Gasdiffusion zwischen den Blasen (Ostwald-Reifung) mit dem Alterungsmechanismus der sukzessiven Koaleszenz.

Zukünftige Forschungsansätze könnten eine ganzheitlichere und noch realitätsnähere Darstellung von Schäumen anstreben. Erforderliche Modellerweiterungen umfassen die Integration von Gravitationseffekten in das bestehende Framework sowie die umfassende Einbindung aller drei Alterungsmechanismen – Drainage, Koaleszenz und Ostwald-Reifung. Die nahtlose Kopplung dieser drei Alterungsmechanismen wird die Anwendbarkeit des Modells weiter erhöhen und ein ganzheitlicheres Verständnis der Schaumdynamik ermöglichen. Das entwickelte Framework zeichnet sich insbesondere durch seine Vielseitigkeit aus. Mit seiner Anpassungsfähigkeit bietet es eine solide Grundlage für den Übergang zu dreidimensionalen Geometrien. Zukünftige Simulationsstudien dieser 3D-Geometrien versprechen, die Zerfallsdynamik von Schäumen unter realitätsnäheren Bedingungen in neuen Konfigurationen detaillierter zu erfassen und zu analysieren. In diesem Kontext eröffnen sich Möglichkeiten für erweiterte numerische Experimente, die einen breiten Parameterraum erschließen. Hierbei rücken insbesondere Variationen der Oberflächenspannung sowie komplexere initiale Schaumgeometrien in den Fokus der Untersuchungen. Eine Kalibrierung der Simulationsetups und -ergebnisse anhand physikalischer Einheiten würde die Brücke zwischen numerischen Resultaten und experimentellen Befunden schlagen. Dies ermöglicht nicht nur einen direkten Vergleich mit empirischen Studien, sondern auch eine Validierung anhand etablierter physikalischer Gesetze. Darüber hinaus eröffnet die vorgeschlagene Erweiterung der Benetzungsbedingungen [106] durch Einbeziehung der Oberflächenspannung neue Perspektiven für die Untersuchung von Schäumen mit variablem Flüssigkeitsanteil. Weitere vielfältige Perspektiven

eröffnet das Framework für die Erforschung der Schaumentwicklung in diversen anwendungsspezifischen Szenarien. Von besonderem Interesse sind hierbei Untersuchungen zur Dynamik von Schäumen in räumlich begrenzten Umgebungen, wie sie beispielsweise in porösen Strukturen auftreten. Diese Studien versprechen wertvolle Einblicke in die komplexen Wechselwirkungen zwischen Schaumgeometrie und umgebender Struktur.

5 Simulation der effektiven mechanischen Eigenschaften fester Schäume¹

5.1 Digitale Generierung präzise konfigurierter Schaumstrukturen

Die algorithmische Generierung offenporiger Schaumstrukturen wurde in Abschnitt 3.2 vorgestellt. Für die numerische Simulation, die in diesem Kapitel analysiert wird, wurden Strukturen mit Parametern erzeugt, die in Abschnitt 5.2.2 und Abschnitt 5.2.3 beschrieben werden.

5.2 Numerische Simulation von Kompressionstests im elastischen Bereich

5.2.1 Validierung: Eshelby-Problem

Zur Validierung der Simulations- und Homogenisierungsmethode aus Abschnitt 3.3 wird das *Eshelby-Problem einer einzelnen Inhomogenität* (SIP) [107] betrachtet. Dieses Problem beschreibt eine sphärische Inhomogenität in einer unendlich ausgedehnten Matrix, die Neumann'schen Randbedingungen unterliegt. Die

¹ Inhalte dieses Kapitels sind in [22] veröffentlicht.

Steifigkeit des Matrixmaterials beträgt \mathcal{C}_m , die der Einschlüsse \mathcal{C}_e . Für ein Zweiphasen-Problem mit phasenspezifisch konstanter Steifigkeit lässt sich der effektive Steifigkeitstensor im Allgemeinen über

$$\bar{\mathcal{C}} = \mathcal{C}_m + c_e (\mathcal{C}_e - \mathcal{C}_m) \langle \mathcal{A} \rangle_e \quad (5.1)$$

bestimmen. Hier stellt \mathcal{A} den Lokalisierungstensor dar, der die Verzerrung ϵ mit der äußeren Belastung $\bar{\epsilon}$ verbindet über die Relation

$$\epsilon = \mathcal{A}[\bar{\epsilon}]. \quad (5.2)$$

Im Grenzfall einer dünnen Defektverteilung (engl. *dilute defect distribution*) und damit Volumenanteilen der Inhomogenität $c_e \ll 1$ ergibt sich der Lokalisierungstensor \mathcal{A} aus dem analytischen Dehnungsfeld. Daraus folgen der effektive Kompressionsmodul \bar{K} und der effektive Schubmodul $\bar{\mu}$,

$$\bar{K} = K_m + c_e (K_e - K_m) \frac{4\mu_m + 3K_m}{4\mu_m + 3K_e} \quad (5.3a)$$

$$\bar{\mu} = \mu_m + c_e (\mu_e - \mu_m) \frac{5\mu_m (4\mu_m + 3K_m)}{6\mu_e (2\mu_m + K_m) + \mu_m (8\mu_m + 9K_m)}. \quad (5.3b)$$

Der isotrope Steifigkeitstensor ergibt sich zu

$$\mathcal{C} = 3K\mathcal{P}_1 + 2\mu\mathcal{P}_2, \quad (5.4)$$

wobei die Spannung und die Dehnung in Kugel- und Deviator-Anteil zerlegt werden. Hier sind $\mathcal{P}_1 = \frac{1}{3}\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}$ und $\mathcal{P}_2 = \mathcal{I}^S - \mathcal{P}_1$ mit dem vierstufigen Einheitstensor \mathcal{I}^S die jeweiligen Projektoren.

Zur Lösung des SIP kommt eine Phasenfeldmethode in Kombination mit dem Spannungsinterpolationsschema von Schneider et al. [108] zum Einsatz. Eine Finite-Elemente-Diskretisierung der Impulsbilanz erfolgt auf einem kartesischen Gitter mit 150×150 Elementen. Die Breite der diffusen Grenzfläche entspricht

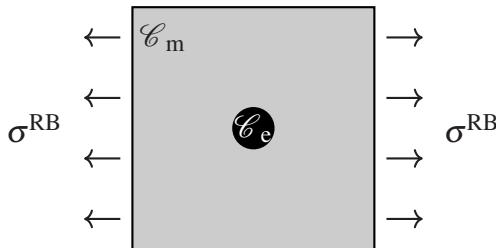


Abbildung 5.1: Setup für das Eshelby-Problem einer einzelnen Inhomogenität mit Realisierung einer Spannungsrandbedingung σ^{RB} . Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22].

dem Fünffachen der Länge eines finiten Elements. Betrachtet wird ein rechteckiges Gebiet der Länge L , wobei die Größe der Inhomogenität bis zu einem Volumenanteil von $c_e \approx 30\%$ variiert. Am Rand wird eine Spannungsrandbedingung realisiert, die eine Kompression von $\sigma^{\text{RB}} = 0,1 \text{ MPa}$ bewirkt, siehe Abbildung 5.1. Sowohl die Matrix als auch der Einschluss weisen phasenspezifisch konstante Eigenschaften gemäß Tabelle 5.1 auf.

Tabelle 5.1: Materialeigenschaften des Eshelby-Problems einer einzelnen Inhomogenität. Eigene Tabelle; vorveröffentlicht in [22]; sprachlich angepasst.

Materialkonstante	Matrix	Inhomogenität
E in GPa	70	30
ν	0,35	0,35
μ in GPa	25,9	11,1
λ in GPa	60,5	25,9
K in GPa	77,1	33,3

Abbildung 5.2 zeigt den effektiven Kompressions- und Schubmodul in Abhängigkeit des Volumenanteils c_e der Inklusion. Dargestellt sind die homogenisierten Simulationsergebnisse, die analytische Lösung sowie theoretische Schranken. Wie von Hill [109] gezeigt, stellen die Voigt- und Reuss-Schranken theoretische Grenzen erster Ordnung für die Steifigkeit dar, entsprechend einem arithmetischen bzw. harmonischen Mittelwert des Steifigkeitstensors. Im isotropen Fall

entspricht dies dem jeweiligen Mittelwert von Schubmodul μ und Kompressionsmodul K . Zusätzlich werden die Hashin-Shtrikman-Schranken (HS) zweiter Ordnung [110] dargestellt, die restriktivere und damit genauere Grenzen im Vergleich zu den Schranken erster Ordnung liefern. Im vorliegenden Fall fallen die obere HS-Schranke und die Voigt-Schranke nahezu zusammen, während die untere HS-Schranke signifikant über der Reuss-Schranke liegt. Zu beachten ist, dass die analytische Lösung nur für eine dünne Defektverteilung $c_e \ll 1$ gilt und somit eine geeignete Validierung bis zu $c_e \lesssim 7\%$ darstellt. In diesem Bereich besteht eine sehr gute Übereinstimmung zwischen Simulationsergebnissen und Theorie.

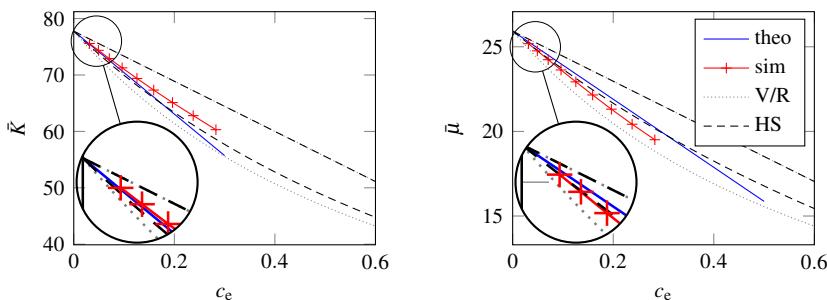


Abbildung 5.2: Effektive Materialeigenschaften in Abhängigkeit des Volumenanteils der Inklusion. Analytische Lösung für $c_e \ll 1$ (theo) gemäß Gleichung (5.3), Simulationsergebnis (sim) und theoretischen Grenzen. Diese sind die Voigt- [111] und Reuss-Schranke [112] (V/R) sowie die Hashin-Shtrikman-Schranken (HS) zweiter Ordnung [110]. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22].

Für den Fall einer Inhomogenität mit einem Durchmesser von $0.3L$, was einem Volumenanteil von $c_e = 0.0225\pi \approx 7,1\%$ entspricht, fasst Tabelle 5.2 die Ergebnisse der Homogenisierung zusammen. Die Abweichung zwischen Simulation und analytischer Lösung liegt im Bereich von 1 % oder darunter. Die Ergebnisse liegen zudem innerhalb der theoretischen Schranken erster und zweiter Ordnung. Der Indikator für die Abweichung von einem isotropen effektiven Verhalten beträgt $e^{rel} = 0,13\%$ und damit ist die Tensorgleichung sehr gut erfüllt.

Tabelle 5.2: Vergleich der effektiven Eigenschaften für das SIP mit $c_e \approx 7,1\%$. Simulationsergebnisse (sim), analytische Lösung (theo) und die relative Abweichung zwischen beiden. Zusätzlich sind die theoretischen Schranken erster und zweiter Ordnung aufgelistet. Absolutwerte sind in GPa angegeben. Eigene Tabelle; vorveröffentlicht in [22]; sprachlich angepasst.

Größe	sim	theo	Abweichung	Voigt	Reuss	HS+	HS-
E	65,46	66,08	-0,933 %	67,17	63,97	65,69	64,99
μ	24,24	24,50	-1,087 %	24,88	23,69	24,36	24,10
λ	56,75	56,25	0,901 %	58,05	55,29	55,94	55,34
K	72,91	72,58	0,454 %	74,64	71,08	72,18	71,40

5.2.2 Setup für Druckversuche

Um die effektiven elastischen Eigenschaften eines Metallschaums zu ermitteln, werden Simulationen durchgeführt, bei denen ein einachsiger Spannungszustand auf der Schaumstruktur induziert wird. Um die Vergleichbarkeit von Lastfällen zu gewährleisten, wird der Schaum zwischen zwei Platten aus demselben Material platziert, das den Elastizitätsmodul E_s aufweist. Auf diesen Platten werden konstante Spannungsrandbedingungen (Neumann-Randbedingungen) über den Spannungsvektor $t = \pm \sigma^{\text{RB}} e_y$ angewendet, wie in Abbildung 5.3 schematisch dargestellt. Das Gebiet für die Homogenisierung umfasst ausschließlich den eigentlichen Schaum und schließt die Platten aus.

5.2.3 Simulationsbedingungen für isotrope Strukturen

In diesem Abschnitt wird die Eignung des vorgestellten Ansatzes zur Simulation und Homogenisierung demonstriert, indem er auf eine offenporige Schaumstruktur angewendet wird. Um die Annahme einer isotropen Struktur zu validieren, wird der Einfluss der Gebietsgröße auf die Isotropie der effektiven Steifigkeit untersucht. Dafür wird als Modell ein Voronoi-Schaum gewählt, dessen Stege ein

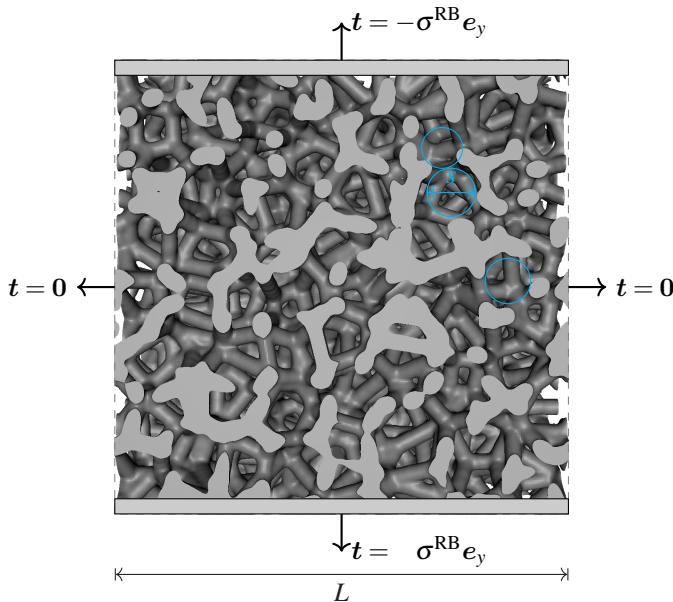


Abbildung 5.3: Schematische Darstellung eines Schnittes in y -Richtung mit Randbedingungen. Dabei ist $\mathbf{t} = \sigma \mathbf{n}$ der Spannungsvektor. Die Porengröße wird durch den Durchmesser s der in den Porenmittelpunkt gesetzten Kugel definiert, die sich nicht mit derjenigen einer benachbarten Pore überschneidet. Dies wird durch blaue Kreise visualisiert. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22].

kreisförmiges Querschnittsprofil aufweisen und dessen Zellgrößen einer Normalverteilung folgen. Dieser Schaum wird mit dem in Abschnitt 3.2 beschriebenen Algorithmus erzeugt. Dies ergibt eine statistisch repräsentative Schaumstruktur, bei der sowohl die Porengröße s als auch die Stegdicke d_s – definiert durch den Stegdurchmesser – einer Normalverteilung folgt. Die Angabe von Erwartungswert und Standardabweichung spezifiziert diese Verteilung. Die Porengröße ist definiert als der maximale Durchmesser einer Kugel, die sich am Schwerpunkt einer Pore befindet und die nicht mit einer Kugel einer benachbarten Pore überlappt, wie in Abbildung 5.3 dargestellt.

