

# A numerical analysis method for thermoelastic microstructure models



**ISC**

Fraunhofer Zentrum für Hochtemperatur-Leichtbau

February 16, 2018

## Preface

- author / programmer info
- acknowledgments
- version history

## GeoVal

### Version 2016-10-24:

- Ohne Interpolation bei Winkel-/Interface-Energy-änderung
- Ohne Makrostrukturerstellung für CMC-Werkstoff
- Ohne stark wirksames Kornwachstum

### Version 2017-02-15:

———— NUTZUNGSDAUER ABGELAUFEN ————

- erstmals mit funktionierender Interpolation bei Änderung von Winkel- / Interface-Energy
- Makrostrukturerstellung für CMC-Werkstoff möglich
- Ohne stark wirksames Kornwachstum

### Version 2017-04-22:

———— NUTZUNGSDAUER ABGELAUFEN ————

- Verteilung für Korngrenzflächenenergien FWHM hinterlegbar
- für konstantem und veränderbarem Dihedralwinkel
- Achtung: nur Streuung für Interface 1-1 ist realistisch
- Ohne stark wirksames Kornwachstum (in Bearbeitung)

### Version 2017-05-05:

- Verbessertes Kornwachstum (realistischer Multiplier liegt bei ca. 0,2)
- Je größer der Faktor, desto länger die Rechenzeit
- Nutzungsdauer: 6 Monate

### Version 2017-06-14:

- Erstellung Zusammenfassung Sinter-Pro-Dateien von mehreren parallelen Sinterungen (bisher nur möglich bei Sinterserien)
- über Settings muss der übergeordnete Folder ausgewählt werden
- GeoVal liest nun alle Sinter-Pro-Dateien ein, die sich unterhalb des gewählten Ordners befinden. Dateityp: pro
- WICHTIG: Der Dateiname muss stets sinter\_prot lauten. Ein anderer Dateiname wird nicht berücksichtigt.
- über voxel operations, summary wird eine Zusammenfassung aller Sinterungen im ausgewählten Verzeichnis erstellt.
- nun ist auch der Desintering Parameter verfügbar
- Bei Simulationen, die bei unterschiedlichen Sinterdichten beendet wurden, kann es bei diesen Dichtewerten zu inkorrekten Zahlen kommen (besonders bei 100
- weitere mögliche Fehler beim Einlesen können ebenso mit dieser Konstellation zusammenhängen, darum bitte beachten.

Version 2017-06-19:

- Prüfen der maximalen und minimalen Porosität über ein Sub-RVE
- halbe Kantenlänge des Orginal-RVE
- Verschieben des Sub-RVE im Orginal-RVE mit gleichzeitiger Überprüfung der Porosität und Varianz
- kleinere Modifikationen (u.a. Aspekte, die den Algorithmus beschleunigen)

Version 2017-07-27:

- Anpassen Algorithmus hinsichtlich Oberflächendiffusion
- Gleichgewichtsflächen werden ab einem Ratio surface/grain boundary diffusion  $\geq 10^6$  berechnet
- In der vorherigen Version war ein Fehler, der exakt für den Fall ratio =  $10^5$  auftrat

*Stand 31.07.2017 / ditt*

## VoxSM

Die aktualisierte Version von VoxSM (Stand 12.01.2017) kann jetzt auch RVEs aus GeoVal verarbeiten, die mit einer abweichend skalierten z-Achse ( $z * 2^n$  für längliche stabförmige bzw.  $z * (\frac{1}{2})^n$  für scheibenförmige flache RVEs) erstellt wurden.

Außerdem wurden die Voreinstellungen für die Funktionen "smooth" und "Simplify" auf eine typische Voxel-Kantenlänge von  $1 \mu\text{m}$  ausgelegt. Für entsprechende RVEs kann dann ohne explizite Eingabe weiterer Werte gestartet werden.

*Stand 12.01.2017 / seif*

## ANSYS APDL

Das "therm\_Sp-und\_WAK.win" hier ist eine ältere Version. Aktuelle und getestete (die allerdings die früher praktizierte selektive Auswertung der th. Spannungen nur an Kanten und Kontaktflächen bislang nicht nutzen) Versionen finden sich im Verzeichnis:

R:/166\_320/Ablage\_Simulationen/Null-WAK-CMC-SiC\_[Vorlauf],

genauer in den darin befindlichen Unterverzeichnissen zu einzelnen Materialzusammensetzungen.

*Stand 23.01.2017 / ???*

## Crystal

TEXT.

# Table of Contents

<b>Preface</b>	<b>i</b>
GeoVal . . . . .	i
VoxSM . . . . .	ii
ANSYS APDL . . . . .	ii
Crystal . . . . .	ii
<b>Table of Contents</b>	<b>iii</b>
<b>List of Figures</b>	<b>v</b>
<b>List of Tables</b>	<b>vi</b>
<b>Nomenclature</b>	<b>vii</b>
<b>1 Introduction</b>	<b>1</b>
1.1 GeoVal . . . . .	1
1.2 VoxSM . . . . .	1
1.3 ANSYS APDL . . . . .	1
1.4 Crystal . . . . .	1
1.5 Installation . . . . .	1
<b>2 GeoVal</b>	<b>2</b>
2.1 Input . . . . .	2
2.2 Output . . . . .	2
2.3 Interface . . . . .	2
2.4 Procedure . . . . .	7
2.4.1 Sintering . . . . .	7
<b>3 VoxSM</b>	<b>12</b>
3.1 Input . . . . .	12
3.2 Output . . . . .	12
3.3 Interface . . . . .	13
3.4 Procedure . . . . .	15
<b>4 ANSYS APDL</b>	<b>17</b>
4.1 Input . . . . .	17
4.2 Output . . . . .	17
4.3 Interface . . . . .	18
4.4 Procedure . . . . .	18
<b>5 Crystal</b>	<b>19</b>
5.1 Input . . . . .	19
5.2 Output . . . . .	19
5.3 Interface . . . . .	19
5.4 Procedure . . . . .	19
<b>6 References</b>	<b>20</b>

<b>7</b>	<b>Appendix</b>	<b>21</b>
7.1	GeoVal . . . . .	21
7.2	VoxSM . . . . .	26

# List of Figures

Figure 1:	<b>GeoVal</b> - Start screen . . . . .	2
Figure 2:	<b>GeoVal</b> - File options . . . . .	3
Figure 3:	<b>GeoVal</b> - Operation options . . . . .	4
Figure 4:	<b>GeoVal</b> - Analysis options . . . . .	5
Figure 5:	<b>GeoVal</b> - Bitmap options . . . . .	5
Figure 6:	<b>GeoVal</b> - Fitting options . . . . .	6
Figure 7:	<b>GeoVal</b> - Settings . . . . .	6
Figure 8:	<b>VoxSM</b> - Start screen . . . . .	13
Figure 9:	<b>VoxSM</b> - File options . . . . .	14
Figure 10:	<b>VoxSM</b> - Data options . . . . .	14
Figure 11:	<b>VoxSM</b> - Protocol options . . . . .	15
Figure 12:	<b>Appendix</b> - Object file . . . . .	21
Figure 13:	<b>Appendix</b> - Voxel file . . . . .	21
Figure 14:	<b>Appendix</b> - Introduce objects . . . . .	22
Figure 15:	<b>Appendix</b> - Introduce objects 2 . . . . .	22
Figure 16:	<b>Appendix</b> - Distribute objects . . . . .	23
Figure 17:	<b>Appendix</b> - Transform objects . . . . .	23
Figure 18:	<b>Appendix</b> - Set overlap . . . . .	24
Figure 19:	<b>Appendix</b> - Set volume fractions . . . . .	24
Figure 20:	<b>Appendix</b> - Voxel operations . . . . .	25
Figure 21:	<b>Appendix</b> - Cross-section . . . . .	25
Figure 22:	<b>Appendix</b> - Ansys APDL header in VoxSM . . . . .	26

## List of Tables

## Nomenclature



# 1 Introduction

- microstructure
- thermal processing
- numerical modelling

## 1.1 GeoVal

## 1.2 VoxSM

## 1.3 ANSYS APDL

## 1.4 Crystal

## 1.5 Installation

1. requirements / dependencies
2. GeoVal
3. VoxSM
4. ANSYS APDL
5. Crystal

## 2 GeoVal

### 2.1 Input

GeoVal is a tool to generate Representative Volume Elements (RVE), also called Voxels, based on the user's input. No input files are required to start and use the program, but previously saved GeoVal files can be imported, as described in the Interface section.

### 2.2 Output

- \*.obj

The Object file - **Figure 12** - contains information about the number of particles generated (red box), the number of voxels in each direction (blue box), the edge length of Voxel in  $\mu\text{m}$  (green box), and the characteristic length of the particle, such as radius, edge length, etc.(brown box)

- \*.val (Voxel)

The Voxel file - **Figure 13** - also contains information about the number of voxels in each direction (blue box), the characteristic length in  $\mu\text{m}$ , followed by the parameters of each particle in sequential order (6 integer number starting with the phase and ending with the particle ID).

