

Kerstin Heinen

**Mikrostrukturelle Orientierungszustände strömender Polymerlösungen
und Fasersuspensionen**

Abstract

In this work numerical calculations of flowing polymer solutions and fiber suspensions are done with micro-macro models. The influence of the flow field on the microstructural orientation is investigated. Polymer solutions are modelled with spring dumbbell models, operating on different length scales. The first part deals with rheometric flows of polymer solutions and especially large amplitude oscillatory shear (LAOS). LAOS-flow is established as an important tool for experimental rheological characterisations but so far not discussed in the literature for open and closed spring dumbbell models. Therefore in this work the Fokker-Planck equation of a spring dumbbell model with nonlinear spring force law is solved deterministically with a finite-difference method. With the change from a bead-fixed spherical coordinate system to a spring-centered coordinate system the size of the configuration distribution space was dramatically reduced and the computation efficiency was improved. Detailed parametric model studies in LAOS-flow were made feasible with the underlying deterministic methods for the open spring dumbbell model. With the implemented numerical schemes calculations with a dimensionless shear stress amplitude (Weissenberg number) of $We = 15$ were realised.

With the models FENE-L, -P and -CR closed spring dumbbell models were implemented and investigated additionally. With the second order configuration tensor descriptive informations about the orientation state could be obtained. As one concluding result, the FENE-L model was shown to be a good approximation to the open spring dumbbell model in oscillatory shear.

In a second part this work compares experimental investigations and numerical calculations with closed micro-macro models for fiber suspensions in macroscopic flow fields quantitatively. A concentrated glass fiber suspension was modelled respecting fiber-fiber interactions. The invariant based closure approximation IBOF-5 from CHUNG and KWON was validated with experimental results from YASUDA et al. Although the model parameters were determined with empirical correlations from literature, which did not promise to be suitable for any fiber suspension, the numerical results were in good agreement with experimental characteristics of the fiber orientation state in the flow around a cylinder. From the numerical calculation the main fiber orientation angle was predicted quite accurate, only the width of the orientation distribution function was underestimated. Additionally the influence of different closure approximations on the fiber orientation state was discussed with the flow through a 90° - bend. The famous hybrid closure differs a lot from the results with the IBOF-5 closure and was examined as inappropriate for the prediction of fiber orientation state in macroscopic flow fields.

Kerstin Heinen

**Mikrostrukturelle Orientierungszustände strömender Polymerlösungen
und Fasersuspensionen**

Zusammenfassung

In der vorliegenden Arbeit wurden Strömungen von Polymerlösungen und Fasersuspensionen mit Mikro-Makro-Modellen numerisch berechnet und der Einfluss auf den mikrostrukturellen Orientierungszustand charakterisiert. Für Polymerlösungen kamen Feder-Hantel-Modelle unterschiedlicher Modellierungstiefe zum Einsatz. Ziel eines ersten Arbeitsteils war die Berechnung viskosimetrischer Strömungen von Polymerlösungen und insbesondere der oszillierenden Scherung mit großer Deformationsamplitude (LAOS-Strömung). Diese ist für die experimentelle, rheologische Charakterisierung bedeutsam, jedoch bisher in der Literatur für offene und geschlossene Feder-Hantel-Modelle nicht diskutiert. Für ein offenes Feder-Hantel-Modell mit nichtlinearem Federkraftgesetz wurde die Fokker-Planck-Gleichung deterministisch mit Finiten-Differenzen numerisch gelöst. Die Größe des zu diskretisierenden Konfigurationsraumes konnte durch ein federmittenzentriertes Koordinatensystem gegenüber dem bisher üblichen kugelformzentrierten Koordinatensystem verkleinert werden, und der Rechenaufwand für die numerische Lösung der Differentialgleichung wurde reduziert. Dadurch und durch die Genauigkeit der deterministischen Methode wurden Parameterstudien insbesondere bei geringen Frequenzen sowie bei großen Deformationsamplituden für das offene Feder-Hantel-Modell ermöglicht. Für die Fokker-Planck-Gleichung hat sich der numerische Algorithmus bis zu einer dimensionslosen Schergeschwindigkeitsamplitude (Weissenberg-Zahl) von $We=15$ als sehr stabil erwiesen.

Mit den geschlossenen Modellen FENE-L, -P und -CR wurden drei Ansätze mit geringerer Modellierungstiefe implementiert. Insbesondere die Berechnung der durch den Konfigurationstensor aufgespannten Orientierungsellipsoiden lieferte in der LAOS-Strömung aussagekräftige Informationen über den mikrostrukturellen Orientierungszustand, wie z. B. den Orientierungsgrad der Feder-Hanteln in eine Richtung. Es hat sich gezeigt, dass das geschlossene FENE-L Modell in oszillierender Scherung eine gute Näherung an das offene Feder-Hantel-Modell darstellt, wobei die mittlere Federlänge durch das geschlossene Modell allerdings etwas überschätzt wird.

Im zweiten Teil der Arbeit wurden Berechnungsergebnisse geschlossener Mikro-Makro-Modelle erstmals quantitativ mit experimentellen Untersuchungen für eine konzentrierte Glasfasersuspension mit Faser-Faser-Wechselwirkungen in einer makroskopischen Strömung verglichen. Anhand einer Zylinderumströmung wurde das implementierte Modell unter Verwendung des IBOF-5-Schließungsansatzes von CHUNG und KWON erfolgreich mit experimentellen Literaturergebnissen von YASUDA et al. validiert. Obwohl im Fasermodell empirische Standardparametersätze verwendet wurden, ist die Übereinstimmung zwischen der Strömungsberechnung und den experimentellen Ergebnissen so gut, dass dieses geschlossene Modell als praxistauglich für die makroskopische Strömungsberechnung eingestuft werden kann. Lediglich die Verteilungsbreite der Orientierung wurde im Zylindernachlauf etwas unterschätzt. Ergänzend wurde der hybride Schließungsansatz für die Strömung durch einen 90° -Krümmer mit den Ergebnissen des IBOF-5 Modells verglichen. Es wurde gezeigt, dass der hybride Schließungsansatz die lokale Breite der Orientierungsverteilung unterschätzt.