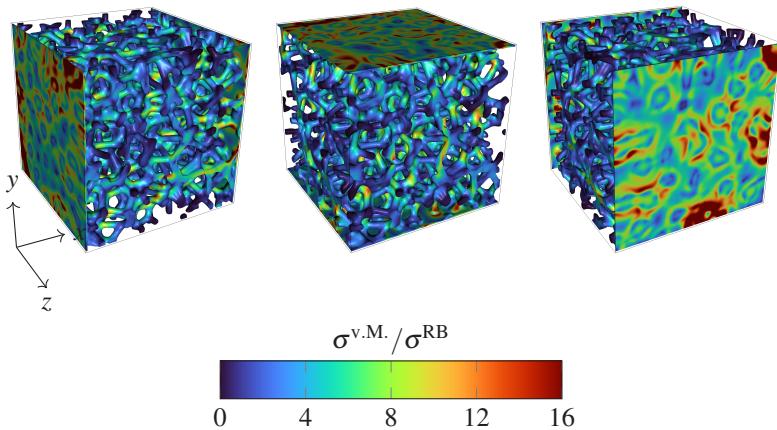


Abbildung 5.4: Druckversuche eines offenporigen Schaums in drei Raumrichtungen, dargestellt für das Setup III (siehe Tabelle Tabelle 5.3). Von-Mises-Vergleichsspannung $\sigma^{\text{v.M.}}$ normiert mit der Spannungsrandbedingung σ^{RB} wird angewandt an der Phasenfeld-Grenzfläche mit einem Wert von $\phi^s = 0,2$. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22].

Die Studie umfasst vier verschiedene Gebietsgrößen. Die statistischen Eigenenschaften der jeweiligen Schaumgeometrie sind vergleichbar, da der Erwartungswert $\text{EW}(s)$ und die Standardabweichung σ_s der Porengröße sowie die mittlere Stegdicke d_s jeweils übereinstimmen. Die Kantenlänge L des betrachteten Gebiets variiert über die vier Simulationen der Studie vom Vierfachen bis zum Zehnfachen der mittleren Porengröße. Dadurch reicht die Anzahl der Poren im Gebiet von 40 bis 560 (siehe Tabelle Tabelle 5.3). Die Länge des kleinsten Gebiets L_1 dient als Bezugsgröße für alle anderen Längen. Bezuglich dieser charakteristischen Länge werden alle anderen Längenskalen angegeben. Für jede Struktur bzw. jedes Simulationssetup werden Druckversuche in jeder der drei Raumrichtungen simuliert. Abbildung 5.4 zeigt beispielhaft die Ergebnisse der drei Simulationen für Versuchsaufbau III. Setup I wird durch ein Gitter mit $125 \times 125 \times 125$ Elementen diskretisiert. Die Elementanzahl der anderen Setups skaliert entsprechend der Gebietsgröße. Für die Auswertung wird das Tupel der effektiven Elastizitätsmoduln $\mathbb{E} = \{\bar{E}_1, \bar{E}_2, \bar{E}_3\}$ betrachtet, die sich aus den drei Druckversuchen für jede

Tabelle 5.3: Geometrische Parameter des betrachteten Schaums. Längenskalen sind relativ zur kleinsten Länge des Gebiets L_I angegeben, die als Bezuggröße genutzt wird. Die charakteristischen Parameter des Schaums sind in der Tabelle zusammengefasst, mit der Porenanzahl, der Länge des Gebiets L/L_I , der Porengrößenverteilung mit Erwartungswert $EW(s)$ und Standardabweichung $\sigma_s(L/EW(s), L_I/\sigma_s)$, der Stegdicke L_I/d_s , und des resultierenden Volumenanteils c_s . Die Stegdicke und die statistische Verteilung der Porengrößen bleiben in allen Setups konstant, während die Länge des Gebiets L (und damit die Gebietsgröße) variiert. Eigene Tabelle; vorveröffentlicht in [22]; sprachlich angepasst.

Setup	Poren	L/L_I	$L/EW(s)$	L_I/σ_s	L_I/d_s	c_s
I	40	1	4	40	12,5	0,31
II	109	$\frac{3}{2}$	6	40	12,5	0,32
III	279	2	8	40	12,5	0,33
IV	560	$\frac{5}{2}$	10	40	12,5	0,31

Struktur ergeben. Ihr Mittelwert, definiert durch die Formel, dient als Maß für die Anisotropie der effektiven Steifigkeit. Der Mittelwert dieses Tupels dient als relatives Maß für den Unterschied der effektiven Elastizitätsmoduln für die verschiedenen Belastungsrichtungen. Die Berechnung des Mittelwerts des Tupels erfolgt gemäß

$$\bar{E}^m := \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \bar{E}_i \quad (5.5)$$

und die der Abweichung über

$$A := \frac{\max(\mathbb{E}) - \min(\mathbb{E})}{\bar{E}^m}. \quad (5.6)$$

Abbildung 5.5 zeigt den Mittelwert \bar{E}^m der effektiven Elastizitätsmoduln, normiert auf die entsprechende Voigt-Schranke $\bar{E}^V = c_s E_s$, sowie die Abweichungen A und e^{rel} . Die Voigt-Schranke [111] stellt die obere Grenze für die Steifigkeit dar und entspricht dem arithmetischen Mittel der phasenspezifischen Steifigkeitstensoren

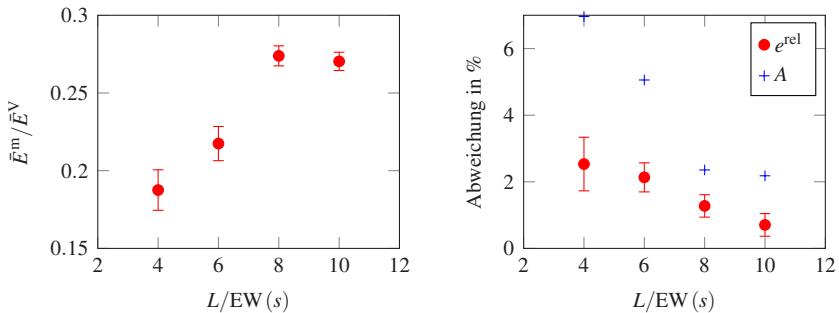


Abbildung 5.5: Effektive Eigenschaften in Abhängigkeit von der betrachteten Gebietsgröße. Die Mittelwerte der Porengröße und der Stegdicke sind konstant. Links: Der nach (5.5) berechnete effektive Elastizitätsmodul, normiert auf die entsprechende Voigt-Schranke $\bar{E}^V = c_s E_s$. Rechts: Der relative Fehler e^{rel} nach (3.37) und die Abweichung A nach (5.6). Die Fehlerbalken geben die maximale Abweichung vom Mittelwert der drei Lastrichtungen an, $\max_{i \in \{1,2,3\}} |\bar{E}^m - \bar{E}_i|$. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22].

mit dem entsprechenden Volumenanteil [109]. Im vorliegenden Fall ergibt sie sich demnach

$$\bar{E}^V = c_s E_s, \quad (5.7)$$

wobei c_s den Gesamtvolumenanteil des Schaummaterials und E_s seinen Elastizitätsmodul darstellt.

Die Fehlerbalken im Plot zeigen die maximale Abweichung der simulierten Werte vom Mittelwert für die drei Lastrichtungen. Für die beiden kleineren Gebietsgrößen ist die Näherung des effektiven Elastizitätsmoduls unzureichend. Die Abweichung zwischen den drei Richtungen ist groß, was darauf hinweist, dass die effektive Steifigkeit in diesen Fällen nicht isotrop ist. Zusätzlich wird der effektive Elastizitätsmodul unterschätzt. Im Vergleich dazu weisen die beiden größeren Gebiete nur geringe richtungsabhängige Abweichungen auf und liefern ähnliche Werte für den effektiven Elastizitätsmodul, der etwa 27 % der Voigt-Schranke beträgt.

Für die Schäume in dieser Studie mit einem Volumenanteil $c_s \approx 0,32$ beträgt das Verhältnis $\bar{E}/E_s \approx 0,086$, was 8,6 % der Steifigkeit des Vollmaterials entspricht. Neben der Voigt-Schranke erster Ordnung sind die Hashin-Shtrikman-Schranken (HS-Schranken) zweiter Ordnung gemäß [110, Gleichungen (4.1)-(4.4)] in diesem Fall anwendbar, da ein quasi-isotropes effektives Verhalten vorliegt. Die obere HS-Schranke stellt eine engere Grenze dar als die Voigt-Schranke und führt eine Abhängigkeit der Grenze des effektiven Elastizitätsmoduls \bar{E}^{HS} von der Poissonzahl des Festkörpers ein. Dies gilt hingegen nicht für die Voigt-Schranke, wenn eine Phase eine verschwindende Steifigkeit aufweist. Für die vorliegende Struktur eines Materials mit einer Poissonzahl von 0,35 ergeben sich $\bar{E}^{\text{V}} = 0,32E_s$ und $\bar{E}^{\text{HS}} = 0,19E_s$. Damit ist die HS-Schranke deutlich restriktiver. Die Schaumstruktur erreicht $\bar{E}/\bar{E}^{\text{HS}} = 45,3\%$ bezüglich der HS-Schranke.

Auf der Grundlage einer Modellierung von Schäumen mit kubischen Einheitszellen leiteten Gibson und Ashby [70] die Relation

$$\frac{\bar{E}}{\bar{E}^{\text{V}}} = kc_s \quad (5.8)$$

für das Verhältnis des effektiven Elastizitätsmoduls \bar{E} zur Voigt-Schranke \bar{E}^{V} gemäß Gleichung (5.7) her. Dabei bezeichnet c_s den Volumenanteil des Schaummaterials und k den Strukturfaktor. Für offenporige Schäume wird dieser Faktor nahe Eins angenommen. Diese Wahl des Strukturfaktors $k \approx 1$ basiert jedoch auf einem Einheitszellenmodell, das von einer regelmäßigen Struktur und von den Stegen als Stäben mit konstantem Querschnitt ausgeht [82], und berücksichtigt somit keine geometrischen Unregelmäßigkeiten, die einen großen Einfluss auf den Strukturfaktor haben, vgl. [7, 80]. Eine Anpassung an den Strukturfaktor k für die Ergebnisse von Setup III und IV ergibt einen Wert $k \approx 0.88$, der signifikant unter Eins liegt. Strukturfaktoren größer als Eins können jedoch auch für normalverteilte Poren durch Variation der Porengröße und der Stegdicke erreicht werden, wie im folgenden Abschnitt 5.2.4 gezeigt und diskutiert wird.

Aus dem rechten Diagramm in Abbildung 5.5 ist ersichtlich, dass für die Setups III und IV, und damit $L/\text{EW}(s) \geq 8$, der Einfluss der Belastungsrichtung sehr

gering ist. Dadurch ist es in diesen Fällen angemessen, ein isotropes effektives Verhalten anzunehmen. Dies impliziert, dass eine Simulation in einer einzigen Belastungsrichtung ausreicht, um eine korrekte Näherung der effektiven Steifigkeit zu erhalten, so dass die Rechenzeit für die Berücksichtigung verschiedener Lastfälle eingespart werden kann. Das Fehlermaß e^{rel} für jede Belastungsrichtung zeigt den gleichen Trend wie die tatsächliche Abweichung A . Für die kleinen Gebietsgrößen weist e^{rel} jedoch größere Variationen auf. Daher könnte es sich also um eine Unterschätzung handeln. Ein großer Wert des Fehlers der kleinsten Quadrate wie $e^{\text{rel}} \gtrsim 2\%$ weist allerdings auf eine nicht repräsentative und damit unzureichende Gebietsgröße hin. Deshalb erlaubt dieses Fehlermaß weiterhin, die Qualität der Simulations- und Homogenisierungsergebnisse zu beurteilen. Als Ergebnis dieser Studie kann abgeleitet werden, dass die Größe des Berechnungsgebiets mindestens das Achtfache der mittleren Porengröße betragen sollte, um ein isotropes effektives Verhalten zu gewährleisten. Dies entspricht einer Mindestanzahl von ca. 280 Poren innerhalb des Gebietes, die erforderlich sind, um ein repräsentatives Volumen zu bilden. In der nachfolgenden Parameterstudie ist sichergestellt, dass dies der Fall ist.