### 2.3 Interface

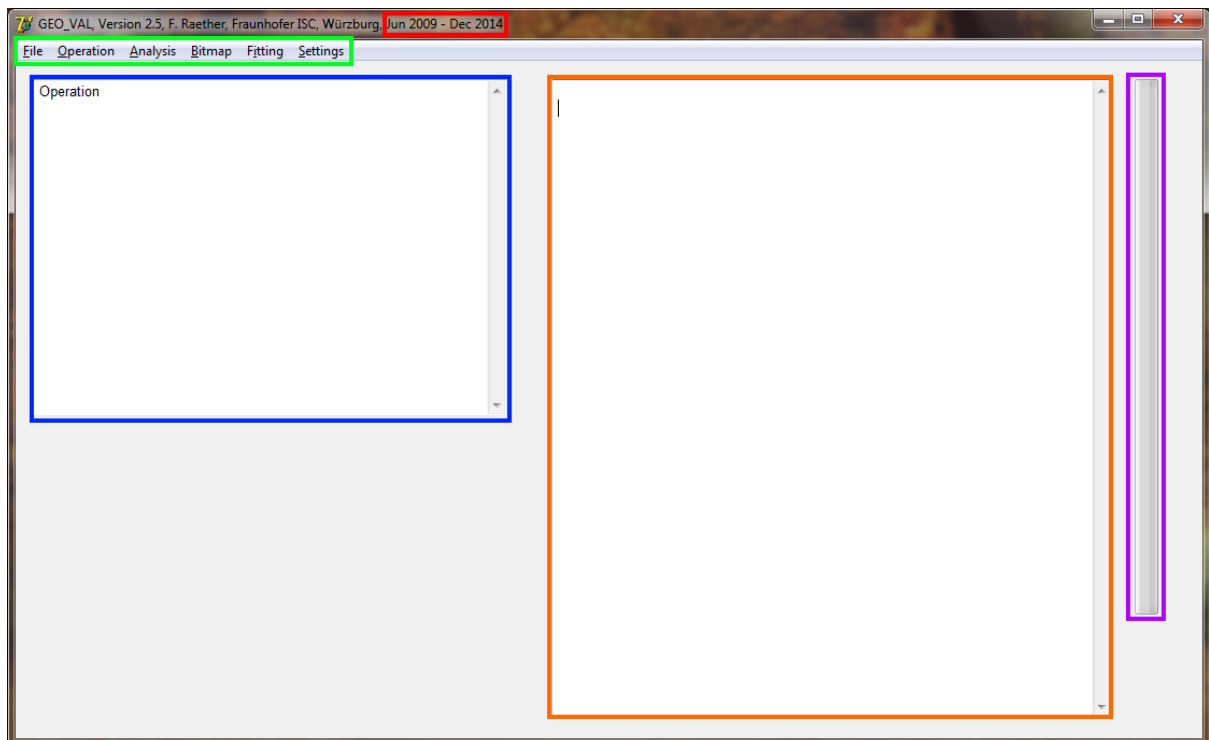
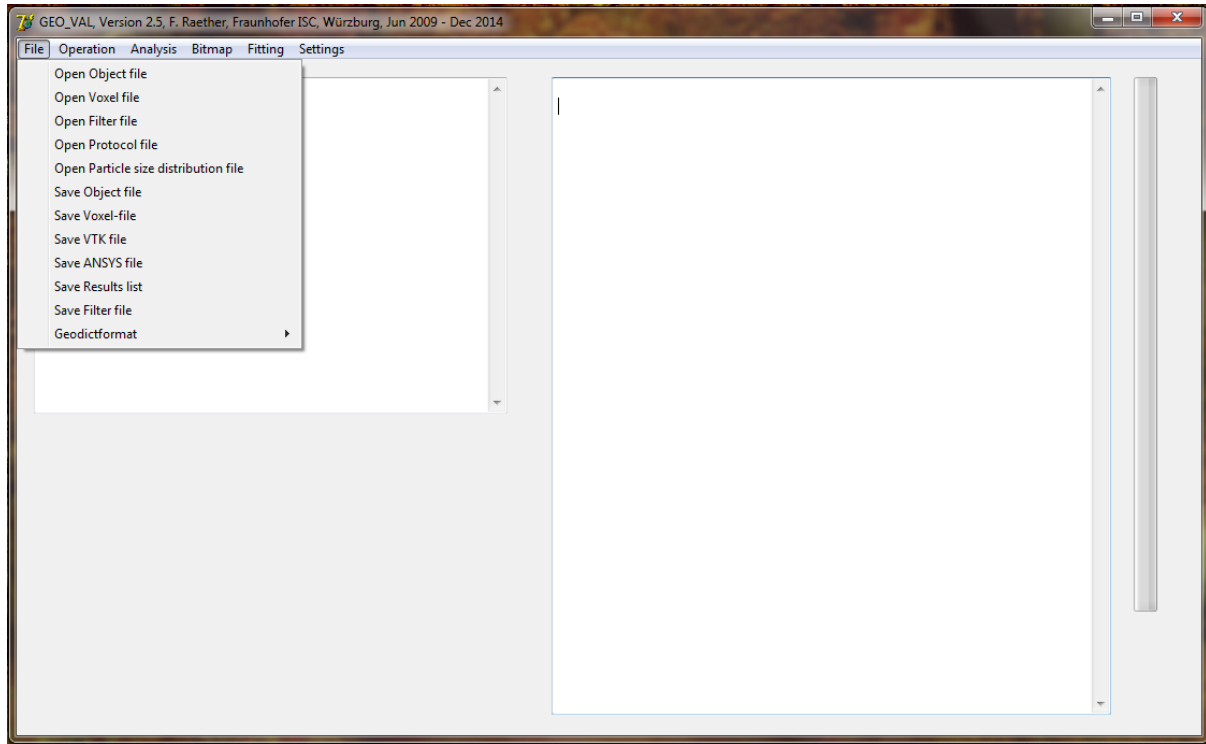


Figure 1: GeoVal - Start screen

**Figure 1** shows the main window of the application. The current version can be determined from the date in the window title - red box (not "Version ..."). All functions and settings in GeoVal are set in the menu bar - green box. The blue text box shows the current operation, while the brown box shows the output console (i.e. particle size, volumetric phase distribution, etc.) The status bar in the purple box displays whether an operation is currently being performed (partially green) or has been completed (fully green).

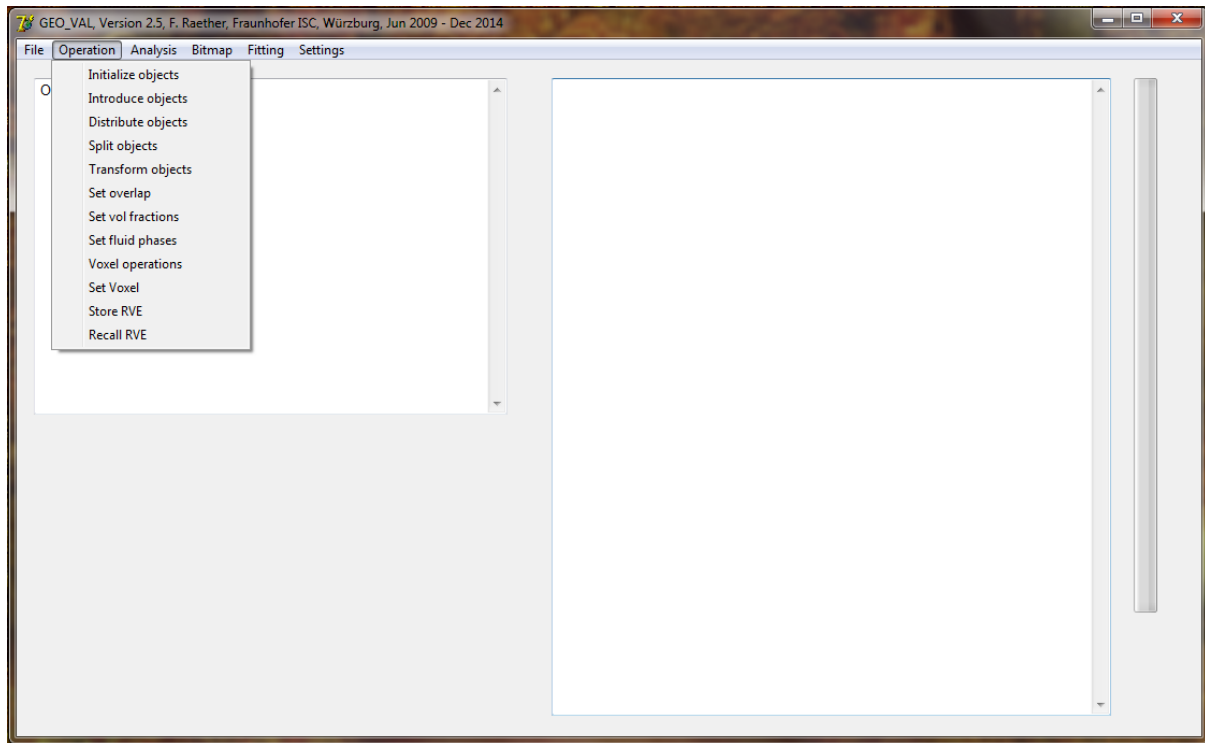


**Figure 2: GeoVal - File options**

The common functions like opening and saving files are found in the file menu, as shown in **Figure 2**. The most common files used in GeoVal are Object (\*.obj - **Figure 12**) and Voxel (\*.val - **Figure 13**). Filter files can be used to set a surface roughness (??) and Protocol files can be used for batch processing. With a particle size distribution file one has the option to include specific, statistics-based parameters. GeoVal also allows the user to save a \*.vtk (Visualization Toolkit) file which can be imported into post-processing tools, for example ParaView. The ANSYS and Geodictformat features are obsolete and will be removed in future releases.

The Operations menu shown in **Figure 3** contains the functions used to generate, modify and reset the RVE(s), if desired.

- Initialize objects: Create / Reset new Object
- Introduce objects: Specify basic dimensions of RVE - **Figure 14** and **Figure 15**
- Distribute objects: Modify particle distribution / allowable overlap settings - **Figure 16**
- Split objects: Split objects in multiple phases according to given fraction
- Transform objects: Change phase and/or type of particles - **Figure 17**
- Set overlap: Specify overlap criteria - **Figure 18**
- Set vol fractions: Specify volume fractions of phases - **Figure 19**



**Figure 3: GeoVal - Operation options**

- Set fluid phases: Specify which phase is fluid
- Voxel operations: Modify shape settings and set sintering parameters - **Figure 20**
- Set Voxel: ??
- Store RVE: Store RVE internally for future use
- Recall RVE: Reset RVE to stored settings

Through the Analysis menu the user can view the current characteristics and metrics of the RVE, as shown in the output console in **Figure 4**. Apart from the basic object and voxel statistics, the program provides information about the chord length, as well as specific details pertaining to the sintering and percolation analyses.

The Bitmap menu - **Figure 5** - allows the user to view a graphical representation of the RVE either as a cross-section (**Figure 21**), or a 3D perspective. The user can modify the orientation, magnification, etc. and also save Bitmap images of the views.

Through the options found in the Fitting menu, GeoVal offers the ability to record the user's operational steps and store them as a macro file. The features can be seen in **Figure 6** and, once completed, the program can be used for batch processing purposes or parameter studies.

In order to customize various settings for GeoVal the user can refer to the Settings menu as shown in **Figure 7**.

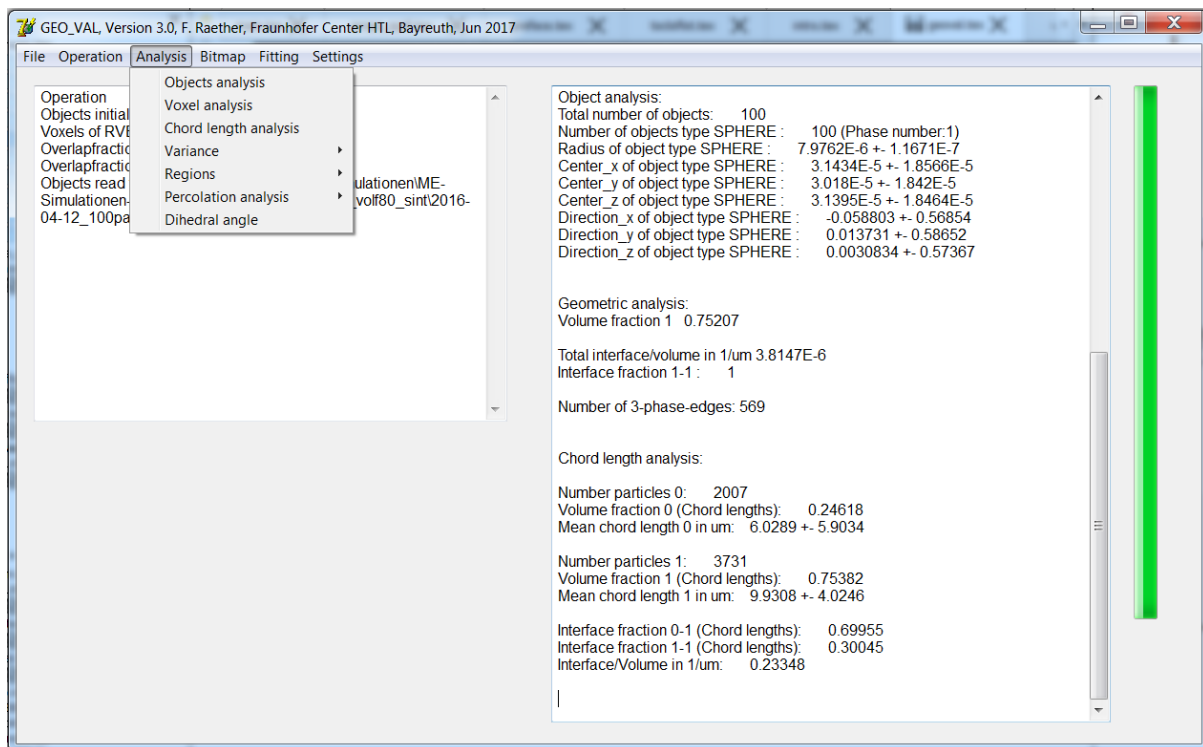


Figure 4: GeoVal - Analysis options

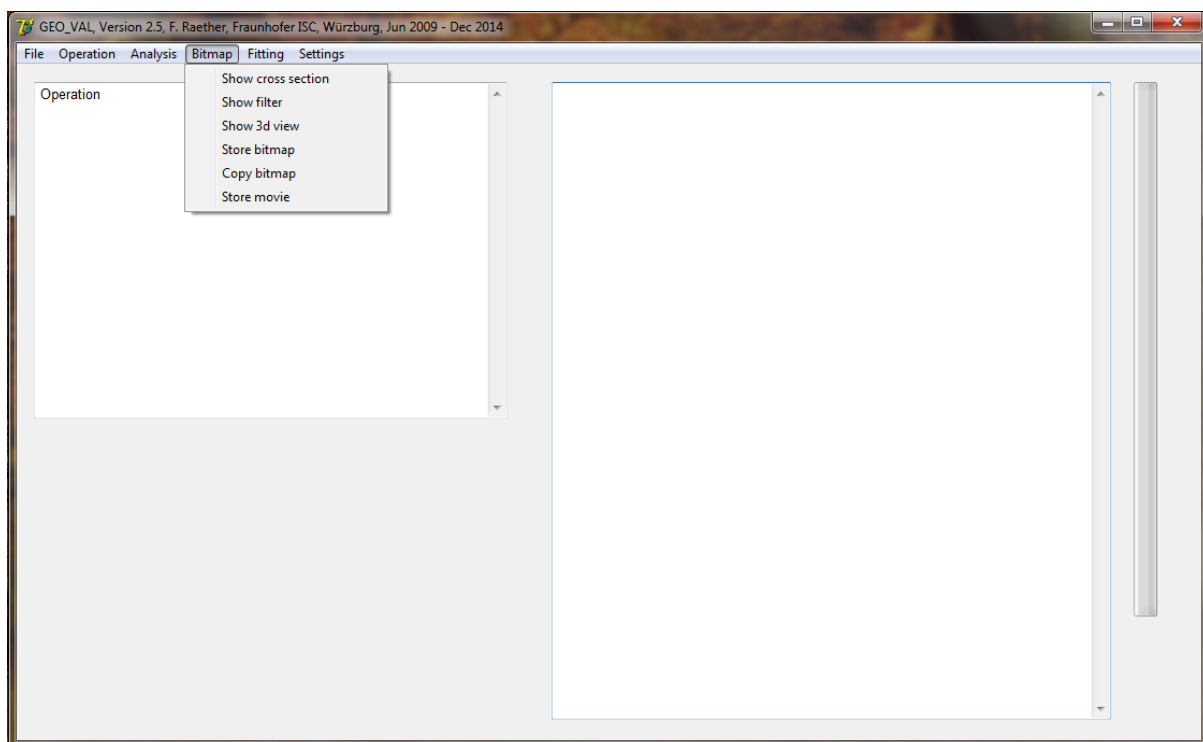


Figure 5: GeoVal - Bitmap options

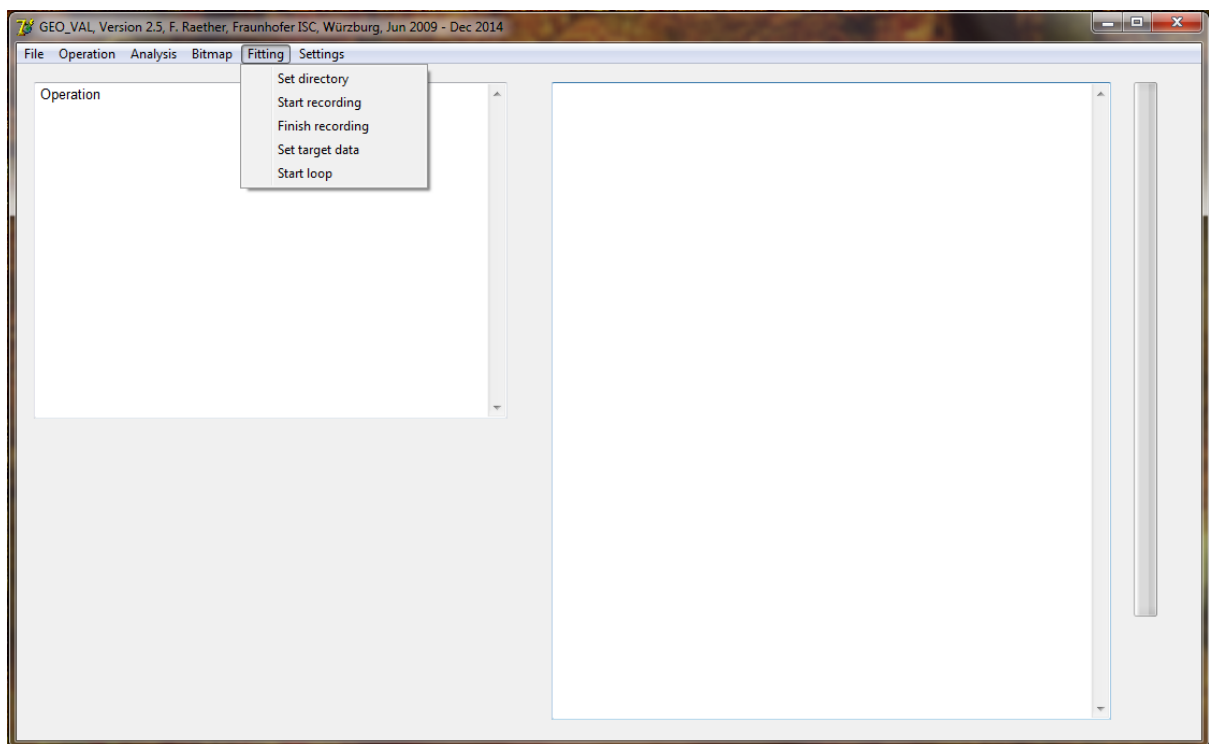


Figure 6: GeoVal - Fitting options

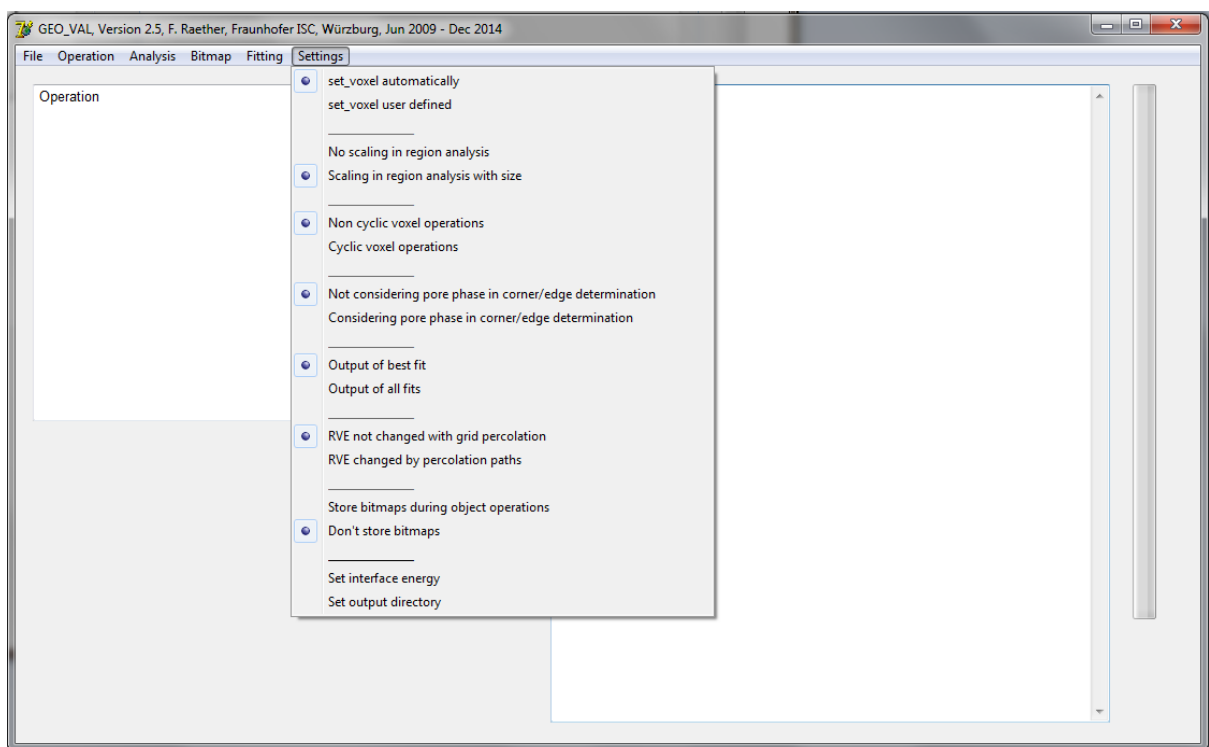


Figure 7: GeoVal - Settings

## 2.4 Procedure

1. Initialize objects
2. Introduce objects
3. Set vol fractions
4. Distribute objects
5. *Optional:*
  - Split objects
  - Transform objects
  - Set overlap
  - Set fluid phases
  - Voxel operations
6. Objects analysis
7. Voxel analysis

### 2.4.1 Sintering

#### Algorithm

Als Input wird eine Voxelstruktur mit den Phasen 0 und 1 benötigt. Die Phase 0 entspricht den Poren, die Phase 1 der Festphase. Objektorientierte Strukturen werden automatisch in Voxelstrukturen konvertiert. Es erfolgt eine Analyse der Partikel in der Voxelstruktur, wobei das RVE an den Rändern periodisch fortgesetzt wird. Die Mittelpunkte aller Partikel werden ermittelt. Voxel, die an einer Korngrenze, d.h. an der Grenze zweier Partikel der Phase 1 liegen, werden anders behandelt als Voxel, die an der Partikeloberfläche liegen, d.h. an der Phasengrenze 0 – 1. Für beide Grenzflächentypen werden spezifische Grenzflächenenergien vom Benutzer definiert. Für Korngrenzen kann zudem eine Verteilungsbreite festgelegt werden, die berücksichtigt, dass Korngrenzen mit unterschiedlicher Orientierung der Körner zueinander eine unterschiedliche Grenzflächenenergie haben können. Die Zuordnung der spezifischen Grenzflächenenergien zu den Korngrenzen zwischen den Partikeln  $i, j$  erfolgt dann mit Hilfe des Zufallszahlengenerator entsprechend der vorgegebenen Verteilungsbreite. Sie ändert sich während der Sinterung bzw. der Berechnung von Gleichgewichtsflächen nicht mehr. Aus dem Verhältnis der Grenzflächenenergie solid – fluid zur Korngrenzflächenenergie ergibt sich der Dihedralwinkel.

Die lokale Grenzflächenenergie eines Voxels ergibt sich aus der Anzahl der Nachbarvoxel, die zu einem anderen Partikel bzw. einer anderen Phase gehören. Die Grenzflächenenergie wird unterschiedlich gewichtet, je nachdem ob die Fremdphasenvoxel direkt über die Seitenflächen, über die Würfelkanten oder die Würfellecken benachbart sind. (Die Wichtungsfaktoren betragen 1,  $\frac{1}{2}$  bzw.  $\frac{1}{4}$ .) Grenzflächenvoxel müssen mindestens an einer Voxelseite an ein Voxel einer anderen Phase oder ein anderes Partikel grenzen. Die lokale Grenzflächenenergie ist bei Voxelstrukturen sehr stark von der Orientierung der Grenzfläche relativ zum RVE abhängig. Grenzflächen, die parallel zu den Seitenflächen

angeordnet sind, haben z.B. eine geringere Energie als Grenzflächen mit niedrigerer Symmetrie. Um dieses Artefakt zu beseitigen, wird in GeoVal auch die lokale Krümmung der Grenzflächen betrachtet. Der Krümmungsradius wird über eine Suchdistanz von typisch 4 Nachbarvoxeln berechnet, die auch an Grenzflächen liegen. D.h., es werden nicht nur die nächsten Nachbarn, sondern auch die übernächsten, dritt- und viertnächsten Grenzflächennachbarn herangezogen. Bei der Berechnung der Krümmung werden die lokalen Grenzflächenenergien der Nachbarvoxel als Wichtungsfaktoren verwendet. Die Krümmung ist positiv, wenn sie in Bezug auf das Partikelzentrum konvex ist und negativ im umgekehrten Fall. Bei Fluidvoxeln gilt: eine Krümmung ist negativ wenn sie in Bezug auf das benachbarte Partikelzentrum konvex ist und umgekehrt. Die Krümmung wird als zusätzliches Maß für die Grenzflächenenergie verwendet.

Es gibt 4 verschiedene Typen von Diffusion:

1. Oberflächendiffusion: Dabei werden ein Solidvoxel an der Fluidgrenze sowie ein Fluidvoxel an der Solidgrenze miteinander vertauscht
2. Korngrenzglättung: Dabei werden zwei Solidvoxel, die zu verschiedenen Partikeln gehören und an einer Korngrenze liegen, miteinander vertauscht
3. Korngrenzdifffusion: Dabei wird ein Fluidvoxel, das an einer Korngrenze liegt, in ein Solidvoxel konvertiert
4. Kornwachstum: Dabei wird ein Solidvoxel, das an einer Korngrenze liegt, in ein Voxel des benachbarten Partikels konvertiert