5.2.4 Geometrie und mechanische Eigenschaften

Das Hauptziel dieser Studie ist es, den Einfluss verschiedener geometrischer Parameter auf das mechanische Materialverhalten einer bestimmten Schaumstruktur zu untersuchen. Um dieses Ziel zu erreichen, wird eine Reihe numerischer Experimente durchgeführt. Die zentralen Aspekte der simulative Studie umfassen die Variation der geometrischen Parameter und die Berechnung der daraus resultierenden Änderungen der Materialeigenschaften. Es werden digital Druckversuche im elastischen Bereich durchgeführt, wozu die in dieser Arbeit in Abschnitt 3.3 vorgestellte numerischen Methode zum Einsatz kommt. In allen Simulationen werden Schaumvolumina mit mindestens 500 Poren und damit einer Gebietslänge von etwa dem neun- bis zehnfachen des mittleren Poredurchmessers zugrunde gelegt, um eine ausreichende Repräsentativität des Gebiets entsprechend den Ergebnissen

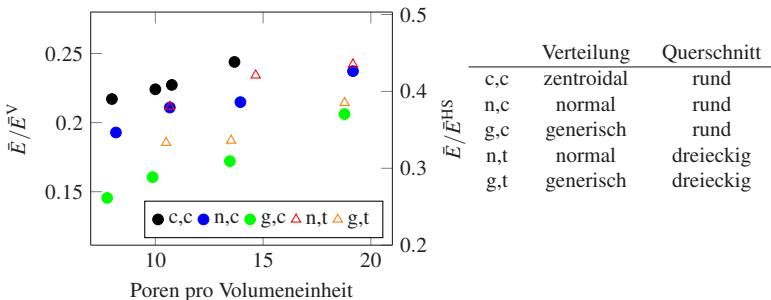


Abbildung 5.6: Einfluss von Porengröße und Stegdicke bei konstantem festen Volumenanteil $c_s = 0,2$ ($\theta = 80\%$). Effektiver Elastizitätsmodul \bar{E} normiert mit der Voigt-Schranke $\bar{E}^V = c_s E_s$ in Abhängigkeit der Anzahl von Poren pro Volumeneinheit für verschiedene Querschnittsgeometrien und Porenverteilungen gemäß nebenstehender Tabelle. Eine größere Anzahl von Poren pro Volumeneinheit bedeutet eine geringere Porengröße und eine geringere Stegdicke. Die rechte Achse zeigt \bar{E} normiert auf die HS-Grenze \bar{E}^{HS} . Die Daten der Strukturen mit etwa 10 Poren pro Volumeneinheit entsprechen den jeweiligen Werten von $c_s = 0,2$ in der Abbildung 5.7. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22]; sprachlich angepasst.

des vorhergehenden Abschnitts zu gewährleisten. Anschließend wird eine charakteristische Länge verwendet, um alle anderen auftretenden Längenskalen zu normieren. Sie definiert auch eine Volumeneinheit, die als Bezugsgröße dient. Da die lineare Elastizität betrachtet wird, sind die folgenden Ergebnisse unabhängig von der Längenskala gültig. Die Simulationsergebnisse liefern verschiedene Informationen über die mechanischen Eigenschaften einer Schaumstruktur. Dazu zählt die effektive Steifigkeit, die durch elastische Konstanten wie den Elastizitätsmodul und die Poissonzahl bestimmt wird. Zusätzlich werden Feldinformationen bereitgestellt. Dazu gehört beispielsweise die Von-Mises-Vergleichsspannung $\sigma^{v.M.}$, deren Wert die Stelle angibt, an der die lokale Plastifizierung bei Erreichen der Streckgrenze einsetzt. Folglich können die Ergebnisse dieser Experimente zusätzliche Einblicke in die komplexe Beziehung zwischen Geometrie und Materialverhalten geben, aus denen wichtige Implikationen für die Gestaltung und Optimierung von Materialien und Strukturen abgeleitet werden können. So ermöglichen die Ergebnisse beispielsweise, Punkte zu identifizieren, an denen eine lokal erhöhte Spannungsverstärkung $\sigma^{v.M.}/\sigma^{RB}$ auftritt, wie Abbildung 5.4 verdeutlicht. Diese

Erkenntnisse könnten dazu dienen, Strukturen aktiv zu optimieren. Eine solche Analyse geht jedoch über den Rahmen dieser Arbeit hinaus. Im Folgenden beschränkt sich die Auswertung auf den effektiven Elastizitätsmodul als Indikator, um die allgemeinen mechanischen Eigenschaften einer Schaumstruktur zu beurteilen. Die hier vorgestellte Homogenisierungsmethode erweist sich daher als besonders geeignet, um die Zielsetzung der vorliegenden Studie zu erfüllen.

Um den Einfluss der Schaumgeometrie auf die effektive Steifigkeit zu analysieren, wurden eine Reihe von 3D-Schaumstrukturen mit unterschiedlichen strukturellen Eigenschaften erzeugt und untersucht. Zunächst wurden verschiedene Schaumgeometrien bei einem konstanten festen Volumenanteil von $c_s = 0.2$ untersucht. Dabei werden insgesamt 18 Strukturen verglichen, die drei verschiedene Zellverteilungen aufweisen: generisch, normal und zentroidal. Die in dieser Studie untersuchten Strukturen besitzen sowohl kreisförmige als auch dreieckige Stegprofile mit äquivalenter Querschnittsfläche. Für jeden Typ werden Strukturen mit unterschiedlicher Porendichte berücksichtigt. Eine Diskussion der entsprechenden Längenskalen wird im Anhang in Abschnitt A.1 präsentiert. Der homogenisierte Wert der effektiven Steifigkeit wurde aus räumlich aufgelösten Felddaten gemäß dem vorgestellten Homogenisierungsansatz ermittelt. Der effektive Elastizitätsmodul wird normiert mit der Voigt-Schranke \bar{E}^V angegeben. Dies ergibt ein Maß für das Verhältnis zur theoretischen maximalen Steifigkeit bei einem gegebenen Volumenanteil c_s und somit eine Referenz mit vergleichbarem Materialgewicht. Diese Wahl erweist sich als aussagekräftiger im Vergleich zu einer Normierung mit dem Wert des Vollmaterials E_s , wie sie in der Literatur häufig verwendet wird. Dabei gilt die Beziehung $\bar{E}^V = c_s E_s$. Die Ergebnisse zeigen, dass die Zellstruktur, das Stegprofil und die Porendichte der Materialien eine entscheidende Rolle für das resultierende Materialverhalten spielen. Obwohl die Porosität konstant bleibt, variiert der berechnete Wert für den normierten effektiven Elastizitätsmodul in Abhängigkeit von Strukturtyp und Porendichte. Die Ergebnisse dieser Studie sind in Abbildung 5.6 dargestellt.

Die Strukturen mit zentroidaler Verteilung weisen im untersuchten Bereich die höchste effektive Steifigkeit auf. Dagegen zeigen Strukturen mit normalverteilter

Zellgröße geringere Werte, gefolgt von Strukturen mit generischer Verteilung, die zu den niedrigsten Werten führen. Dies deutet darauf hin, dass der Ordnungsgrad der Zellstruktur die effektive Steifigkeit erhöht. Bei konstanter Porengröße unterscheidet sich die Steifigkeit von Schäumen mit zentroidaler und generischer Verteilung um einen Faktor von etwa 1,3. Bei allen untersuchten Strukturtypen weisen die Schaumstrukturen mit dreieckigen Stegen eine höhere effektive Steifigkeit auf als jene mit runden Stegen. Die Ergebnisse der Studie zur Variation der Porendichte zeigen einen ansteigenden Trend des normierten effektiven Elastizitätsmoduls bei zunehmender Anzahl von Poren pro Volumeneinheit. Bei konstanter Porosität deutet dies darauf hin, dass Strukturen mit kleineren charakteristischen Längen, also mit kleinen Poren und Stegen, die effektive Steifigkeit maximieren. Zudem zeigt sich, dass die Variation in der Zellgrößenverteilung einen stärkeren Einfluss ausübt als Änderungen des Stegquerschnittsprofils. Die vorliegende Studie zeigt, dass regelmäßige Schaumstrukturen eine höhere effektive Steifigkeit aufweisen. Diese Erkenntnis steht im Einklang mit bestehenden Forschungsergebnissen. Eine vergleichbare Untersuchung von Kaoua et al. [113] an Schäumen mit quadratischen Einheitszellen unter variierender Stegausrichtung ergab eine Variation der Steifigkeit um den Faktor 1,27 zwischen Strukturen mit perfekt ausgerichteten und unregelmäßig ausgerichteten Stegen.

Für eine zweite Studie bilden drei ausgewählte Schaumgeometrien aus dem zuvor beschriebenen Ensemble die Grundlage. Das Ziel besteht darin, den Einfluss der Porosität auf die effektiven elastischen Eigenschaften offenporiger Strukturen zu untersuchen. Die vorhergesagten Werte der effektiven Steifigkeit werden für systematisch variierte Porositätswerte analysiert. Die drei Geometriertypen zeichnen sich durch eine unterschiedliche Verteilung der Zellgrößen aus. Der erste Typ weist eine generische Verteilung auf, der zweite folgt einer vordefinierten Normalverteilung, und der dritte basiert auf einer zentroidalen Verteilung. Alle untersuchten Geometrien verfügen über Stege mit kreisförmigem Profil. Um die Vergleichbarkeit zu gewährleisten, wird für jeden Geometriertyp ein Satz von 13 Strukturen analysiert. Der Festkörpervolumenanteil variiert dabei im Bereich von $c_s \in [0,17; 0,26]$. Dabei erfolgt die Einstellung von c_s über die Porengröße,

während die Stegdicke konstant bleibt. Diese Vorgehensweise basiert auf den Erkenntnissen der vorangegangenen Studie (vgl. Abbildung 5.6). Sie legt nahe, dass eine Erhöhung der Steifigkeit eher erreicht wird, wenn der feste Volumenanteil durch eine Verringerung der Porengröße anstelle einer Vergrößerung der Stegdicke modifiziert wird. Die Ergebnisse dieser Studie belegen eine klare Korrelation zwischen der Porosität, der Zellgrößenverteilung und den effektiven elastischen Eigenschaften der untersuchten Strukturen. Um die Beziehung zwischen Porosität und normiertem effektivem Elastizitätsmodul zu veranschaulichen, zeigt Abbildung 5.7 die ermittelten Daten im Ashby-Diagramm. Die Simulationen liefern die effektive Steifigkeit, anhand derer der Strukturfaktor k extrahiert wird, indem die Gibson-Ashby-Korrelation (5.8) mittels einer Methode der kleinsten Quadrate (LSQ) an die Simulationsdaten angepasst wird. Abbildung 5.7 zeigt sowohl den entsprechenden Fit als auch den von Gibson und Ashby [70] vorgeschlagenen Faktor $k = 1$. Tabelle 5.4 listet die resultierenden Strukturfaktoren des LSQ-Fits sowie die Wurzel aus der Summe der Quadrate (RMS) bezüglich der Abweichung gegenüber des Fits auf. Sie zeigt sowohl Werte für die absolute als auch für eine relative Abweichung, die mit den Werten des Fits normiert ist. Die relative RMS-Abweichung liegt in allen Fällen unter 4 %. Während der lineare Fit bei der Normal- und die generische Verteilung größeren Abweichungen zeigt, erreichen die zentroidalen Strukturen mit einer Abweichung von lediglich 1,7 % eine gute Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit den Vorhersagen der linearen Gibson-Ashby-Korrelation. Die bessere Übereinstimmung ist plausibel, da die Korrelation unter der Annahme regelmäßiger Strukturen abgeleitet wurde. Folglich ist eine bessere Übereinstimmung für Strukturen mit einem höheren Ordnungsgrad zu erwarten. Eine detaillierte Analyse zum Einfluss des gewählten Zufallsgenerators, der für die Voronoi-Zerlegung genutzt wird, findet sich im Anhang Abschnitt A.2. Die verschiedenen Schaumgeometrien führen zu unterschiedlichen Strukturfaktoren, die zwischen 0,87450 und 1,1344 variieren. Die Normalverteilung der Porengrößen ergibt einen Wert, der nahezu Eins beträgt, und bestätigt die von Gibson und Ashby [70] vorgeschlagene Näherung. Mit der generischen und der zentroidalen Verteilung lassen sich jedoch auch Strukturfaktoren deutlich unterhalb und oberhalb von Eins realisieren. Dies verdeutlicht den

signifikanten Einfluss der Strukturgeometrie auf die effektive Steifigkeit. Strukturen mit höherem Ordnungsgrad weisen einen höheren effektiven Elastizitätsmodul auf, wie die durchgeführten Analysen belegen. Insbesondere Strukturen, die mit zentroidaler Porenverteilung generiert sind, erreichten die höchsten Werte für die effektive Steifigkeit. Insgesamt erweist sich die vorgeschlagene Methodik als gut geeignet, um den Einfluss geometrischer Charakteristika von offenporigen Strukturen auf die effektiven elastischen Eigenschaften bei unterschiedlichen Porositäten zu untersuchen.

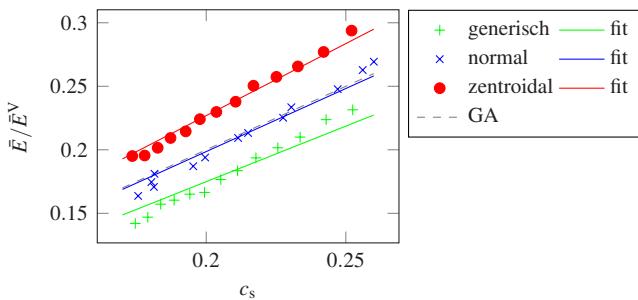


Abbildung 5.7: Der effektive Elastizitätsmodul \bar{E} normiert mit der Voigt-Schranke $\bar{E}^V = c_s E_s$ in Abhängigkeit vom Volumenanteil c_s der festen Phase. Die Studie umfasst Schäume mit kreisförmigem Stegquerschnitt und drei verschiedenen Zellgrößenverteilungen: generisch, normalverteilt und zentroidal. Für jede Struktur wurde eine lineare LSQ-Regression durchgeführt, siehe Tabelle 5.4. Zusätzlich wird die Gibson-Ashby-Korrelation (GA) mit dem Strukturfaktor $k = 1$ dargestellt (schwarz). Bei einem Volumenanteil von $c_s = 0,2$ werden ungefähr zehn Poren pro Volumeneinheit betrachtet (siehe Abbildung 5.6). Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22].

5.3 Implikationen für das Materialdesign fester Schäume

Trotz der vielversprechenden Ergebnisse bleibt anzumerken, dass die vorliegende Studie auch Limitationen aufweist, die an dieser Stelle diskutiert werden. Die Genauigkeit der numerisch vorhergesagten Ergebnisse ist aus verschiedenen

Tabelle 5.4: Lineare Kleinst-Quadrat-Regression von \bar{E}/\bar{E}^V in Abhängigkeit von c_s , gemäß Gleichung (5.8) (Gibson-Ashby) für verschiedene Schaumstrukturen. Der Strukturfaktor k sowie die absolute und relative Wurzel aus der Summe der Quadrate (RMS) bezüglich der Abweichungen des Fits sind angegeben. Eigene Tabelle; vorveröffentlicht in [22]; sprachlich angepasst.