Die Voxel des RVE werden in einer Zufallsreihenfolge getestet. Für Diffusionsprozesse werden nur solche Grenzflächenpartikel ausgewählt, deren lokale Grenzflächenenergie über einem Schwellwert liegt. Der Schwellwert liegt bei dem Energiemittelwert plus der doppelten Standardabweichung der Grenzflächenenergien des entsprechenden Grenzflächentyps (Fluidvoxel an Festpartikel, Fluidvoxel an Korngrenze, Solidvoxel an Fluidgrenze, Solidvoxel an Korngrenze). Gemäß Gleichung 1 wird zudem geprüft, ob auch ein Voxel mit einer lokalen Grenzflächenenergie unterhalb des Schwellwerts diffundieren darf:

$$p = e^{\frac{-(E_{lim}-E)}{\sigma f}} \quad (1)$$

mit  $p$  = Wahrscheinlichkeit,  $E_{lim}$  = Energieschwellwert,  $E$  = lokale Grenzflächenenergie,  $\sigma$  = Standardabweichung,  $f$  = vom Benutzer festgelegter Multiplikator. Wenn der Zufallszahlengenerator (Intervall (0,1)) einen Wert  $< p$  liefert, wird das Voxel akzeptiert. Innerhalb der Suchdistanz (typisch 4 Voxel) um das zunächst im RVE ausgewählte Testvoxel wird unter den akzeptierten Grenzflächenvoxeln dasjenige mit der größten positiven Krümmung für die Diffusion verwendet. Je nach Diffusionstyp wird dabei nur nach dem für diesen Typ relevanten Grenzflächenvoxel gesucht. Bei den Typen 1 und 2 wird zusätzlich noch ein zweites Voxel für den Austauschvorgang benötigt. Dieses muss innerhalb der Suchdistanz um das zuerst ausgewählte Voxel liegen. Die maximale Schrittweite für die Diffusion entspricht also der Suchdistanz.

Nach Identifikation des einen oder der beiden für die Diffusion benötigten Voxel wird der Austausch durchgeführt. Vor und nach dem Austausch wird die Summe der Krümmung aller Grenzflächenvoxel im Abstand der Suchdistanz zu dem oder den diffundierenden



Voxeln berechnet: Ekvor, Eknach. Ist die Summe vorher größer als die Summe nachher so wird die Diffusion durchgeführt. Falls nicht wird nach Gleichung 2 wieder eine Wahrscheinlichkeit berechnet und per Zufallszahlengenerator entschieden, ob die Diffusion ausgeführt wird:

$$p = e^{\frac{-(Ek_{nach}-Ek_{vor})}{\sigma f}} \quad (2)$$

Mit  $\sigma$  = Standardabweichung der Krümmungsenergie des jeweiligen Grenzflächentyps und  $f$  = nutzerdefinierter Multiplikator. Nach der Diffusion wird die Krümmungsenergie der diffundierenden Voxel und der Nachbarvoxel korrigiert.

Im Sintermodus ist die Anzahl der Voxel  $ngb_{diff}$ , die eine Korngrenzdiffusion machen (Typ 3), vorgegeben. Es wird eine Schleife so lange durchlaufen bis diese Anzahl erreicht ist. Dann erfolgt die Ausgabe der Zwischenergebnisse. Außerdem werden alle Partikel, die weniger Voxel haben als ein Schwellwert (ca. 100 Voxel) gelöscht. Letzteres ist nötig um Artefakte zu beseitigen, die bei der Diffusion entstehen. Die Partikelzentren werden neu berechnet und die Schleife wird im nächsten Schritt durchlaufen. Ob ein ausgewähltes Fluidvoxel an einer Korngrenze in ein Solidvoxel konvertiert werden darf, richtet sich nach der Anzahl der Voxel, die auf der entsprechenden Korngrenze bereits entsprechend Diffusionstyp 2 diffundiert sind und nach der Größe der Korngrenze:

$$\frac{ngb_{smooth}}{ngb} = \alpha_{ij} \frac{n_{ijdiff}}{n_{ij}} \quad (3)$$

Mit  $ngb_{smooth}$  = Anzahl der Voxel, die Korngrenzglättung erfahren haben,  $ngb$  = Gesamtzahl aller Voxel auf den Korngrenzen,  $\alpha_{ij}$  = korngrenzenspezifischer Faktor,  $n_{ijdiff}$  = Anzahl der Voxel an der Korngrenze zwischen den Partikeln  $i$  und  $j$ , die durch Korngrenzdiffusion konvertiert wurden,  $n_{ij}$  = Gesamtzahl der Fluidvoxel am Korngrenzrand zwischen den Partikeln  $i$  und  $j$ . Auch die anderen beiden Diffusionstypen werden durch die Korngrenzglättung gesteuert:

$$\begin{aligned} \frac{nsur_{diff}}{nsur} &= r_{surf} \frac{ngb_{smooth}}{ngb} \\ ngb_{growth} &= r_{GG} ngb_{smooth} \end{aligned} \quad (4)$$

Mit  $nsur_{diff}$  = Voxel an der Fluid-Solid-Phasengrenze, die nach Diffusionstyp 1 diffundiert sind,  $nsur$  = Gesamtzahl der Voxel an der Fluid-Solid-Phasengrenze,  $r_{surf}$  = Verhältnis von Oberflächen- zu Korngrenzdiffusion (wird vom Nutzer festgelegt),  $ngb_{growth}$  = Anzahl der Voxel, die nach Diffusionstyp 4 diffundiert sind,  $r_{GG}$  = Verhältnis von Kornwachstum zu Korngrenzdiffusion (wird vom Nutzer festgelegt). Der Diffusionsalgorithmus lässt Abweichungen von 5 % zu den in Gleichung 3 bis 5 definierten Sollwerten zu. Der Sintermodus wird beendet, wenn eine vorgegebene Enddichte erreicht ist.

Im Oberflächendiffusionsmodus wird die gesamte Diffusion nach Typ 1 ausgeführt, bis eine bestimmte Anzahl von erfolgreichen Diffusionsprozessen erreicht ist. Dann erfolgen - wie beim Sintern - die Ausgabe der Zwischenergebnisse, das Löschen kleiner Partikel und die Neuberechnung der Partikelzentren. Der Oberflächendiffusionsmodus wird beendet,

wenn die Gesamtenergie sich von Iterationsschritt zu Iterationsschritt mindestens 3-mal hintereinander um weniger als 0.1 % geändert haben.

Es gibt auch einen kombinierten Modus aus Oberflächendiffusion und Sintern. Dieser führt für die anfängliche Struktur die Oberflächendiffusion bis zur Konvergenz aus. Anschließend wird die Anfangsstruktur für die nächste Iterationsstufe erzeugt, indem die als kugelförmig angenommenen Partikel der Anfangsstruktur so weit aufgebläht werden, bis die jeweilige Soll-Zwischendichte erreicht ist. Dann erfolgt wieder Oberflächendiffusion bis zum Gleichgewicht usw. Der kombinierte Modus wird beendet, wenn die vorgegebene Enddichte erreicht ist.

## Procedure

Zunächst muss eine Anfangsstruktur erzeugt werden, die nur aus den Phasen 0 und 1 besteht. Dies lässt sich durch Analysis | Voxel analysis überprüfen. Ggf. müssen Phasen mit anderer Nummer in diese Phasen konvertiert werden: Operation | Voxel operations | Transform phase. Dann müssen die Grenzflächenenergien festgelegt werden: Settings| Set interface energy. Man benötigt auf jeden Fall die beiden Energien für die Korngrenzen (1-1) und die Solid-Fluid-Phasengrenze (0-1). Bei Bedarf kann auch eine Verteilungsbreite (FWHM=Full width at half maximum) für die gaussförmige Verteilung der Grenzflächenenergien um den Mittelwert definiert werden. Die Daten werden mit „ok“ abgespeichert. Dann sollte ein Dateiordner für den – umfangreichen - Programoutput definiert werden: Settings| set output directory.

Anschließend wird für eine Gleichgewichtsberechnung Operation|Voxel operation| surface diffusion aufgerufen und durch Klick auf den „No“-Button auf „Yes“ eingestellt. „Phase“ sollte auf dem voreingestellten Wert „-1“ bleiben. „Repetitions“ bezeichnet die oben erwähnte Suchdistanz, die auf 4 Voxel voreingestellt ist. Die Suchdistanz kann verändert werden. Sie sollte nicht kleiner als 3 und nicht größer als 6 sein. Mit kleinerer Suchdistanz nehmen Rechenzeit und Genauigkeit ab. Schließlich kann noch der in Gleichung 2 erwähnte Multiplikator f („Multiplier for narrow jump probability“) verändert werden. Er ist auf 4 voreingestellt. Eine Verringerung erhöht die Diffusionsgeschwindigkeit, verschlechtert aber unter Umständen die Genauigkeit. Nach Einstellung der Parameter wird der Algorithmus durch „ok“ gestartet. Das Programm gibt ein Protokoll mit den Zwischenergebnissen aus und speichert die Voxelstrukturen der Zwischenzustände im GeoVal-Format ab. Außerdem werden die Strukturen für die spätere Visualisierung auch als Paraview-Files abgespeichert.

Für eine Sinterberechnung wird durch Klick auf den entsprechenden „No“-Button bei Operation|Voxel operation| Sintering der Wert „single“ eingestellt. Hierbei wird eine einzelne Sinterung für die vorliegende Voxelstruktur durchgeführt. „Phases“, „Repetitions“ sowie „Multiplier for narrow jump probability“ haben die gleiche Bedeutung wie im vorherigen Absatz. Zusätzlich müssen Dichte und Molgewicht für die Festphase 1 eingegeben werden. Außerdem werden ein „Ratio surface /GB-Diffusion“ und ein „Ratio of Grain growth /GB-diffusion“ abgefragt. Sie entsprechen den Faktoren  $r_{surf}$  und  $r_{GG}$  in Gleichung 4 und 5. Schließlich benötigt der Algorithmus noch die Enddichte bis zu der gesintert werden soll und die Schrittweite, in der Zwischenergebnisse ausgegeben werden sollen. Die Sinterung wird durch Klick auf „ok“ gestartet. Das Programm gibt ein Protokoll mit den Zwischenergebnissen aus und speichert die Voxelstrukturen der Zwischenzustände im

GeoVal-Format ab. Außerdem werden die Strukturen für die spätere Visualisierung auch als Paraview-Files abgespeichert.

Sinterberechnungen können automatisiert nacheinander auch für mehrere Ausgangsstrukturen durchgeführt werden. Dazu wird durch zweimaligen Klick auf den „No“-Button bei Operation|Voxel operation| Sintering der Wert „series“ eingestellt. Die Parameter haben die gleiche Bedeutung wie im vorherigen Fall. Nach Klick auf „ok“ wird dann jedoch abgefragt, welche Files für die Sinterserie ausgewählt werden sollen. Diese müssen sich in einem gemeinsamen Ordner befinden, werden markiert und durch Klick auf „ok“ wird die Sinterserie gestartet. Für jede Ausgangsstruktur wird automatisch ein eigener Unterordner angelegt, in dem die Ergebnisse gespeichert werden. Nach einer Sinterserie können die Ergebnisse zu den einzelnen Ausgangsstrukturen automatisch gemittelt werden. Dazu wird durch dreimaligen Klick auf den „No“-Button bei Operation|Voxel operation| Sintering der Wert „summary“ eingestellt. Nach Klick auf den „ok“ Button wird im Zielordner ein Mittelwert-File erstellt.

Ergänzung (G. Seifert, 20.12.2016):

Aufgrund der langen Rechenzeit (mehrere Stunden bis zu 1 Tag für eine Sinterung) ist diese Option nicht besonders praktikabel; alternativ hat sich bewährt, durch parallelen Programmlauf (jeder Start von GeoVal nutzt unter Windows nur einen der vorhandenen Prozessorkerne, z.B. 12 am ISC0123) mit vorab erzeugten RVEs gleicher Zusammensetzung die erforderlichen ca. 10 Sinterungen parallel (ohne Geschwindigkeitseinbuße) abzuarbeiten, und anschließend die Mittelung „von Hand“ (z.B. in Origin) durchzuführen.

1. Create structure
2. Set Phase: 0 or 1
3. Set Interface Energy
  - Grain boundaries
  - Solid-fluid boundaries
4. Surface diffusion
5. Repetitions
6. Multiplier for narrow jump probability
7. Sintering
8. Ratio surface / GB-Diffusion
9. Ratio of Grain Growth / GB-Diffusion

## 3 VoxSM

### 3.1 Input

- \*.val (Voxel)

The Voxel file - **Figure 13** - also contains information about the number of voxels in each direction (blue box), the characteristic length in  $\mu\text{m}$ , followed by the parameters of each particle in sequential order (6 integer number starting with the phase and ending with the particle ID).

### 3.2 Output

- \*.node

File which contains number of nodes, vertices per element, and the listing of node ID, X, Y, and Z coordinates.

- \*.smesh

File which contains information about element faces.

- \_main.win

File which sets the element types, material parameters, loads the other input files, and saves the output.

- \_ELC.win

File which sets material properties, loading conditions, solving parameters and post-processing output for mechanical analyses.

- \_IS.win

File which sets material properties, loading conditions, solving parameters and post-processing output for electrical (impedance) analyses.

- \_WLF.win

File which sets material properties, loading conditions, solving parameters and post-processing output for thermal analyses.

- 1\_node.win

File which sets the nodal positions and labels.