Struktur	k	absolute RMS	relative RMS
generisch	0,87450	0,0070043	3,8994 %
normal	0,99294	0,0062808	3,0775 %
zentroidal	1,1344	0,0038999	1,6802 %

Gründen begrenzt. So entstehen Diskretisierungsfehler sowohl bei den Simulationsergebnissen als auch bei der numerischen Integration zur Bestimmung der effektiven Werte, die die Ergebnisse beeinflussen. Zwar wurden für eine einzelne Struktur verschiedene Auflösungen untersucht, wobei nur geringe Abweichungen im Ergebnis festgestellt wurden, jedoch konnte aufgrund des hohen Rechenaufwands keine umfassende Konvergenzstudie für alle untersuchten Strukturen durchgeführt werden. Zudem wurde die Größe der Strukturen kleinstmöglich gewählt, sodass sie entsprechend der Untersuchungen die Repräsentativität des Gebiets gewährleistet. Dennoch verbleiben Unsicherheiten. Größere Gebiete könnten die Repräsentativität und damit die Genauigkeit weiter erhöhen, insbesondere da sich die bisherigen Untersuchungen auf eine Normalverteilung der Porengröße beschränken. Weiterführende Studien zu Auflösung und Gebietsgröße sind wünschenswert, um die Ergebnisse quantitativ zu verifizieren und ihre Allgemeingültigkeit zu bestätigen. Um die Einschränkungen zu vermeiden, die mit synthetischen Strukturen einhergehen, ist es sinnvoll, dreidimensionale Bilddaten realer Proben als Validierungsmodelle zu verwenden. Dadurch lassen sich Aussagen über deren Eigenschaften präziser treffen. Darüber hinaus können verschiedene strukturelle Parameter die Ergebnisse beeinflussen, die in dieser Studie jedoch nicht berücksichtigt wurden, wie etwa die Porengrößenverteilung oder Inhomogenitäten im Stegprofil. Zukünftige Forschungstätigkeiten sollten darauf abzielen, Modelle zu entwickeln, die diese strukturellen Eigenschaften abbilden. Schließlich sollte die Untersuchung weiterer Materialeigenschaften in Betracht gezogen werden. In der vorliegenden Arbeit wird ausschließlich der effektive

Elastizitätsmodul als Indikator für die Qualität einer Struktur zugrunde gelegt. Eine detailliertere Analyse, beispielsweise der Von-Mises-Vergleichsspannung oder des Druckfeldes, wäre vorteilhaft, da diese möglicherweise andere Abhängigkeiten und Trends als die effektive Steifigkeit aufweisen könnten.

Insgesamt erweist sich die Homogenisierungsmethode als vielseitiges Werkzeug zur Bestimmung effektiver elastischer Eigenschaften offenporiger Metallschäume. Das Ziel dieser Studie bestand darin, den Einfluss verschiedener geometrischer Faktoren auf die mechanische Leistungsfähigkeit von Schaumstrukturen zu verstehen. Um die effektive Steifigkeit mit der Porosität unter Berücksichtigung verschiedener struktureller Parameter zu verknüpfen, wurden Korrelationen vom Gibson-Ashby-Typ etabliert. Die Erkenntnisse dieser Arbeit haben das Potenzial, neue Einblicke in die Struktur-Eigenschafts-Beziehungen poröser Materialien zu liefern. Die Ergebnisse legen nahe, dass eine Erweiterung der Untersuchung über die aktuellen Limitationen der Studie hinaus das Verständnis für die Zusammenhänge zwischen Geometrie und Materialverhalten vertiefen könnte. Künftigen Studien ist es vorbehalten, zusätzliche Parametervariationen einzubeziehen und neben dem Elastizitätsmodul weitere Größen zu analysieren, etwa die Poissonzahl oder die lokale Spannungsverstärkung. Darüber hinaus ließe sich die vorgestellte Methodik auf andere poröse Strukturen anwenden, um deren elastisches Verhalten unter verschiedenen Belastungszuständen vorhersagen. Diese Erkenntnisse könnten für die gezielte Gestaltung und Optimierung offenporiger Metallschäume für spezifische Anwendungen wegweisend sein und die Entwicklung neuer poröser Materialien mit verbesserten Eigenschaften fördern.

5.4 Zusammenfassung

Im Mittelpunkt der vorliegenden Arbeit stehen Struktur-Eigenschafts-Beziehungen von Schäumen. Die vorgestellte Studie analysiert den Einfluss der Topologie von Metallschäumen auf deren effektive elastische Eigenschaften. Ein verbesserter Algorithmus zur digitalen Erzeugung von Schaumstrukturen wurde entwickelt.

Er ermöglicht die Generierung von Strukturen mit vordefinierten geometrischen Parametern. Diese Parameter umfassen die Größenverteilung der Zellen (generisch, normal, zentroidal), die Stegquerschnittsgeometrie (kreisförmig, dreieckig) und die Porengröße. Um das mechanische Verhalten der generierten Strukturen zu untersuchen, kommen numerische Simulationen von Druckversuchen im elastischen Bereich zum Einsatz. Zur Ermittlung der effektiven Steifigkeit von isotropen Schäumen wird eine Homogenisierungsmethode vorgestellt, die auf einer Methode der kleinsten Quadrate basiert. Mit diesem Ansatz reicht es aus, eine einzige Simulation durchzuführen, um die effektive Steifigkeit einer Struktur zu bestimmen. Zudem liefert sie ein Fehlermaß, das die Beurteilung der Qualität der Homogenisierung ermöglicht. Die Studie untersucht den Einfluss der Gebietsgröße auf die Isotropie der Schaumstrukturen. Bei den analysierten offenporigen Schäumen zeigt sich, dass ein repräsentatives Volumen eine Kantenlänge des Gebiets von mindestens dem Achtfachen der mittleren Porengröße des Schaums erfordert. Dies entspricht einer Anzahl von mindestens etwa 280 Poren innerhalb des Gebiets.

Der vorgestellte Ansatz kombiniert die digitale Generierung fester Schäume mit Simulation und Homogenisierung mechanischer Eigenschaften und ermöglicht umfangreiche Parameterstudien. So konnten zahlreiche verschiedene Schaumgeometrien systematisch analysiert werden. Die Ergebnisse belegen einen signifikanten Einfluss der Strukturgeometrie auf die mechanischen Eigenschaften. In der Parameterstudie variiert der Strukturfaktor zur Anpassung der Gibson-Ashby-Korrelation zwischen 0,875 und 1,134. Dabei weisen Strukturen mit zentroidaler Zellverteilung die vorteilhaftesten Eigenschaften hinsichtlich der effektiven Steifigkeit auf. Bemerkenswert ist zudem, dass bei konstanter Porosität eine Verringerung der Porengröße — und damit der Stegdicke — zu einer Steigerung der Steifigkeit führt.

Eine vielversprechende Erweiterung dieser Arbeit besteht in der Anwendung von automatisierten Optimierungsalgorithmen. Durch ihren Einsatz können gezielt Strukturgeometrien identifiziert und systematisch so angepasst werden, dass eine vorgegebene Zielfunktion, wie beispielsweise die maximale effektive Steifigkeit,

erreicht wird. Hierfür bieten sich insbesondere heuristische Suchalgorithmen wie die Partikelschwarmoptimierung an [114]. Zudem wäre eine Erweiterung des Materialmodells in den elastisch-plastischen Bereich wünschenswert, um ein umfassenderes Verständnis des Materialverhaltens zu ermöglichen und weitere relevante Eigenschaften zu untersuchen, die eine rein elastische Betrachtung nicht erfasst. Beide Aspekte sollten in zukünftigen Forschungsarbeiten näher untersucht werden.

6 Zusammenfassung und Ausblick

6.1 Relevanz und Hintergrund der Arbeit

Neuartige Materialien und hochentwickelte Werkstoffe sind für moderne technische Herausforderungen unerlässlich und entscheidend für den technologischen Fortschritt. Die komplexen Anforderungen an Bauteile und Werkstoffe in verschiedenen Anwendungsbereichen bedingen die Notwendigkeit von Materialien mit spezifischen Eigenschaftsprofilen. Poröse Materialien und Schäume kommen in vielen technischen Anwendungen aufgrund ihrer vorteilhaften Eigenschaften, bestimmt durch ihr großes Verhältnis von Oberfläche zu Volumen, zum Einsatz. Traditionelle Fertigungsverfahren für feste Schäume stoßen oft an ihre Grenzen, wenn es darum geht, gezielt gewünschte physikalische Eigenschaften zu erreichen und Materialien mit charakteristischen Merkmalsstrukturen zu entwickeln. Das Verfahren der Schaumtemplatierung, bei dem flüssige Schäume als Vorläufer für feste makroporöse Strukturen dienen, bietet einen innovativen Ansatz zur Herstellung von Werkstoffen mit maßgeschneiderten Strukturen und vorhersagbaren Eigenschaften. Computergestützte Methoden spielen eine entscheidende Rolle bei der Prozessoptimierung der Templatierungsroute, indem sie Einblicke in die Bildung der Schaumkristallstruktur ermöglichen und diese mit den resultierenden physikalischen Eigenschaften verknüpfen, was zu einer effizienteren Entwicklung von Materialien mit angepassten Eigenschaften führt.

Das Hauptziel dieser Arbeit war die Entwicklung eines umfassenden Ansatzes zur Optimierung von Schaumtemplatierungsprozessen, um durch die Verknüpfung von Mikrostruktur und resultierenden Materialeigenschaften der Schäume Materialien mit maßgeschneiderten Mikrostrukturen und vorhersagbaren Eigenschaften zu

erreichen. Orientiert am Templatierungsprozess, der flüssige und feste Schäume beinhaltet, setzten zwei Teilziele an. Das erste Teilziel war es, Korrelationen zwischen mikroskaligen physikalischen Einflussgrößen und der dynamischen Strukturbildung von makroskopischem flüssigen Schaum herzustellen. Das zweite Teilziel bestand darin, feste Metallschäume digital zu erzeugen und zu simulieren, und ihre Struktur unter mechanischer Belastung hinsichtlich ihrer effektiven Steifigkeit zu optimieren.

Um die Ziele dieser Arbeit zu erreichen, wurde ein vielseitiger methodischer Ansatz verfolgt. Zunächst wurde ein multiskaliger Modellierungsrahmen entwickelt, der auf der Phasenfeldmethode und numerischen Simulationen basierte. Anknüpfend wurde ein Modell zur präzisen Abbildung des Alterungsprozesses von flüssigem Schaum entwickelt und validiert. Anschließend wurde der Einfluss geometrischer Parameter auf das Materialverhalten von festen Schäumen unter mechanischer Belastung untersucht. Ein wesentlicher Schritt war die Schaffung eines Workflows, der unter Anwendung des Konzepts der digitalen Zwillinge die Erzeugung, Simulation und Analyse verschiedener fester Schaumstrukturen ermöglichte, wobei der Fokus auf deren effektiver Steifigkeit lag. Damit wurden Korrelationen zwischen mikrostrukturellen Parametern und den resultierenden physikalischen Eigenschaften des Schaums etabliert. Dieser systematische Ansatz ermöglichte eine umfängliche Untersuchung der Struktur-Eigenschafts-Beziehungen in Schäumen und legte den Grundstein für die Optimierung von Schaumtemplatierungsprozessen.

6.2 Mikrostruktur flüssiger Schäume während der Schaumalterung

Um die Mikrostrukturentwicklung flüssiger Schäume während der Schaumalterung zu beschreiben, wurde ein Modell entwickelt. Dieses basiert auf einem Phasenfeld-Modell und berücksichtigt den Gasdruck innerhalb der Blasen unter

der Annahme eines idealen Gases. Die Alterungsmechanismen wurden in Algorithmen umgesetzt, die sich besonders für großskalige Mikrostruktursimulationen eignen. Sie umfassen das spontane Reißen trennender Filme als stochastischen Prozess und beschreiben sukzessive Koaleszenz von Blasen. Darüber hinaus implementiert das Modell die Ostwald-Reifung als Alterungsmechanismus und beschreibt den Gastransfer zwischen Blasen.

Die Anwendung des Modells in numerischen Simulationen zeigte, dass es die Mikrostrukturentwicklung in alternden Schäumen akkurat vorhersagt und die Dynamik der Schaumalterung präzise abgebildet wird. Die durchgeführten umfassenden Parameterstudien ermöglichen eine systematische Untersuchung verschiedener Geometrien trockener Schäume, wobei der Einfluss der initialen Schaumgeometrie und der Filmplatzwahrscheinlichkeit auf die Entwicklung der gesamten Schaumstruktur analysiert wurde. Statistische Analysen quantifizierten die Mikrostruktur des Blasenensembles anhand von Volumen, Gasdruck, Blasenform und -konnektivität und charakterisierten damit die dynamische Entwicklung während des Zerfalls.

Die Flexibilität des Modells erlaubt es, komplexere mikrostrukturelle physikalische Prozesse einfach zu integrieren und damit eine noch realitätsnähere Darstellung von makroskopischen Schäumen zu erreichen. Erweiterungen können die Integration von Gravitationseffekten und die Kopplung aller drei Alterungsmechanismen – Drainage, Koaleszenz und Ostwald-Reifung – umfassen. Darüber hinaus ermöglichen ergänzte Benetzungsrandbedingungen die Untersuchung von Schäumen mit variablem Flüssigkeitsanteil. Der Übergang zur Simulation dreidimensionaler Geometrien verspricht, die Zerfallsdynamik von Schäumen unter realitätsnäheren Bedingungen detaillierter zu erfassen, einschließlich der Dynamik in räumlich begrenzten Umgebungen wie in porösen Strukturen. Erweiterte numerische Experimente würden einen breiteren Parameterraum erschließen, insbesondere hinsichtlich Variationen der Oberflächenspannung und komplexerer initialer Schaumgeometrien. Eine Kalibrierung der Simulationssetups und -ergebnisse anhand physikalischer Einheiten würde den Vergleich mit empirischen Studien erleichtern.

6.3 Einfluss der Mikrostruktur auf effektive Eigenschaften

Zur Umsetzung des Konzepts des digitalen Zwillings für feste Schäume wurde ein verbesserter Algorithmus zur digitalen Erzeugung von Schaumstrukturen entwickelt. Auf dessen Basis wurden Strukturen mit präzise definierten geometrischen Parametern generiert, einschließlich Zellgrößenverteilung, Stegquerschnittsgeometrie und Porengröße. Ein Kernaspekt der Methode zur Ermittlung der effektiven Steifigkeit ist die Verwendung einer Homogenisierungsmethode, die es erlaubt, die effektive Steifigkeit einer Struktur durch eine einzige Simulation zu bestimmen, und die gleichzeitig ein Fehlermaß zur Beurteilung der Homogenisierungsqualität liefert.