- 2\_SHELL\_GB\_RVE.win

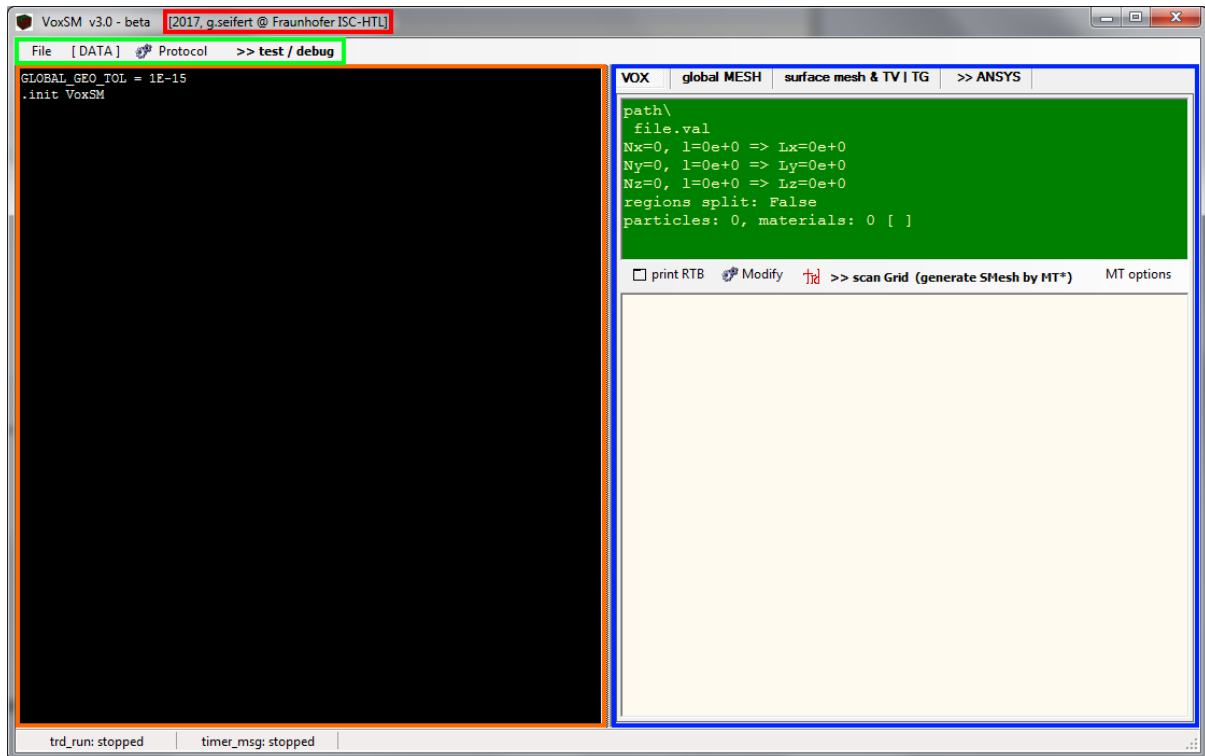
File which assigns shell elements to each particle.

- 3\_CM\_s\_mesh.win

File which assigns the components used for the volumetric mesh.

### 3.3 Interface

The opening window of VoxSM is shown in **Figure 8**. Similarly to GeoVal, the red box contains information about the current version, the green box shows the menu bar, the blue box contains the settings menu(s), and the brown box shows the output console.



**Figure 8: VoxSM - Start screen**

In the File menu the user can load/save the voxel file (\*.val), as well as a global mesh file which can be displayed in the external program Tetview - **Figure 9**.

Text. Text. Text. **Figure 10**.

The Protocol menu - **Figure 11** - allows the user to record and save the operational steps like a macro, which can then be used for batch processing.