Ergebnisse numerischer Simulationen von Druckversuchen im elastischen Bereich klärten den Einfluss der Gebietsgröße auf die Isotropie der Schaumstrukturen. Dabei wurde ein repräsentatives Volumen mit einer Kantenlänge von mindestens dem Achtfachen der mittleren Porengröße ermittelt. Studien eines breiten Parameterraums erlaubten eine systematische Analyse zahlreicher Schaumgeometrien. Die Ergebnisse zeigten eine signifikante Variation des Strukturfaktors zur Anpassung der Gibson-Ashby-Korrelation zwischen 0,875 und 1,134, wobei Strukturen mit zentroidaler Zellverteilung die vorteilhaftesten Eigenschaften hinsichtlich der effektiven Steifigkeit aufwiesen. Außerdem ließ sich aus den Studien ableiten, dass bei konstanter Porosität eine Verringerung der Porengröße zu einer Steigerung der Steifigkeit führt.

Weiterführend lässt sich die Methodik weiter verfeinern und ihre Anwendbarkeit erweitern, beispielsweise durch Studien zu Auflösung und Gebietsgröße sowie die Verwendung digitaler Zwillinge realer Proben als Validierungsmodelle. Modelle zur Abbildung zusätzlicher struktureller Eigenschaften und Studien weiterer Materialeigenschaften neben dem Elastizitätsmodul stellen ebenfalls eine vielversprechende Erweiterung dar. Darüber hinaus ermöglicht ein ergänzendes Materialmodell in den elastisch-plastischen Bereich ein umfassenderes

Verständnis des Materialverhaltens. Die entwickelte Methodik kann auf andere poröse Strukturen angewendet werden, um deren elastisches Verhalten unter verschiedenen Belastungszuständen vorherzusagen.

6.4 Optimierte Eigenschaften durch maßgeschneiderte Schaumstrukturen

Diese Arbeit könnte in weiteren Forschungsprojekten fortgeführt werden. Die vorhandenen Modelle zur Abbildung der Mikrostrukturentwicklung könnten durch Erweiterungen auf multiplen Skalen wie etwa eine detailliertere Einbindung zusätzlicher physikalischer Parameter weiter verfeinert werden. Insbesondere könnten die Effekte von mehrphasigen Materialien, anisotropen Zellstrukturen oder kombinierten Belastungen (elastisch-plastisch) detaillierter untersucht werden. Um die Relevanz der Simulationsergebnisse zu untermauern, wäre eine engere Kopplung von Simulationen mit experimentellen Daten empfehlenswert. Beispielsweise könnten physikalische Experimente durchgeführt werden, die auf den simulierten Schaumstrukturen basieren, um so die Modellvorhersagen zu überprüfen.

Die Vorstellung der im Rahmen dieser Dissertation erarbeiteten Methoden kann als Leitfaden für Anwenderinnen und Anwender dienen, die Schäume mit präzise vordefinierten Eigenschaften erstellen und auf verschiedene Szenarien anpassen möchten. Auf Basis der vorgestellten statistischen Analysemöglichkeiten und Charakterisierung der Mikrostruktur können Anwenderinnen und Anwender eigene systematische Studien auslegen und analysieren. Der gesamte Prozess der Schaumtemplatierung kann entlang der einzelnen Schritte mit seinen komplexen morphologischen und topologischen Eigenschaften abgebildet werden, und die Schaumstruktur (z.B. Porengröße, Porenverteilung, Stegdicke) gezielt angepasst werden, um spezifische Materialeigenschaften zu erreichen. Durch die Verknüpfung von Mikrostruktur und makroskopischen Eigenschaften kann die Leistungsfähigkeit von Schäumen unter verschiedenen Belastungsbedingungen

vorhergesagt werden, ohne aufwendige physische Experimente durchzuführen. Zudem besteht die Möglichkeit, verschiedene Schaumstrukturen digital zu generieren und zu testen, um so Produktentwicklungszyklen erheblich zu verkürzen. Die Erkenntnisse der Arbeit könnten zur Entwicklung von effizienteren Leichtbaumaterialien beitragen, die in der Luft- und Raumfahrt, im Fahrzeugbau und in der Energietechnik Anwendung finden. Speziell durch die gezielte Anpassung von Schaumstrukturen könnte man Materialien entwickeln, die hohe Steifigkeit bei gleichzeitig geringer Dichte aufweisen. Auch spielen poröse Materialien eine wichtige Rolle bei der Entwicklung von biomedizinischen Implantaten (z.B. Knochenersatz), wo die poröse Struktur sowohl die biologische Integration als auch die mechanischen Eigenschaften verbessert. Zukünftige Arbeiten könnten untersuchen, wie die Methodik der Schaumtemplating und digitale Zwillinge bei der Herstellung solcher Implantate Anwendung finden.

Ein interessantes Zukunftsthema ist die Weiterentwicklung der digitalen Zwillinge. Durch die Verknüpfung von Simulationen mit realen Fertigungsprozessen könnten digitale Zwillinge in der Materialherstellung eine noch größere Rolle spielen. Es wäre denkbar, dass Fertigungsparameter durch Echtzeitanalysen der entstehenden Mikrostrukturen während des Produktionsprozesses optimiert werden. Auch könnte eine mögliche Erweiterung der Forschung darin bestehen, Methoden Künstlicher Intelligenz (KI) und des maschinellen Lernens einzubinden, um komplexe Zusammenhänge in den mikrostrukturellen Entwicklungen zu erkennen und zu optimieren. KI könnte beispielsweise genutzt werden, um die Parameter der Templating noch präziser auf die gewünschten Materialeigenschaften abzustimmen.

Aufbauend auf der vorliegenden Arbeit könnten zukünftige Forschungsarbeiten darauf abzielen, Materialien zu entwickeln, die nicht nur mechanisch, sondern auch thermisch, elektrisch oder chemisch optimiert sind. Zum Beispiel könnten Materialien als Katalysatoren in chemischen Reaktionen fungieren oder eine hohe elektrische oder thermische Leitfähigkeit aufweisen, während sie gleichzeitig mechanisch belastbar sind. Ein weiterer Schritt könnte die Entwicklung von anpassbaren Materialien sein, die ihre Eigenschaften (z.B. Steifigkeit, Porosität)

während der Anwendung ändern können, etwa durch externe Einflüsse wie Temperatur oder Druck.

Die Übertragung der in der Dissertation entwickelten Modelle und Verfahren auf industrielle Maßstäbe bleibt eine Herausforderung. Künftige Forschung könnte sich darauf konzentrieren, wie die Verfahren zur Massenproduktion von Materialien optimiert werden könnten. Angesichts steigender Umweltanforderungen könnten zukünftige Studien untersuchen, wie nachhaltige oder recycelbare poröse Materialien entwickelt werden können, die den heutigen industriellen Anforderungen gerecht werden, ohne die Umwelt zu belasten.

Die vorliegende Arbeit ermöglicht durch die Verknüpfung von Mikrostrukturbildung und mechanischen Eigenschaften ein tiefgreifendes Verständnis der Struktur-Eigenschafts-Beziehungen in Schäumen. Der erarbeitete vollständig digitale Workflow erlaubt die gezielte Entwicklung maßgeschneiderter Schaumwerkstoffe, indem die Schaumgeometrie systematisch reguliert und die effektiven Materialeigenschaften aus Simulationsdaten extrahiert werden, womit poröse Materialien anwendungsspezifisch passgenau realisiert werden können.

A Anhang

A.1 Diskussion der Längenskalen in den betrachteten Problemen

Für die in dieser Arbeit betrachteten festen Schäume treten im Allgemeinen drei Längenskalen auf. Diese sind die (mittlere) Porengröße s , die (mittlere) Stegdicke d_s und die Kantenlänge L des repräsentativen Volumenelements (RVE). Wenn ein konstanter Volumenanteil $c_s = \text{const}$ erreicht werden soll, erlaubt diese Randbedingung nur die unabhängige Wahl von zwei Längenskalen. Für die Untersuchung in Abbildung 5.5 wird die zusätzliche Bedingung $d_s/s = \text{const}$ hinzugefügt. Daher kann nur die Länge des Gebiets variiert werden, was in dieser Studie durchgeführt wird. Dies bedeutet, dass ähnliche Schaumstrukturen betrachtet werden und, wie in der Studie gezeigt, die Variation von L keine Auswirkungen hat, solange das Volumen noch repräsentativ ist. Im Gegensatz dazu werden für Abbildung 5.6 die Bedingungen $c_s = \text{const}$ und $L = \text{const}$ betrachtet, wodurch ein festes Gebietsvolumen verwendet wird. Auch hier kann nur eine der drei Längenskalen frei gewählt werden. Wenn eine kleinere Porengröße betrachtet wird, was eine größere Anzahl von Poren im Volumen bedeutet, nimmt die Stegdicke entsprechend ab, um den konstanten Feststoffvolumenanteil zu erhalten. Dies führt zu einem anderen Schaum mit anderen mechanischen Eigenschaften, wie in Abbildung 5.6 gezeigt. Dies ist der Fall, obwohl alle Schäume den gleichen festen Volumenanteil und damit das gleiche Gewicht aufweisen. In Abbildung A.1 ist die Korrelation zwischen Stegdicke, Porengröße und Poren pro Volumeneinheit für die Strukturen aus Abbildung 5.6 dargestellt.

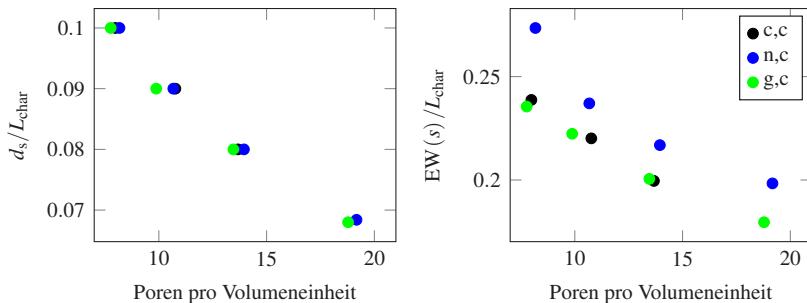


Abbildung A.1: Korrelation zwischen der Stegdicke d_s , ausgedrückt durch den mittleren Stegdurchmesser, der mittleren Porengröße $EW(s)$ und der Anzahl der Poren pro Volumeneinheit bei konstantem Feststoffvolumenanteil $c_s = 0,2$ in Bezug auf die Strukturen in Abbildung 5.6. Die Längenskalen sind mit der charakteristischen Länge $L_{\text{char}} \approx L/4$ normiert, die einem Viertel der Kantenlänge des Einheitsvolumens entspricht. Eigene Abbildung, vorveröffentlicht in [22].

A.2 Einfluss des zufälligen Seeds auf generische Verteilungen

Die Strukturen mit der generischen Porengrößenverteilung sind die unregelmäßigsten in der vorliegenden Arbeit untersuchten Strukturen und zeigen daher größere Abweichungen hinsichtlich der effektiven Steifigkeit im Vergleich zur normalen und insbesondere zur zentroidalen Verteilung (siehe Tabelle 5.4). Daher werden verschiedene generische Verteilungen verwendet, um den Einfluss der Zufälligkeit der stark inhomogenen Strukturen zu untersuchen, der durch den im Strukturgenerierungsalgorithmus verwendeten zufälligen Seeds (engl. *random seed*) repräsentiert wird. Es werden Simulationen mit drei verschiedenen zufälligen Seeds durchgeführt. Zusätzlich wird ein Ensemblemittelwert der drei Seeds betrachtet. Die Ergebnisse sind in Abbildung A.2 zusammen mit der entsprechenden Gibson-Ashby-Anpassung dargestellt. Seed 3 und noch stärker Seed 1 zeigen ein teilweise nicht-monotonen Verhalten in c_s und somit recht große Abweichungen der Anpassung. Das Ensemble aller drei ergibt $k = 0,855\,52$ mit einem RMS-Fehler von 4,3187 %. Seed 2 liefert die beste Anpassung und ein monotonen

Verhalten und wird daher in Abbildung 5.7 verwendet. Der relativ hohe Einfluss des zufälligen Seeds begrenzt die hohe Signifikanz quantitativer Ergebnisse für die generische Verteilung. Dennoch wird die Tendenz von $k \approx 0,85 (\pm 0,05)$ beobachtet. Somit kann immer noch eindeutig ein signifikant niedrigerer Strukturfaktor als bei der normalen und zentroidalen Verteilung festgestellt werden. Es ist zu beachten, dass die normale und zentroidale Verteilung einen höheren Ordnungsgrad in der resultierenden Struktur ergeben und daher weniger Abweichungen und eine deutlich bessere Anpassung an die Gibson-Ashby-Korrelation zeigen. Dies gilt insbesondere für die zentroidale Verteilung. Trotz der relativ hohen Abweichung der Ergebnisse für die generischen Strukturen stützen sie immer noch die Kernaussage der vorliegenden Arbeit, nämlich dass ein starker Einfluss der Schaumgeometrie auf die effektive Steifigkeit besteht.

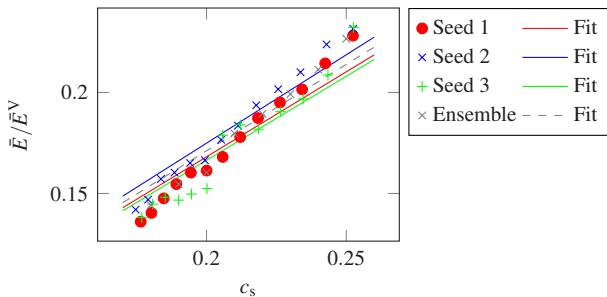


Abbildung A.2: Vergleich des Einflusses verschiedener zufälliger Seeds auf die generische Porengrößenverteilung. Die Strukturfaktoren für die verschiedenen Seeds sind $k = 0,84075$, $k = 0,87450$ und $k = 0,83193$. Die entsprechenden relativen RMS-Abweichungen der Anpassung sind 5,5828 %, 3,8994 % und 4,6619 % Eigene Abbildung, vorveröffentlicht in [22].

Liste eigener Vorveröffentlichungen

1. **J. Holland-Cunz**, A. Reiter, J. Hötzer, A. August, M. Selzer, B. Nestler. Numerical investigation of bubble dynamics in ageing foams using a phase-field model. Computational Materials Science, 248, 113557, 2025.
2. B. Nestler, F. Finsterwalder, L. Wallat, L. Griem, W. Kunz, M. Reder, **J. Holland-Cunz**, F. Jamshidi, M. Selzer. Neue Materialien mit poröser Mikrostruktur: Beschleunigte Entwicklung durch Simulationen und Datenanalyse. Athene - Magazin der Heidelberger Akademie der Wissenschaften 2/2023, November 2023.
3. M. Reder*, **J. Holland-Cunz***, P. Lorson, A. August, B. Nestler. Simulative Determination of Effective Mechanical Properties for Digitally Generated Foam Geometries. Advanced Engineering Materials, 25, 2300340, 2023.
(* geteilte Hauptautorenschaft)
4. **J. Holland-Cunz**, M. Laqua, N. P. Ho, F. Wagner, A. August, B. Nestler. Vom Labor in die digitale Welt. Forschung aktuell 2023, 25, 32-36, 2023.
5. **J. Holland-Cunz**, A. August, M. Reder, B. Nestler. Materialwissenschaft um Luflöcher. Forschung aktuell 2022, 16-19, 2022.

Abbildungsverzeichnis

1.1	Optimierung des Herstellungsprozesses für feste Schaumstrukturen (Schaumtemplatierung) durch computergestützte Methoden. Markierungen zeigen die drei Ansatzpunkte dieser Arbeit.	4
2.1	Schematische Darstellung eines flüssigen Schaumes mit den Charakteristika von der Mikro- zur Makroskala.	17
2.2	Stabilisierung einer Gasblase. Dargestellt sind die Krümmungsgtriebene Oberflächenminimierung und die Gegenkraft durch Gasdruck innerhalb der Blase.	22
2.3	Schematische Darstellung der grundlegenden Prozesse der Schaumentwicklung auf der Blasenskala. Die Alterungsmechanismen umfassen (a) die Koaleszenz, (b) die Ostwald-Reifung, und (c) die Drainage.	24
2.4	Allgemeines Spannungs-Verzerrungs-Diagramm von Metallschäumen. Gekennzeichnet sind die Plateauspannung σ_{PL} , die plastische Versagensspannung σ_{PCS} und der Verdichtungspunkt ε_d . Darstellung in Anlehnung an [58].	30
3.1	Das Reißen eines Filmes und die Vereinigung zweier zuvor getrennter Blasen zu einer einzigen, begleitet von der Relaxierung der Struktur. Der Algorithmus stellt sicher, dass das Gas als ideales Gas behandelt wird und das ideale Gasgesetz für die Vereinigung erfüllt ist. Die Farben kennzeichnen verschiedene Werte für den Gasdruck. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	44

3.2	Darstellungen des Gastransfers durch einen einzelnen Schaumfilm, des Gasflusses in einem Blasenensemble in einem trockenen Schaum und des Modellierungsansatzes: Für jedes Volumenelement in der hervorgehobenen Grenzfläche wird die Gasflussrate berechnet, und der Gastransfer erfolgt durch eine Aktualisierung der Volumina der angrenzenden Blasen.	48
3.3	Schematische Darstellung des algorithmischen Generierungsverfahrens für offenporige Schaumstrukturen: (a) zufällig verteilte Voronoi-Zellen, die um Generatorpunkte herum erzeugt werden, (b) Zellkanten und Eckpunkte, und (c) Erzeugung von Stegen entlang der Zellkanten von (b). Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22].	50
3.4	Drei beispielhafte Schaumstrukturen mit gleichem festen Volumenanteil $c_s = 0,2$ und variierenden Geometrien, die durch die entsprechenden geometrischen Parameter der Porengrößenverteilung definiert sind: (a) generische Verteilung, (b) Normalverteilung, (c) zentroidale Verteilung. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22].	53
4.1	Schematische Darstellung des dreistufigen Generierungsroutine für Schaumstrukturen inklusive des Equilibrierungsprozesses: (a) Vorläufige Anordnung des Blasenensembles. (b) Aufgeprägte Verteilung der Zielvolumina auf die Blasen. (c) Relaxierte Struktur im energetisch günstigen Zustand, erreicht durch Verringerung und Vergrößerung der Blasenvolumina. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	62
4.2	Entwicklung der freien Energie während des Equilibrierungsprozesses, normierte Werte. Gezeigt für eine exemplarische Struktur während der Relaxation. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	64

4.3	Charakterisierung des Blasenensembles. Blasengrößenverteilung verschiedener Anfangskonfigurationen $\sigma_0 - \sigma_4$, für die die Dispersität variiert. Blasenvolumen normiert mit mittlerem Blasenvolumen $\langle A \rangle$. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	66
4.4	Schaumstrukturen mit variierender Dispersität, die als Ausgangsstrukturen für Zerfallsimulationen dienen. Dargestellt sind quasi-monodisperse (σ_0) und polydisperse Schaumstrukturen ($\sigma_1 - \sigma_4$) mit steigender Heterogenität. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	67
4.5	Skizze aller im Rahmen der Studie durchgeführten Simulationen des Schaumzerfalls. Ausgehend von fünf Strukturen mit unterschiedlicher Dispersität ($\sigma_0 - \sigma_4$) werden Simulationen für jeweils elf verschiedene Filmstabilitäten durchgeführt, $p_0 - p_{10}$. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	67
4.6	Entwicklung der freien Energie während des Zerfallsprozesses, beispielhaft gezeigt für Struktur σ_2 und Wahrscheinlichkeit für das Reißen von Filmen p_5 (mittel). Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	68
4.7	Druckdifferenz ΔP als Funktion des reziproken Radius r_{eq} , einer in einer flüssigen Matrix eingebetteten Blase im Gleichgewicht. Die Daten zeigen Ergebnisse für drei verschiedene Werte der Oberflächenenergie $\gamma_{\alpha\beta}$ in einem zweidimensionalen Setup. Die schwarze Linie stellt die Lösung dar, die sich aus der theoretischen Young-Laplace-Gleichung ergibt. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	72
4.8	Serie von Einzelaufnahmen aus der Simulation, die die zeitliche Entwicklung des Blasenensembles zeigen. Die Morphologie ist für eine mäßig ungeordnete Anfangsstruktur mit Dispersität σ_2 und mittlerer Wahrscheinlichkeit für das Reißen von Filmen p_5 dargestellt. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	73

4.9 Serie von Simulationssnapshots, die die zeitliche Entwicklung des Blasenensembles zeigen. Die Morphologie ist für die Anfangsstruktur σ_2 dargestellt, mit drei verschiedene Wahrscheinlichkeiten für das Reißen von Filmen, p_0 (hoch), p_5 (mittel) und p_{10} (niedrig). Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	74
4.10 Zeitliche Entwicklung des Blasenensembles. Die Morphologie ist für variierende Anfangsdispersitäten bei gleicher mittlerer Wahrscheinlichkeit für das Reißen von Filmen, p_5 , dargestellt. Snapshots zeigen die Anfangskonfigurationen (erste Spalte) und die Konfigurationen am Ende der Simulation (zweite Spalte). Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	75
4.11 Zeitliche Entwicklung des Blasenensembles. Gezeigt die zeitabhängige Anzahl der Blasen unter parametrischer Variation der Wahrscheinlichkeit für das Platzen von Filmen p_n , exemplarisch für die Ausgangskonfiguration σ_2 . Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	77
4.12 Entwicklung unterschiedlich dispergierter Ausgangsstrukturen bei gleicher mittlerer Wahrscheinlichkeit für das Platzen von Filmen p_5 , mit dem Resultat unterschiedbarer Zerfallsraten. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	78
4.13 Entwicklung des Blasenensembles mit der Zeit. Zeitabhängige mittlere Blasenvolumina der Ensembles sind unter parametrischer Variation der Filmplatzwahrscheinlichkeit p_n für die Ausgangsstruktur σ_2 dargestellt. Das mittlere Volumen ist auf das maximale mittlere Volumen normiert. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	79

4.14 Entwicklung der Blasenvolumina für die Ausgangsstruktur σ_2 unter einer mittleren Filmplatzwahrscheinlichkeit p_5 . Das Ensemble ist zu verschiedenen Zeitschritten während der Evolution charakterisiert, wobei Absolutwerte für das Volumen A und auf das mittlere Volumen normierte Werte gezeigt sind, $A/\langle A \rangle$. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	80
4.15 Vergleich der Volumenverteilungen bei konstanter initialer Dispersität der heterogenen Struktur σ_4 für drei verschiedene Platzwahrscheinlichkeiten: hoch p_0 , mittel p_5 , niedrig p_{10} . Die Teilabbildungen (a) – (d) zeigen die Wahrscheinlichkeitsdichte des normierten Blasenvolumens $A/\langle A \rangle$ zu vier verschiedenen Zeitpunkten. Ein Fit auf eine logarithmische Normalverteilung ist als Orientierungshilfe enthalten. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	81
4.16 Vergleich der Volumenverteilungen bei konstanter initialer Dispersität der heterogenen Struktur σ_2 für drei verschiedene Platzwahrscheinlichkeiten: hoch p_0 , mittel p_5 , niedrig p_{10} . Die Teilabbildungen (a) – (d) zeigen die Wahrscheinlichkeitsdichte des normierten Blasenvolumens $A/\langle A \rangle$ zu vier verschiedenen Zeitpunkten. Ein Fit auf eine logarithmische Normalverteilung ist als Orientierungshilfe enthalten. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	82
4.17 Entwicklung des Blasenensembles mit der Zeit. Zeitabhängige mittlere Blasenvolumina $\langle A \rangle$ für fünf verschiedene Ausgangskonfigurationen mit Dispersitäten $\sigma_0 - \sigma_4$. Die Filmplatzwahrscheinlichkeit ist mittel, p_5 . Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	84
4.18 Charakterisierung des Blasenensembles. Blasenvolumenverteilung verschiedener Ausgangskonfigurationen mit Dispersität $\sigma_0 - \sigma_4$ bei fester mittlerer Platzwahrscheinlichkeit p_5 . Analyse des Blasenvolumens zu zwei verschiedenen Zeitpunkten während der Entwicklung. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	85

4.19	Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks in den Blasen. Ensemblewerte für die Schaumstruktur σ_2 , variierte Wahrscheinlichkeit für das Platzen von Filmen. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	87
4.20	Zeitliche Entwicklung des Gasdrucks in den Blasen. Ensemblewerte für Schaumstrukturen mit unterschiedlichem Grad an Ordnung. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	88
4.21	Verteilung des Gasdrucks der Blasen zu verschiedenen Zeitpunkten der Schaumentwicklung. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	89
4.22	Analyse des Gasdrucks in Blasen für verschiedene Schwerpunkte zu ausgewählten Zeitpunkten der Entwicklung. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	90
4.23	Zeitliche Entwicklung der mittleren Anzahl von Blasenkanten für eine Ausgangsdispersität und drei verschiedene Filmplatzwahrscheinlichkeiten. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	92
4.24	Zeitliche Entwicklung der Blasenkanten für verschiedene Ausgangsdispersitäten. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	92
4.25	Verteilungen der Anzahl an Blasenkanten. Darstellung des zeitlichen Verlaufs für verschiedene Ausgangskonfigurationen und Filmplatzwahrscheinlichkeiten. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	94
4.26	Details zur zeitlichen Entwicklung der Blasenkanten, aufgeschlüsselt nach dem Anteil der Blasen pro Kantenanzahl. Darstellung für zwei unterschiedliche Ausgangsdispersitäten der Struktur. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	95
4.27	Entwicklung des mittleren Abstands zwischen benachbarten Blasen für eine Schaumdispersität bei variabler Filmplatzwahrscheinlichkeit. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	96

4.28	Entwicklung des Abstands zwischen benachbarten Blasen für verschiedene strukturelle Dispersitäten bei gleicher Filmplatzwahrscheinlichkeit. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	97
4.29	Mittlerer Abstand zwischen benachbarten Blasen für Blasen mit N_E Kanten bei variabler Ausgangsstruktur. Die Daten sind auf den mittleren Abstand einer sechsseitigen Blase normiert. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [99].	98
4.30	Visualisierung der Simulation eines sich entwickelnden Schaums mit Vergröberungsverhalten. Die Teilbilder (a) – (e) zeigen aufeinanderfolgende Zeitschritte der Simulation. Größere Blasen wachsen auf Kosten kleinerer, die schrumpfen und schließlich verschwinden.	99
4.31	Blasenvolumina A , normiert auf das Gleichgewichtsvolumen der verbleibenden Blase A_{\max} , als Funktion der Zeit, normiert auf die Gleichgewichtszeit, für die Simulation eines vergröbernden Ensembles von zehn Blasen. Die Farben kennzeichnen die verschiedenen Blasen.	101
4.32	Serie von Einzelaufnahmen der Morphologie eines vergröbernden Schaumes. Das initiale Ensemble besteht aus 225 Blasen. Die drei Teilbilder zeigen Aufnahmen aus dem Simulationsverlauf zu den Zeitpunkten $t = 0.0 \cdot t_{\text{tot}}$, $t = 0.5 \cdot t_{\text{tot}}$ und $t = 1.0 \cdot t_{\text{tot}}$.	102
4.33	Verteilung des Blasenvolumens A normiert auf die mittleren Blasengröße $\langle A \rangle$ für Konfigurationen zu drei verschiedenen Zeiten. Die entsprechende Morphologie ist in Abbildung 4.32 gezeigt.	103
4.34	Zeitliche Entwicklung des mittleren Blasenvolumens $\langle A \rangle$ für drei verschiedene Ausgangsstrukturen mit verschiedenen initialen Blasengrößeverteilungen (Dispersitäten), $\sigma_0, \sigma_2, \sigma_4$.	104
5.1	Setup für das Eshelby-Problem einer einzelnen Inhomogenität mit Realisierung einer Spannungsrandbedingung σ^{RB} . Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22].	111

5.2	Effektive Materialeigenschaften in Abhangigkeit des Volumenanteils der Inklusion. Analytische Losung fur $c_e \ll 1$ (theo) gemas Gleichung (5.3), Simulationsergebnis (sim) und theoretischen Grenzen. Diese sind die Voigt- [111] und Reuss-Schranke [112] (V/R) sowie die Hashin-Shtrikman-Schranken (HS) zweiter Ordnung [110]. Eigene Abbildung; vorveroentlicht in [22].	112
5.3	Schematische Darstellung eines Schnittes in y -Richtung mit Randbedingungen. Dabei ist $\mathbf{t} = \sigma \mathbf{n}$ der Spannungsvektor. Die Porengroe wird durch den Durchmesser s der in den Porenmittelpunkt gesetzten Kugel definiert, die sich nicht mit derjenigen einer benachbarten Pore uberschneidet. Dies wird durch blaue Kreise visualisiert. Eigene Abbildung; vorveroentlicht in [22].	114
5.4	Druckversuche eines offenporigen Schaums in drei Raumrichtungen, dargestellt fur das Setup III (siehe Tabelle Tabelle 5.3). Von-Mises-Vergleichsspannung $\sigma^{\text{v.M.}}$ normiert mit der Spannungsrandbedingung σ^{RB} wird angewandt an der Phasenfeld-Grenzflae mit einem Wert von $\phi^s = 0,2$. Eigene Abbildung; vorveroentlicht in [22].	115
5.5	Effektive Eigenschaften in Abhangigkeit von der betrachteten Gebietsgroe. Die Mittelwerte der Porengroe und der Stegdicke sind konstant. Links: Der nach (5.5) berechnete effektive Elastizitatsmodul, normiert auf die entsprechende Voigt-Schranke $\bar{E}^V = c_s E_s$. Rechts: Der relative Fehler e^{rel} nach (3.37) und die Abweichung A nach (5.6). Die Fehlerbalken geben die maximale Abweichung vom Mittelwert der drei Lastrichtungen an, $\max_{i \in \{1,2,3\}} \bar{E}^m - \bar{E}_i $. Eigene Abbildung; vorveroentlicht in [22].	117