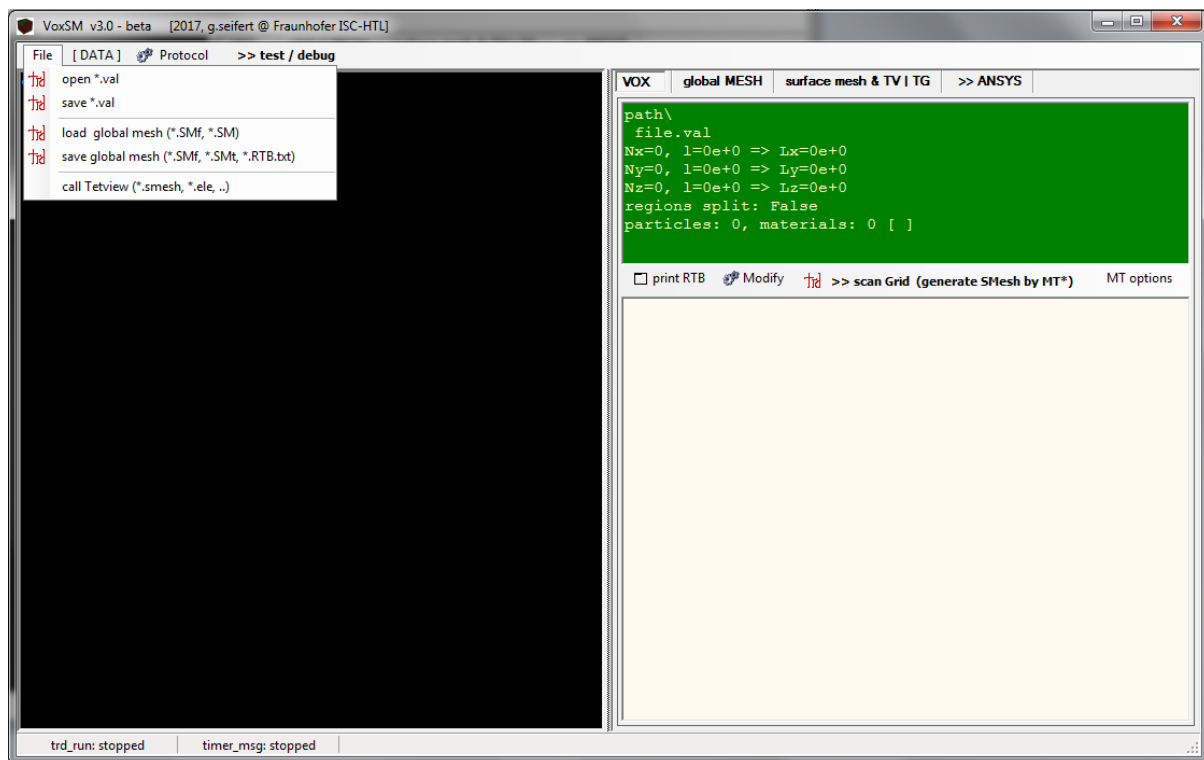


Figure 9: VoxSM - File options

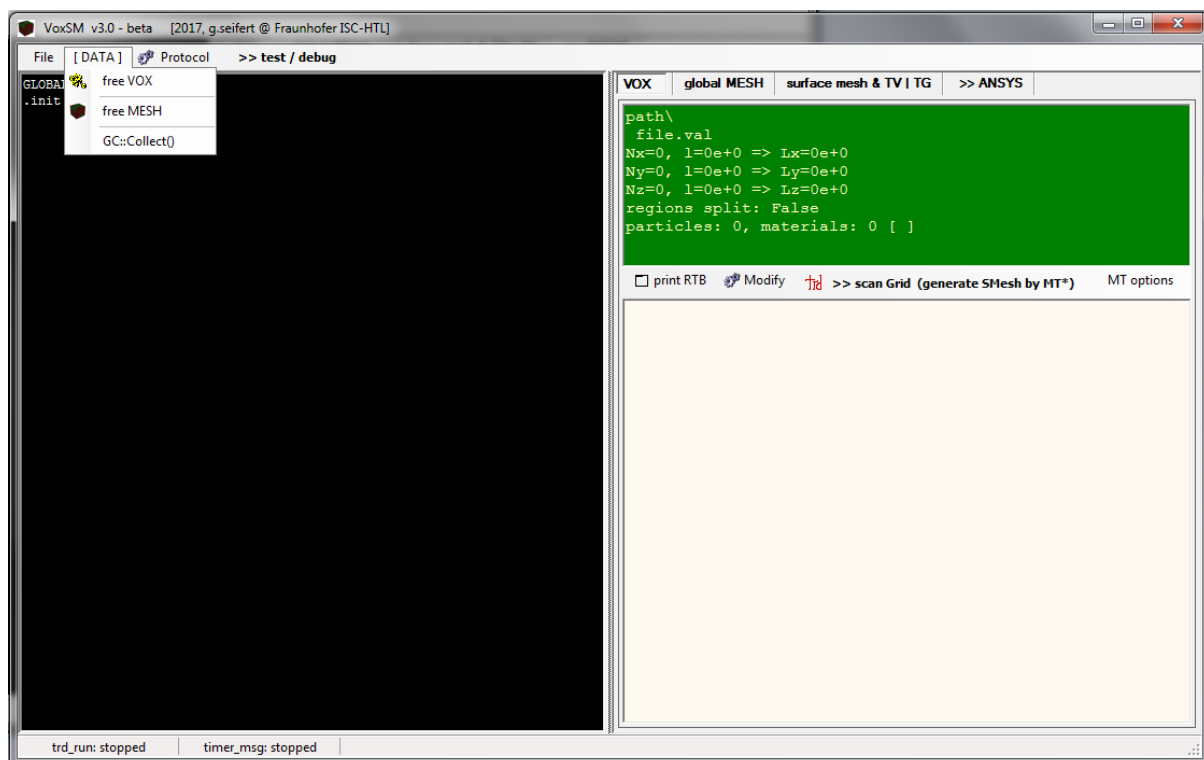


Figure 10: VoxSM - Data options

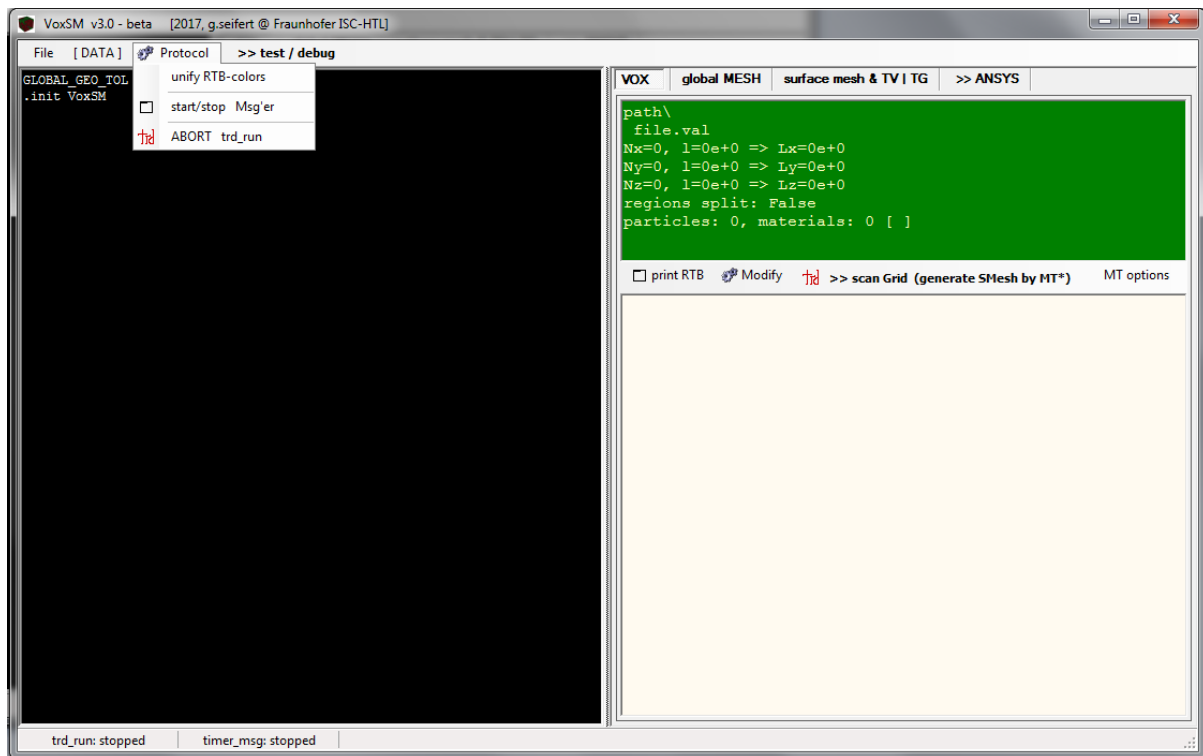


Figure 11: VoxSM - Protocol options

### 3.4 Procedure

1. File > Open \*.val
2. VOX - model RTB > Modify > split regions (>100)
3. VOX - scan Grid
4. global MESH - model RTB > global mesh statistics > get Fs statistics
5. global MESH - smooth
  - fix Vs with near neighbours
  - Tests
6. global MESH - edge heap and simplify tests
  - FA max: sollte ca. 10x die tatsächliche FA max (aus Fs statistics) sein
  - FA min: muss größer 10-20 sein, um Probleme in ANSYS zu vermeiden
  - eL(r4) max: in der Größenordnung von eL max (aus Fs statistics) anlegen („Kornecken“ ??)
  - eL(r3) max: „Kanten“, sollte ca. 3-4 mal so groß wie eL(r4) sein
  - d min (pinch-close): wie „fix Vs with near neighbours“ beim smoothen
7. global MESH - do simplify mesh

## Notes

Ziel der Vereinfachung sind 20.000 - 50.000 Knoten; ggf. noch weitere Runden Simplify mit größeren FA oder eL starten.

Bemerkungen zu VoxSM: Vs = Vertices Das erste Netz nach Einlesen liegt exakt auf der Voxel-Struktur. Die Funktion Smooth macht daraus ein Netz für „echte“ Partikel. Großes  $k_{BP}$  beim Smoothen (z.B. 0.5) macht wellige Oberflächen Zwischen zwei sich berührenden Kugeln bildet sich eine „Brücke“ beim Smoothen; gilt analog für „Kontakt“ zum Rand des RVE Bei Kugeln: erst nur Flächen, dann Kanten glätten, dabei kleine skip distance wählen Es scheint immer eine Restwelligkeit von der Voxel-Struktur übrig zu bleiben (Pixel am Rand der RVE nicht fixieren, sonst Überschneidungen der Dreiecke ) Max./min. Flächen und Längen sind beim Vereinfachen sehr wichtig.

Parameter bei Smooth: skip distance (fix Vs with near neighbours): unterhalb dieser Größe werden Knoten nicht verschoben – sollte kleiner als die Hälfte der minimalen Länge der Elemente (eLmin) sein.



## 4 ANSYS APDL

### 4.1 Input

- `_main.win`  
File which sets the element types, material parameters, loads the other input files, and saves the output.
- `_ELC.win`  
File which sets material properties, loading conditions, solving parameters and post-processing output for mechanical analyses.
- `_IS.win`  
File which sets material properties, loading conditions, solving parameters and post-processing output for electrical (impedance) analyses.
- `_WLF.win`  
File which sets material properties, loading conditions, solving parameters and post-processing output for thermal analyses.
- `1_node.win`  
File which sets the nodal positions and labels.
- `2_SHELL_GB_RVE.win`  
File which assigns shell elements to each particle.
- `3_CMes_mesh.win`  
File which assigns the components used for the volumetric mesh.

### 4.2 Output

- `out_elc.out`  
Text. Text. Text.
- `testmat1(or 2).out`  
Text. Text. Text.
- `_WLF.win`  
Text. Text. Text.
- `therm_Spannungen.win`  
Text. Text. Text.
- `wak.win`  
Text. Text. Text.

### 4.3 Interface

Text. Text. Text. Text. Text. Text. Text. Text. Text.

### 4.4 Procedure

Modify and run batch files.

## 5 Crystal

### 5.1 Input

- `_ELCs.win`  
Text. Text. Text.
- `_IS.win`  
Text. Text. Text.
- `_WLF.win`  
Text. Text. Text.
- `therm_Spannungen.win`  
Text. Text. Text.
- `wak.win`  
Text. Text. Text.

### 5.2 Output

- `*.fem`  
Text. Text. Text.
- `*.out`  
Text. Text. Text.

### 5.3 Interface

Text. Text. Text. Text. Text. Text. Text. Text. Text.

### 5.4 Procedure

Diagonalise parameter matrix.

## 6 References

- [1] F. Raether and M. Iuga, “Effect of particle shape and arrangement on thermoelastic properties of porous ceramics,” *Journal of the European Ceramic Society*, vol. 26, no. 13, pp. 2653–2667, 2006.
- [2] M. Iuga and F. Raether, “Fem simulations of microstructure effects on thermoelastic properties of sintered ceramics,” *Journal of the European Ceramic Society*, vol. 27, no. 2, pp. 511–516, 2007.
- [3] T. Müller and F. Raether, “3d modelling of ceramic composites and simulation of their electrical, thermal and elastic properties,” *Computational Materials Science*, vol. 81, pp. 205–211, 2014.
- [4] D. Winkler, T. Staab, T. Müller, and F. Raether, “Using a novel microstructure generator to calculate macroscopic properties of multi-phase non-oxide ceramics in comparison to experiments,” *Ceramics International*, vol. 42, no. 1, pp. 325–333, 2016.