5.6 Einfluss von Porengröße und Stegdicke bei konstantem festen Volumenanteil $c_s = 0,2$ ($\theta = 80\%$). Effektiver Elastizitätsmodul \bar{E} normiert mit der Voigt-Schranke $\bar{E}^V = c_s E_s$ in Abhängigkeit der Anzahl von Poren pro Volumeneinheit für verschiedene Querschnittsgeometrien und Porenverteilungen gemäß nebenstehender Tabelle. Eine größere Anzahl von Poren pro Volumeneinheit bedeutet eine geringere Porengröße und eine geringere Stegdicke. Die rechte Achse zeigt \bar{E} normiert auf die HS-Grenze \bar{E}^{HS} . Die Daten der Strukturen mit etwa 10 Poren pro Volumeneinheit entsprechen den jeweiligen Werten von $c_s = 0,2$ in der Abbildung 5.7. Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22]; sprachlich angepasst.	120
5.7 Der effektive Elastizitätsmodul \bar{E} normiert mit der Voigt-Schranke $\bar{E}^V = c_s E_s$ in Abhängigkeit vom Volumenanteil c_s der festen Phase. Die Studie umfasst Schäume mit kreisförmigem Stegquerschnitt und drei verschiedenen Zellgrößenverteilungen: generisch, normalverteilt und zentroidal. Für jede Struktur wurde eine lineare LSQ-Regression durchgeführt, siehe Tabelle 5.4. Zusätzlich wird die Gibson-Ashby-Korrelation (GA) mit dem Strukturfaktor $k = 1$ dargestellt (schwarz). Bei einem Volumenanteil von $c_s = 0,2$ werden ungefähr zehn Poren pro Volumeneinheit betrachtet (siehe Abbildung 5.6). Eigene Abbildung; vorveröffentlicht in [22].	124
A.1 Korrelation zwischen der Stegdicke d_s , ausgedrückt durch den mittleren Stegdurchmesser, der mittleren Porengröße $EW(s)$ und der Anzahl der Poren pro Volumeneinheit bei konstantem Feststoffvolumenanteil $c_s = 0,2$ in Bezug auf die Strukturen in Abbildung 5.6. Die Längenskalen sind mit der charakteristischen Länge $L_{char} \approx L/4$ normiert, die einem Viertel der Kantenlänge des Einheitsvolumens entspricht. Eigene Abbildung, vorveröffentlicht in [22].	138

A.2 Vergleich des Einflusses verschiedener zufälliger Seeds auf die generische Porengrößenverteilung. Die Strukturfaktoren für die verschiedenen Seeds sind $k = 0,84075$, $k = 0,87450$ und $k = 0,83193$. Die entsprechenden relativen RMS-Abweichungen der Anpassung sind 5,5828 %, 3,8994 % und 4,6619 % Eigene Abbildung, vorveröffentlicht in [22]..	139
--	-----

Tabellenverzeichnis

4.1	Strukturelle Eigenschaften der Ausgangskonfigurationen der Schäume. Als Eingabeparameter werden Werte für den Variationskoeffizienten des Blasenvolumens, $CV_{\text{in}} = \sigma/\mu$, vorgegeben. Aus der Analyse des Gleichgewichtszustands des relaxierten Blasenensembles ergeben sich das mittlere Blasenvolumen μ_V und der resultierende Variationskoeffizient $CV_{\text{res}} = \sigma_V/\mu_V$. Die verschiedenen, unterschiedlich stark ungeordneten Strukturen sind wie gelistet bezeichnet. Eigene Tabelle; vorveröffentlicht in [99]; sprachlich angepasst.	65
5.1	Materialeigenschaften des Eshelby-Problems einer einzelnen Inhomogenität. Eigene Tabelle; vorveröffentlicht in [22]; sprachlich angepasst.	111
5.2	Vergleich der effektiven Eigenschaften für das SIP mit $c_e \approx 7,1\%$. Simulationsergebnisse (sim), analytische Lösung (theo) und die relative Abweichung zwischen beiden. Zusätzlich sind die theoretischen Schranken erster und zweiter Ordnung aufgelistet. Absolutwerte sind in GPa angegeben. Eigene Tabelle; vorveröffentlicht in [22]; sprachlich angepasst.	113

5.3	Geometrische Parameter des betrachteten Schaums. Längenskalen sind relativ zur kleinsten Länge des Gebiets L_I angegeben, die als Bezugsgröße genutzt wird. Die charakteristischen Parameter des Schaums sind in der Tabelle zusammengefasst, mit der Porenanzahl, der Länge des Gebiets L/L_I , der Porengrößenverteilung mit Erwartungswert $EW(s)$ und Standardabweichung σ_s ($L/EW(s)$, L_I/σ_s), der Stegdicke L_I/d_s , und des resultierenden Volumenanteils c_s . Die Stegdicke und die statistische Verteilung der Porengrößen bleiben in allen Setups konstant, während die Länge des Gebiets L (und damit die Gebietsgröße) variiert. Eigene Tabelle; vorveröffentlicht in [22]; sprachlich angepasst.	116
5.4	Lineare Kleinste-Quadrat-Regression von \bar{E}/\bar{E}^V in Abhängigkeit von c_s gemäß Gleichung (5.8) (Gibson-Ashby) für verschiedene Schaumstrukturen. Der Strukturfaktor k sowie die absolute und relative Wurzel aus der Summe der Quadrate (RMS) bezüglich der Abweichungen des Fits sind angegeben. Eigene Tabelle; vorveröffentlicht in [22]; sprachlich angepasst.	125

Literaturverzeichnis

- [1] P. Stevenson. *Foam engineering: fundamentals and applications*. John Wiley & Sons, Hoboken (NJ), 1st ed edition, 2012.
- [2] A. August, A. Reiter, A. Kneer, M. Selzer, and B. Nestler. Effective thermal conductivity of composite materials based on open cell foams. *Heat and Mass Transfer Research Journal*, 7:15, 2018.
- [3] H. Huisseune, S. De Schampheleire, B. Ameel, and M. De Paepe. Comparison of metal foam heat exchangers to a finned heat exchanger for low reynolds number applications. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 89:1–9, 2015.
- [4] T. D. Claar, C.-J. Yu, I. Hall, J. Banhart, J. Baumeister, and W. Seeliger. Ultra-lightweight aluminum foam materials for automotive applications. *SAE transactions*, 109:98–106, 2000.
- [5] J. Frömert, T. G. Lott, A. M. Matz, and N. Jost. Investment casting and mechanical properties of open-cell steel foams. *Advanced Engineering Materials*, 21(6):1900396, 2019.
- [6] F. García-Moreno. Commercial applications of metal foams: Their properties and production. *Materials*, 9(2):85, 2016.
- [7] Y. Gan, C. Chen, and Y. Shen. Three-dimensional modeling of the mechanical property of linearly elastic open cell foams. *International Journal of Solids and Structures*, 42(26):6628–6642, 2005.

- [8] C. Stubenrauch, A. Menner, A. Bismarck, and W. Drenckhan. Emulsion and Foam Templating—Promising Routes to Tailor-Made Porous Polymers. *Angewandte Chemie International Edition*, 57(32):10024–10032, 2018.
- [9] D. L. Weaire and S. Hutzler. *The physics of foams*. Clarendon Press, Oxford, 1 publ. as edition, 1999.
- [10] J. Banhart. Manufacture, characterisation and application of cellular metals and metal foams. *Progress in Materials Science*, 46:559–632, 2001.
- [11] A. Jung and S. Diebels. Synthesis and mechanical properties of novel ni/pu hybrid foams: A new economic composite material for energy absorbers. *Advanced Engineering Materials*, 18:532–541, 2016.
- [12] E. Atzeni and A. Salmi. Economics of additive manufacturing for end-useable metal parts. *International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 62:1147–1155, 2012.
- [13] L. E. Murr, S. M. Gaytan, F. Medina, E. Martinez, J. L. Martinez, D. H. Hernandez, B. I. Machado, D. A. Ramirez, and R. B. Wicker. Characterization of ti–6al–4v open cellular foams fabricated by additive manufacturing using electron beam melting. *Materials Science and Engineering: A*, 527:1861–1868, 2010.
- [14] C. Gaillard, J. F. Despois, and A. Mortensen. Processing of nacl powders of controlled size and shape for the microstructural tailoring of aluminium foams. *Materials Science and Engineering: A*, 374:250–262, 2004.
- [15] M. Costantini, C. Colosi, J. Guzowski, A. Barbetta, J. Jaroszewicz, W. Święszkowski, M. Dentini, and P. Garstecki. Highly ordered and tunable polyhipes by using microfluidics. *Journal of Materials Chemistry B*, 2(16):2290–2300, 2014.
- [16] I. Pulko and P. Krajnc. High internal phase emulsion templating—a path to hierarchically porous functional polymers. *Macromolecular rapid communications*, 33(20):1731–1746, 2012.

- [17] M. S. Silverstein. Emulsion-templated porous polymers: A retrospective perspective. *Polymer*, 55(1):304–320, 2014.
- [18] S. D. Kimmins and N. R. Cameron. Functional porous polymers by emulsion templating: recent advances. *Advanced Functional Materials*, 21(2):211–225, 2011.
- [19] M. S. Silverstein and N. R. Cameron. Polyhipes – porous polymers from high internal phase emulsions. *Encyclopedia of polymer science and technology*, 2002.
- [20] S. Andrieux, A. Quell, C. Stubenrauch, and W. Drenckhan. Liquid foam templating—a route to tailor-made polymer foams. *Advances in colloid and interface science*, 256:276–290, 2018.
- [21] A. Kulshreshtha and S. K. Dhakad. Preparation of metal foam by different methods: A review. *Materials Today: Proceedings*, 26:1784–1790, 2020.
- [22] M. Reder, J. Holland-Cunz, P. Lorson, A. August, and B. Nestler. Simulative Determination of Effective Mechanical Properties for Digitally Generated Foam Geometries. *Advanced Engineering Materials*, 25(19), 2023.
- [23] A. Barbetta, A. Carrino, M. Costantini, and M. Dentini. Polysaccharide based scaffolds obtained by freezing the external phase of gas-in-liquid foams. *Soft Matter*, 6(20):5213–5224, 2010.
- [24] K.-y. Chung, N. C. Mishra, C.-c. Wang, F.-h. Lin, and K.-h. Lin. Fabricating scaffolds by microfluidics. *Biomicrofluidics*, 3(2), 2009.
- [25] A. Testouri, C. Honorez, A. Bariellec, D. Langevin, and W. Drenckhan. Highly structured foams from chitosan gels. *Macromolecules*, 43(14):6166–6173, 2010.
- [26] A. Quell, J. Elsing, W. Drenckhan, and C. Stubenrauch. Monodisperse polystyrene foams via microfluidics—a novel templating route. *Advanced Engineering Materials*, 17(5):604–609, 2015.

- [27] H. Bey, F. Wintzenrieth, O. Ronsin, R. Höhler, and S. Cohen-Addad. Stabilization of foams by the combined effects of an insoluble gas species and gelation. *Soft Matter*, 13(38):6816–6830, 2017.
- [28] W. Drenckhan and A. Saint-Jalmes. The science of foaming. *Advances in Colloid and Interface Science*, 222:228–259, 2015.
- [29] J. Elsing, T. Stefanov, M. Gilchrist, and C. Stubenrauch. Monodisperse polystyrene foams via polymerization of foamed emulsions: structure and mechanical properties. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19(7): 5477–5485, 2017.
- [30] S. Andrieux. *Monodisperse highly ordered and polydisperse biobased solid foams*. Springer Nature, Cham, Schweiz, 2019.
- [31] A. van der Net, A. Gryson, M. Ranft, F. Elias, C. Stubenrauch, and W. Drenckhan. Highly structured porous solids from liquid foam templates. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 346 (1-3):5–10, 2009.
- [32] K. Yasunaga, R. Neff, X. Zhang, and C. Macosko. Study of cell opening in flexible polyurethane foam. *Journal of cellular plastics*, 32(5):427–448, 1996.
- [33] X. Zhang, C. Macosko, H. Davis, A. Nikolov, and D. Wasan. Role of silicone surfactant in flexible polyurethane foam. *Journal of Colloid and Interface Science*, 215(2):270–279, 1999.
- [34] J. C. Wong, E. Tervoort, S. Busato, U. T. Gonzenbach, A. R. Studart, P. Ermanni, and L. J. Gauckler. Macroporous polymers from particle-stabilized foams. *Journal of Materials Chemistry*, 19(29): 5129–5133, 2009.
- [35] I. Cantat, S. Cohen-Addad, F. Elias, F. Graner, R. Höhler, O. Pitois, F. Rouyer, and A. Saint-Jalmes. *Foams*. Oxford University Press, Oxford, 2013.

- [36] P.-G. de Gennes, F. Brochard-Wyart, and D. Quéré. *Capillarity and Wetting Phenomena: Drops, Bubbles, Pearls, Waves*. Springer New York, 2004.
- [37] S. S. Dukhin, G. Kretzschmar, and R. Miller. *Dynamics of adsorption at liquid interfaces: theory, experiment, application*. Elsevier Science, Amsterdam, Niederlande, 1995.
- [38] J. A. F. Plateau. *Statique expérimentale et théorique des liquides soumis aux seules forces moléculaires: Tome premier*, volume 2. Gauthier-Villars, Paris, 1873.
- [39] A. Saint-Jalmes. Physical chemistry in foam drainage and coarsening. *Soft Matter*, 2(10):836–849, 2006.
- [40] A. Maestro, W. Drenckhan, E. Rio, and R. Höhler. Liquid dispersions under gravity: volume fraction profile and osmotic pressure. *Soft Matter*, 9 (8):2531–2540, 2013.
- [41] E. Rio and A.-L. Biance. Thermodynamic and Mechanical Timescales Involved in Foam Film Rupture and Liquid Foam Coalescence. *ChemPhysChem*, 15(17):3692–3707, 2014.
- [42] V. Carrier and A. Colin. Coalescence in Draining Foams. *Langmuir*, 19 (11):4535–4538, 2003.
- [43] E. Forel, E. Rio, M. Schneider, S. Beguin, D. Weaire, S. Hutzler, and W. Drenckhan. The surface tells it all: relationship between volume and surface fraction of liquid dispersions. *Soft matter*, 12(38):8025–8029, 2016.
- [44] Z. Briceño-Ahumada and D. Langevin. On the influence of surfactant on the coarsening of aqueous foams. *Advances in colloid and interface science*, 244:124–131, 2017.
- [45] N. Isert, G. Maret, and C. M. Aegerter. Coarsening dynamics of three-dimensional levitated foams: From wet to dry. *The European Physical Journal E*, 36:1–6, 2013.