21

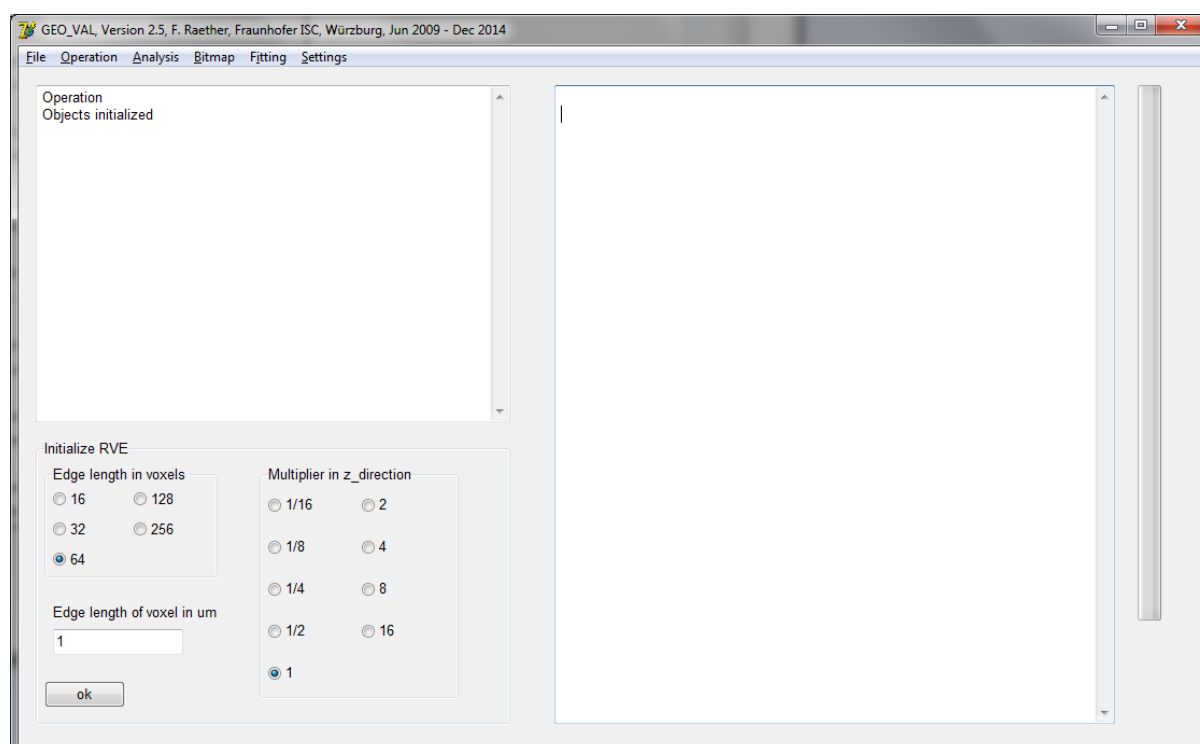


Figure 14: Appendix - Introduce objects

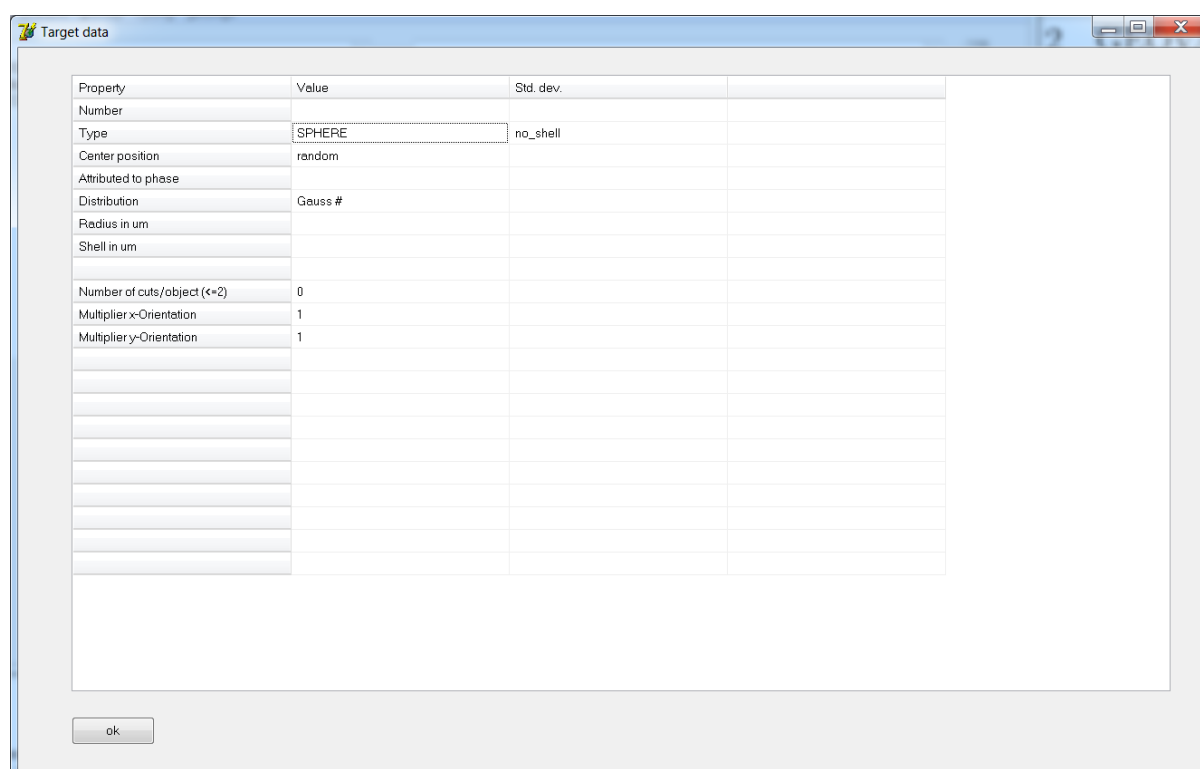
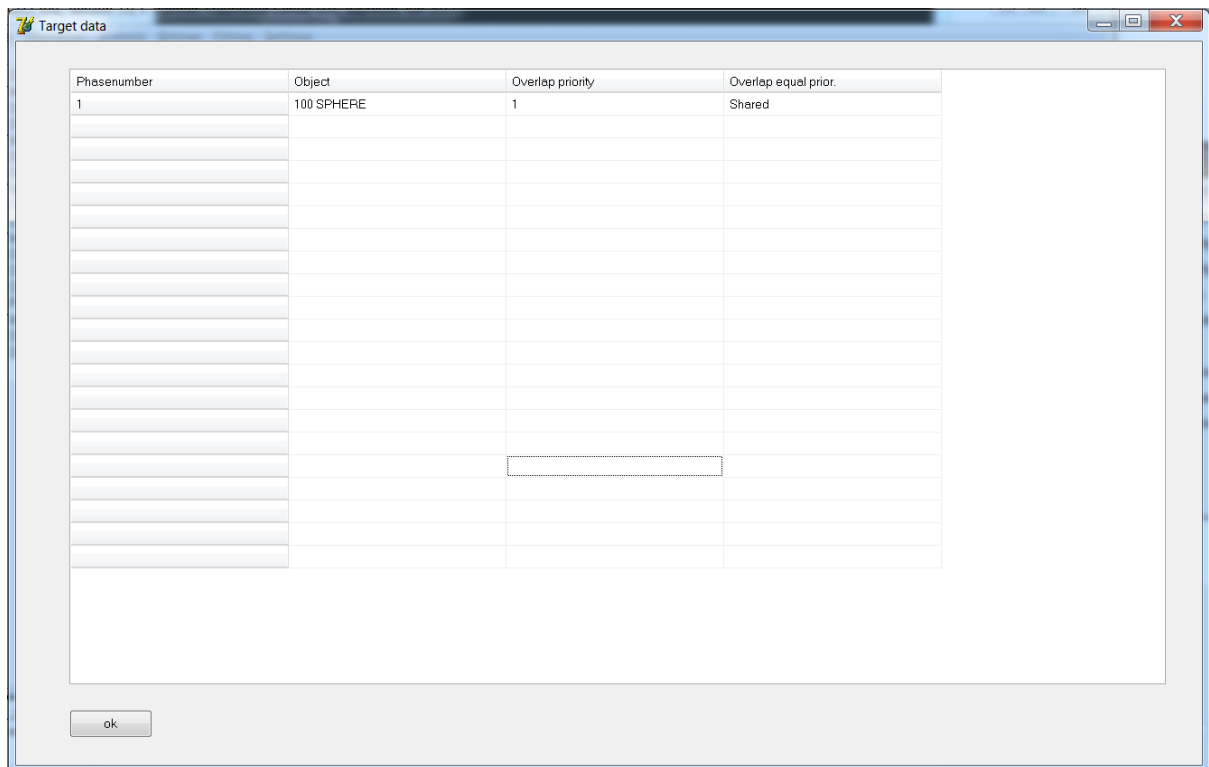


Figure 15: Appendix - Introduce objects 2

Figure 16: Appendix - Distribute objects

Figure 17: Appendix - Transform objects



**Figure 18: Appendix - Set overlap**

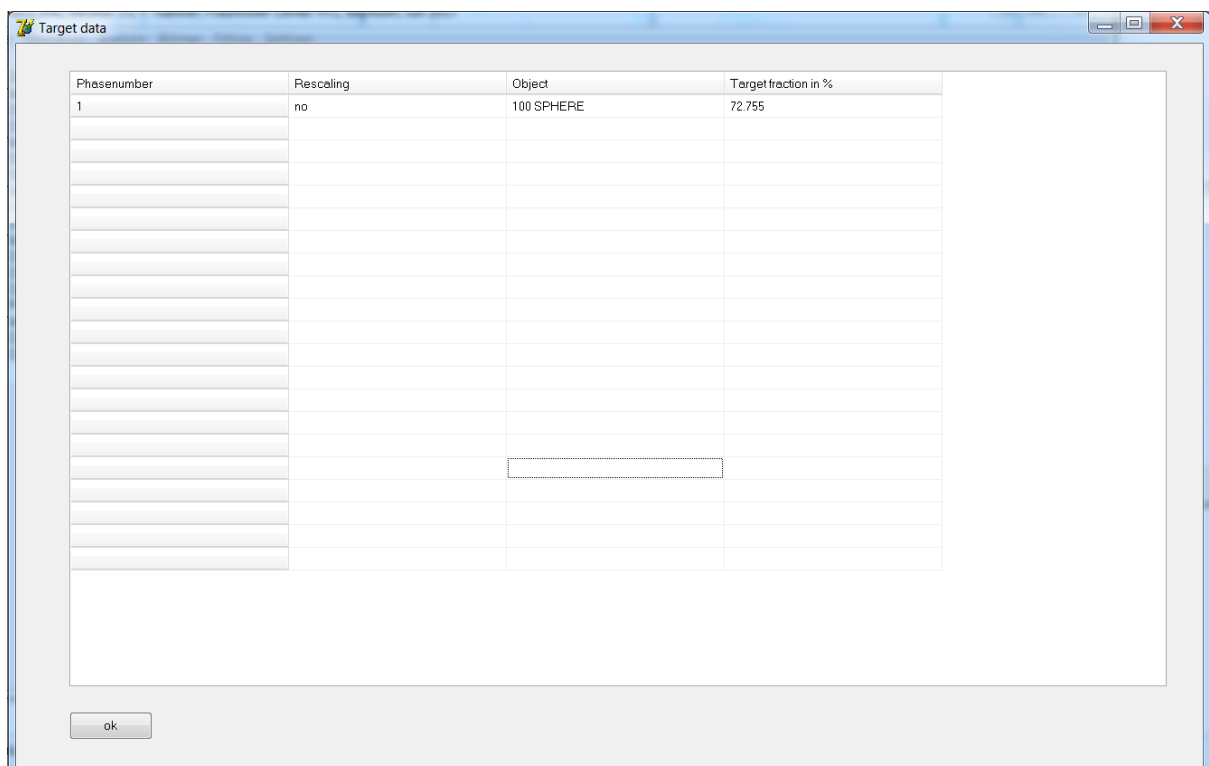


Figure 19: Appendix - Set volume fractions





## 7.2 VoxSM

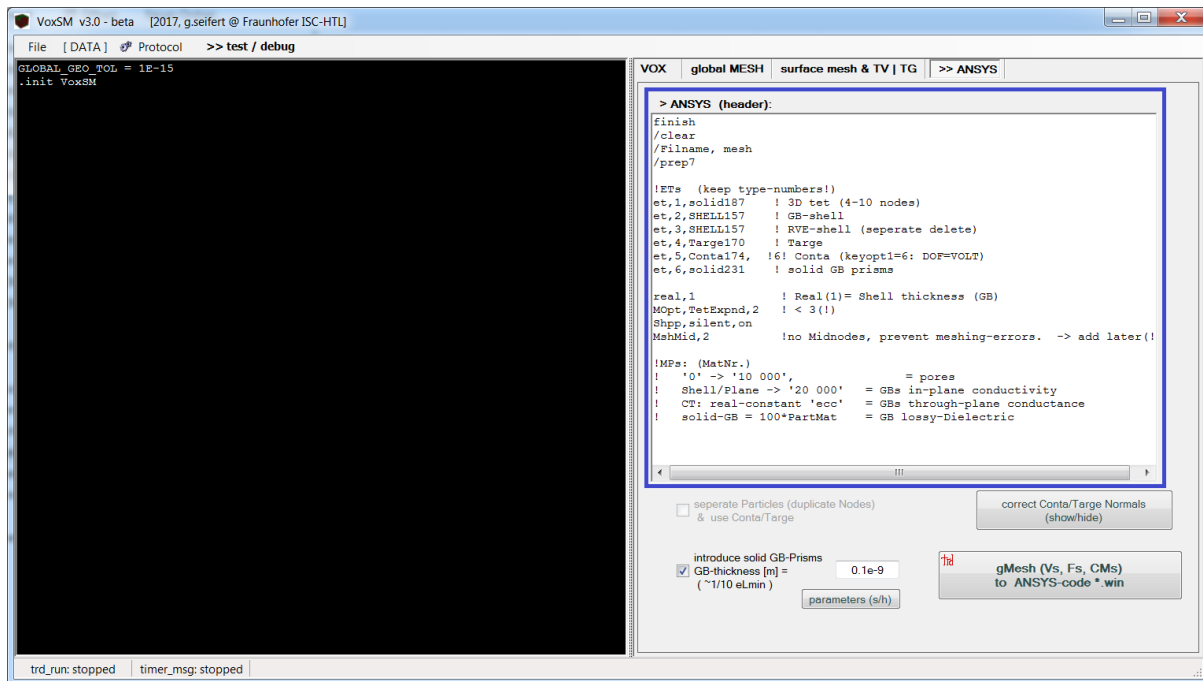


Figure 22: Appendix - Ansys APDL header in VoxSM