- [46] K. J. Stine, S. A. Rauseo, B. G. Moore, J. A. Wise, and C. M. Knobler. Evolution of foam structures in Langmuir monolayers of pentadecanoic acid. *Physical Review A*, 41(12):6884–6892, 1990.
- [47] J. Duplat, B. Bossa, and E. Villermaux. On two-dimensional foam ageing. *Journal of Fluid Mechanics*, 673:147–179, 2011.
- [48] A. E. Roth, C. D. Jones, and D. J. Durian. Bubble statistics and coarsening dynamics for quasi-two-dimensional foams with increasing liquid content. *Physical Review E*, 87(4):042304, 2013.
- [49] B. Deminiere, A. Colin, F. Leal-Calderon, J. F. Muzy, and J. Bibette. Cell Growth in a 3D Cellular System Undergoing Coalescence. *Physical Review Letters*, 82(1):229–232, 1999.
- [50] E. Forel, B. Dollet, D. Langevin, and E. Rio. Coalescence in Two-Dimensional Foams: A Purely Statistical Process Dependent on Film Area. *Physical Review Letters*, 122(8):088002, 2019.
- [51] Z. Briceño-Ahumada, W. Drenckhan, and D. Langevin. Coalescence in Draining Foams Made of Very Small Bubbles. *Physical Review Letters*, 116(12):128302, 2016.
- [52] H. Ritacco, F. Kiefer, and D. Langevin. Lifetime of bubble rafts: Cooperativity and avalanches. *Physical Review Letters*, 98(24), 2007.
- [53] K. Khristov, D. Exerowa, and G. Minkov. Critical capillary pressure for destruction of single foam films and foam: effect of foam film size. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 210 (2-3):159–166, 2002.
- [54] A. L. Biance, A. Delbos, and O. Pitois. How topological rearrangements and liquid fraction control liquid foam stability. *Physical Review Letters*, 106(6):068301, 2011.
- [55] D. S. Schwartz, D. S. Shih, A. G. Evans, and H. N. Wadley. Porous and cellular materials for structural applications. In *MRS Symp. Proc*, volume 521, page 225, 1998.

- [56] M. Monno, D. Negri, V. Mussi, P. Aghaei, G. Groppi, E. Tronconi, and M. Strano. Cost-efficient aluminum open-cell foams: Manufacture, characterization, and heat transfer measurements. *Advanced Engineering Materials*, 20(8):1701032, 2018.
- [57] C. Kádár, F. Chmelík, Z. Rajkovits, and J. A. Lendvai. Acoustic emission measurements on metal foams. *Journal of Alloys and Compounds*, 378: 145–150, 2004.
- [58] A. Jung and S. Diebels. Hybrid metal foams: experimental observations and phenomenological modelling. *Technische Mechanik-European Journal of Engineering Mechanics*, 34(1):12–22, 2014.
- [59] M. Ashby. *Metal Foams: a design guide*. Butterworth-Heinemann, Elsevier, Burlington, 2000.
- [60] C. Devivier, V. Tagliaferri, F. Trovalusci, and N. Ucciardello. Mechanical characterization of open cell aluminium foams reinforced by nickel electro-deposition. *Materials & Design*, 86:272–278, 2015.
- [61] M. F. Ashby and R. M. Medalist. The mechanical properties of cellular solids. *Metallurgical Transactions A*, 9:1755–1769, 1983.
- [62] P. Altschuh. *Skalenübergreifende Analyse Makroporöser Membranen im Kontext Digitaler Zwillinge*. KIT Scientific Publishing, Karlsruhe, 2020.
- [63] J. J. Chae and M. Tabor. Dynamics of foams with and without wall rupture. *Physical Review E*, 55(1):598–610, 1997.
- [64] M. Kelager and K. Erleben. A Nonlinear Vertex-based Model for Animation of Two-dimensional Dry Foam. In P. R. Hilton, J. Braz, and Adrian, editors, *GRAPP 2010 - Proceedings of the International Conference on Computer Graphics Theory and Applications, Angers, France, May 17-21, 2010*, pages 296–303. INSTICC Press, 2010.
- [65] K. A. Brakke. The Surface Evolver. *Experimental Mathematics*, 1(2): 141–165, 1992.

- [66] N. Kern, D. Weaire, A. Martin, S. Hutzler, and S. J. Cox. Two-dimensional viscous froth model for foam dynamics. *Physical Review E*, 70(4):041411, 2004.
- [67] Y. Seol and Y. Kim. Numerical Study on Statistical Behaviors of Two-Dimensional Dry Foam. *Communications in Computational Physics*, 25(1):289–310, 2019.
- [68] R. Saye and J. Sethian. Multiscale modelling of evolving foams. *Journal of Computational Physics*, 315:273–301, 2016.
- [69] A. August, J. Ettrich, M. Rölle, S. Schmid, M. Berghoff, M. Selzer, and B. Nestler. Prediction of heat conduction in open-cell foams via the diffuse interface representation of the phase-field method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 84:800–808, 2015.
- [70] L. J. Gibson and M. F. Ashby. *Cellular solids: structure and properties*. Cambridge solid state science series. Cambridge Univ. Press, Cambridge [u.a.], 2. ed. edition, 1997.
- [71] J. Zhang. *The mechanics of foams and honeycombs*. PhD thesis, University of Cambridge, Cambridge, 1989.
- [72] G. Menges and F. Knipschild. Estimation of mechanical properties for rigid polyurethane foams. *Polymer Engineering & Science*, 15(8):623–627, 1975.
- [73] A. Gent and A. Thomas. Mechanics of foamed elastic materials. *Rubber Chemistry and Technology*, 36(3):597–610, 1963.
- [74] W. Ko. Deformations of foamed elastomers. *Journal of Cellular Plastics*, 1 (1):45–50, 1965.
- [75] J. Lederman. The prediction of the tensile properties of flexible foams. *Journal of Applied Polymer Science*, 15(3):693–703, 1971.

- [76] C. Redenbach. Modelling foam structures using random tessellations. In *Stereology and Image Analysis. Proc 10th Eur Conf ISS (ECS10)*, volume 4, 2009.
- [77] M. Zhang, J. Shang, S. Guo, B. Hur, and X. Yue. Numerical investigation of effective thermal conductivity of strut-based cellular structures designed by spatial voronoi tessellation. *Materials*, 14(1), 2021.
- [78] Z. Nie, Y. Lin, and Q. Tong. Computational modeling of the elastic property of three-dimensional open cell foams. *Archives of Metallurgy and Materials*, vol. 63(No 3):1153–1165, 2018.
- [79] Q. Sawei, Z. Xinna, H. Qingxian, D. Renjun, J. Yan, and H. Yuebo. Research progress on simulation modeling of metal foams. *Rare Metal Materials and Engineering*, 44(11):2670–2676, 2015.
- [80] S. A. Kaoua, S. Boutaleb, D. Dahmoun, and M. Azzaz. Numerical modelling of open-cell metal foam with kelvin cell. *Computational and Applied Mathematics*, 35(3):977–985, 2016.
- [81] I. Maskery, L. Sturm, A. Aremu, A. Panesar, C. Williams, C. Tuck, R. Wildman, I. Ashcroft, and R. Hague. Insights into the mechanical properties of several triply periodic minimal surface lattice structures made by polymer additive manufacturing. *Polymer*, 152:62–71, 2018.
- [82] H. Zhu, J. Hobdell, and A. Windle. Effects of cell irregularity on the elastic properties of open-cell foams. *Acta materialia*, 48(20):4893–4900, 2000.
- [83] O. Al-Ketan, R. Rowshan, and R. K. A. Al-Rub. Topology-mechanical property relationship of 3d printed strut, skeletal, and sheet based periodic metallic cellular materials. *Additive Manufacturing*, 19:167–183, 2018.
- [84] F. Caiazzo, S. L. Campanelli, F. Cardaropoli, N. Contuzzi, V. Sergi, and A. D. Ludovico. Manufacturing and characterization of similar to foam steel components processed through selective laser melting. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 92: 2121–2130, 2017.

- [85] Y. Kwon, R. Cooke, and C. Park. Representative unit-cell models for open-cell metal foams with or without elastic filler. *Materials Science and Engineering: A*, 343(1-2):63–70, 2003.
- [86] L. Vendra and A. Rabiei. Evaluation of modulus of elasticity of composite metal foams by experimental and numerical techniques. *Materials Science and Engineering: A*, 527(7-8):1784–1790, 2010.
- [87] X. Li, J. Lowengrub, A. Rätz, and A. Voigt. Solving pdes in complex geometries: a diffuse domain approach. *Communications in mathematical sciences*, 7(1):81–107, 2009.
- [88] J. Hötzer, A. Reiter, H. Hierl, P. Steinmetz, M. Selzer, and B. Nestler. The parallel multi-physics phase-field framework PACE3D. *Journal of Computational Science*, 26:1–12, 2018.
- [89] A. John and M. John. Foam metal and honeycomb structures in numerical simulation. *Annals of the Faculty of Engineering Hunedoara*, 14(4):27, 2016.
- [90] T. Uehara. Numerical Simulation of Foam Structure Formation and Destruction Process Using Phase-Field Model. *Advanced Materials Research*, 1042:65–69, 2014.
- [91] S. Vakili, I. Steinbach, and F. Varnik. Multi-phase-field simulation of microstructure evolution in metallic foams. *Scientific Reports*, 10(1):19987, 2020.
- [92] T. C. Lavoratti, S. Heitkam, U. Hampel, and G. Lericvain. A computational method to simulate mono- and poly-disperse two-dimensional foams flowing in obstructed channel. *Rheologica Acta*, 60(10):587–601, 2021.
- [93] W. Warren and A. Kraynik. The linear elastic properties of open-cell foams. *Journal of Applied Mechanics*, 55:341, 1988.
- [94] A. August, F. Jamshidi, A. Kneer, R. H. Wolf, M. Wirtz, and B. Nestler. Development of synthetic open porous structures for improved heat

- transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 159:120071, 2020.
- [95] A. August, A. M. Matz, B. Nestler, and N. Jost. Heat propagation in computer designed and real metal foam structures. *Multidiscipline Modeling in Materials and Structures*, 12(4):726–736, 2016.
- [96] J. Ettrich, A. Choudhury, O. Tschukin, E. Schoof, A. August, and B. Nestler. Modelling of transient heat conduction with diffuse interface methods. *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, 22(8):085006, 2014.
- [97] B. Nestler, H. Garcke, and B. Stinner. Multicomponent alloy solidification: Phase-field modeling and simulations. *Physical Review E*, 71(4):041609, 2005.
- [98] L. C. Evans. Entropy and partial differential equations. *Lecture Notes at UC Berkeley*, 2004.
- [99] J. Holland-Cunz, A. Reiter, J. Hötzer, A. August, M. Selzer, and B. Nestler. Numerical investigation of bubble dynamics in ageing foams using a phase-field model. *Computational Materials Science*, 248:113557, 2025.
- [100] S. G. Kim, D. I. Kim, W. T. Kim, and Y. B. Park. Computer simulations of two-dimensional and three-dimensional ideal grain growth. *Physical Review E*, 74(6):061605, 2006.
- [101] M. Selzer. *Mechanische und strömungsmechanische Topologieoptimierung mit der Phasenfeldmethode*. KIT Scientific Publishing, Karlsruhe, 2014.
- [102] S. Lloyd. Least squares quantization in pcm. *IEEE Transactions on Information Theory*, 28(2):129–137, 1982.
- [103] A. G. Khachaturyan. *Theory of structural transformations in solids*. John Wiley and Sons, New York, NY, 1983.

- [104] R. Hill. On constitutive macro-variables for heterogeneous solids at finite strain. *Proceedings of the Royal Society of London. A. Mathematical and Physical Sciences*, 326(1565):131–147, 1972.
- [105] S. Saeb, P. Steinmann, and A. Javili. Aspects of computational homogenization at finite deformations: a unifying review from reuss' to voigt's bound. *Applied Mechanics Reviews*, 68(5), 2016.
- [106] F. Wang, H. Zhang, Y. Wu, and B. Nestler. A thermodynamically consistent diffuse interface model for the wetting phenomenon of miscible and immiscible ternary fluids. *Journal of Fluid Mechanics*, 970:A17, 2023.
- [107] J. D. Eshelby. The determination of the elastic field of an ellipsoidal inclusion, and related problems. *Proceedings of the royal society of London. Series A. Mathematical and physical sciences*, 241(1226):376–396, 1957.
- [108] D. Schneider, F. Schwab, E. Schoof, A. Reiter, C. Herrmann, M. Selzer, T. Böhlke, and B. Nestler. On the stress calculation within phase-field approaches: a model for finite deformations. *Computational Mechanics*, 60(2):203–217, 2017.
- [109] R. Hill. The elastic behaviour of a crystalline aggregate. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 65(5):349, 1952.
- [110] Z. Hashin and S. Shtrikman. A variational approach to the theory of the elastic behaviour of multiphase materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 11(2):127–140, 1963.
- [111] W. Voigt. Über die beziehung zwischen den beiden elasticitätsconstanten isotroper körper. *Annalen der Physik*, 274(12):573–587, 1889.
- [112] A. Reuss. Berechnung der fließgrenze von mischkristallen auf grund der plastizitätsbedingung für einkristalle. *ZAMM - Journal of Applied Mathematics and Mechanics / Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 9(1):49–58, 1929.

- [113] S.-A. Kaoua, D. Dahmoun, A.-E. Belhadj, and M. Azzaz. Finite element simulation of mechanical behaviour of nickel-based metallic foam structures. *Journal of alloys and compounds*, 471(1-2):147–152, 2009.
- [114] R. Poli, J. Kennedy, and T. Blackwell. Particle swarm optimization. *Swarm intelligence*, 1(1):33–57, 2007.